ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 5933

А.Л. Куземский, К. Валясек

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ЗАМЕЧАНИЕ О ВЫЧИСЛЕНИИ ЕСТЕСТВЕННОЙ ШИРИНЫ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ АТОМА МЕТОДАМИ НЕРАВНОВЕСНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

1971

P4 - 5933

А.Л. Куземский, К. Валясек

ЗАМЕЧАНИЕ О ВЫЧИСЛЕНИИ ЕСТЕСТВЕННОЙ ШИРИНЫ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ АТОМА МЕТОДАМИ НЕРАВНОВЕСНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Направлено в Letters al Nuovo Cimento

1. В работе Д.Н. Зубарева и авторов [1] с помощью метода неравновесного статистического оператора [2] было получено уравнение типа Шредингера с затуханием для динамической системы, слабо взаимодействующей с термостатом. В указанной работе [1] применимость развитого общего метода к конкретным задачам была продемонстрирована на примере вычисления сдвига энергии и затухания системы электронов и экситонов, взаимодействующих с фононами решетки. Значения сдвига энергии и затухания как для электронов, так и для экситонов совпадают с вычисленными другими методами [3,4].

В настоящей заметке мы вычислим естественную ширину спектральных линий атомной системы, следуя методу работы [1], и покажем, что результат совпадает с хорошо известной величиной (см., например, [5,6]).

2. Хорошо известно [5,6], что возбужденные уровни изолированной атомной системы, имея вероятность высветиться из-за взаимодействия с собственным электромагнитным полем, обладают конечным временем жизни. Это приводит к тому, что уровни становятся квазидискретными, приобретая конечную малую ширину, которая и называется естественной шириной спектральных линий. Будем рассматривать атом, взаимодействующий только с собственным электромагнитным полем в приближении, когда атом можно считать покоящимся. Для простоты предположим, что атом может находиться всего в двух состояниях,- основном и возбужденном, которые мы обозначим индексами a и b, причем E_b E_a,

где E_b и E_a – относительные энергии этих состояний. Атомная система в возбужденном состоянии играет роль малой "неравновесной" подсистемы, а электромагнитное поле – роль "термостата", и релаксация, которая в данном случае является распадом возбужденного уровня, происходит путем переходов с излучением. Мы не будем останавливаться на обсуждении вопроса о том, когда поле излучения можно рассматривать как равновесную систему с бесконечным числом степеней свободы, так как этот вопрос подробно рассмотрен в литературе (см., например, [5]).

Гамильтониан полной системы, согласно работе [1], запишем в виде:

$$H = H_{at} + H_f + V, \tag{1}$$

где

$$H_{at} = \sum_{\alpha} E_{\alpha} a^{+}_{\alpha} a_{\alpha}, \qquad \alpha = a, b \tag{2}$$

– гамильтониан атомной системы, a^{+}_{α} и a_{α} – операторы "рождения" и "уничтожения" системы в состоянии с энергией E_{α} (описание алгебры операторов вторичного квантования для единичной системы см. в работах [7,8]),

$$H_f = \sum_{k,\lambda} kc\, b^{+}_{k\lambda} b_{k\lambda} \tag{3}$$

– гамильтониан поперечного электромагнитного поля [5,6], k – импульс фотона, c –скорость света, $\lambda = 1,2$ – индекс поляризации, V –оператор взаимодействия, ответственного за переходы с излучением, в нерелятивистском приближении имеющий вид:

$$V = -\frac{e}{mc}\, \vec{p} \cdot \vec{A}_{tr}(\vec{r}), \tag{4}$$

где e и m –соответственно заряд и масса электрона, $\vec{A}_{tr}(\vec{r})$ – вектор потенциал поперечного электромагнитного поля излучения, взятый в точке $\vec{r}$, причем $[\vec{p} \times \vec{A}_{tr}(\vec{r})] = 0$. Вектор-потенциал $\vec{A}_{tr}(\vec{r})$ можно разложить в ряд по плоским волнам. Это разложение имеет вид: /5,6/

$$\vec{A}_{tr}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{k,\lambda} \left(\frac{2\pi h^2 c}{k}\right)^{1/2} \vec{e}_{k\lambda} \left[b_{k\lambda}\, e^{\frac{i\vec{k}\vec{r}}{h}} + b^+_{k\lambda}\, e^{-\frac{i\vec{k}\vec{r}}{h}} \right]. \tag{5}$$

Суммирование по $\vec{k}$ производится по всем состояниям плоских волн с импульсом $h\vec{k}$ в ящике объемом Ω. Суммирование по λ производится по двум дозволенным направлениям поляризации фотона с импульсом $h\vec{k}$. Величины $b^+_{k\lambda}$ и $b_{k\lambda}$ являются соответственно операторами рождения и уничтожения фотонов в состоянии $(k\lambda)$. Их единственные неисчезающие матричные элементы можно представить в виде:

$$\langle n_{k,\lambda} - 1 \,|\, b_{k\lambda} \,|\, n_{k\lambda} \rangle = \sqrt{n_{k\lambda}}, \qquad \langle n_{k,\lambda} + 1 \,|\, b^+_{k\lambda} \,|\, n_{k\lambda} \rangle = \sqrt{n_{k\lambda}}. \tag{6}$$

Согласно /1/, запишем теперь оператор V в виде:

$$V = \sum_{\alpha.\beta} \phi_{\alpha\beta}\, a^+_\alpha a_\beta, \qquad \phi_{\alpha\beta} = \phi^+_{\beta\alpha}. \tag{7}$$

где

$$\phi_{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{k,\lambda} \{ G_{\alpha\beta}(k,\lambda)\, b_{k,\lambda} + b^+_{k,\lambda}\, G^*_{\beta\alpha}(k,\lambda) \}, \tag{8}$$

$$G_{\alpha\beta}(k,\lambda) = -\frac{e}{mc}\left(\frac{2\pi c h^2}{k}\right)^{1/2} \vec{e}_{k\lambda} \langle \alpha |\, e^{\frac{i\vec{k}\vec{r}}{h}}\, \vec{p}\, | \beta \rangle \tag{9}$$

и $|a\rangle$ и $|\beta\rangle$ –собственные векторы гамильтониана $H_{at}|a\rangle = E_a|a\rangle$, $a = a, b$. Будем, как обычно, предполагать, что разрешен электрический дипольный переход для распада из состояния b в состояние a, т.е. будем считать, что $\vec{k}\vec{r} \ll 1$. Тогда (8) перепишется в форме:

$$\phi_{a\beta} = -\frac{e}{mc}\langle a|\vec{p}|\beta\rangle \sum_{k,\lambda}\left(\frac{2\pi c h^2}{k}\right)^{1/2} \vec{e}_{k\lambda}(b_{k\lambda} + b^+_{k\lambda}), \tag{10}$$

причем матричные элементы оператора дипольного момента $\vec{d} = e\vec{r}$ связаны с матричными элементами $\langle a|\vec{p}|\beta\rangle$ следующим образом:

$$\langle a|\vec{p}|\beta\rangle = -\frac{m}{eh}(E_a - E_\beta)\vec{d}_{a\beta}. \tag{11}$$

В настоящей работе мы будем считать, что атом не обладает стационарным дипольным моментом, т.е. что $\langle a|\vec{p}|a\rangle = 0$.

3. Запишем теперь, следуя /1/, уравнение типа Шредингера с затуханием для величины $\langle a_a\rangle$

$$ih\frac{d\langle a_a\rangle}{dt} = E_a\langle a_a\rangle + \sum_\beta K_{a\beta}\langle a_\beta\rangle, \tag{12}$$

где

$$K_{a\beta} = \frac{1}{ih}\sum_{a_1}\int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\langle \phi_{a a_1}\tilde{\phi}_{a_1\beta}(t_1)\rangle_q \tag{12a}$$

$\langle \dots \rangle_q = Sp\,(\rho_q(t,0)\dots)$, $\rho_q(t,0)$ – квазиравновесный статистический оператор /2/, имеющий следующий вид /1/:

$$\rho_q(t,0) = Q_q^{-1}\exp\{-\sum_a (f_a(t)a_a + f^*_a(t)a^+_a + F_a(t)a^+_a a_a)\} \tag{13}$$

$$Q_q = Sp\exp\{-\sum_a (f_a(t)a_a + f^*_a(t)a^+_a + F_a(t)a^+_a a_a)\}, \tag{13a}$$

$f_a(t)$, $f_a^*(t)$, $F_a(t)$ – параметры, сопряженные величинам a_a , a_a^+ , $a_a^+ a_a$ в смысле неравновесной термодинамики (подробно см. в /1/),

$$\tilde{\phi}_{a\beta}(t) = \phi_{a\beta}(t)\, e^{\frac{i}{h}(E_a - E_\beta)t}$$

и $\epsilon \to +0$. При температуре $T = 0^0 K$ ширина основного уровня a бесконечно мала, следовательно, индекс a в (12) равен b и $K_{ba} = 0$.

$$ih \frac{d\langle a_b \rangle}{dt} = E_b \langle a_b \rangle + K_{bb} \langle a_b \rangle . \tag{14}$$

Подставляя (10) в (12а), получим:

$$K_{bb} = \frac{2\pi h^2 e^2}{m^2 c} \frac{1}{\Omega} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{k} \frac{J(k\omega)}{h\omega_0 + h\omega + i\epsilon} A_{ab}^{ab}\left(\frac{\vec{k}}{k}\right), \tag{15}$$

где $\omega_0 = \dfrac{E_b - E_a}{h}$,

$$J_{(k,\omega)} = \{ (\langle n_k \rangle + 1)\delta(\omega + ck) + \langle n_k \rangle \delta(\omega - ck) \}, \tag{16}$$

$$\langle n_k \rangle = \sum_\lambda \langle n_{k\lambda} \rangle = \frac{1}{e^{\beta ck} - 1} = n(k), \tag{17}$$

$$A_{ab}^{ab}\left(\frac{\vec{k}}{k}\right) = |\langle a|\vec{p}|b\rangle|^2 - \left(\langle a|\vec{p}|b\rangle \frac{\vec{k}}{k}\right)\left(\langle b|\vec{p}|a\rangle \frac{\vec{k}}{k}\right). \tag{18}$$

Далее имеем:

$$\frac{1}{\Omega} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{k} \frac{J(k,\omega)}{h\omega_0 + h\omega + i\epsilon} A_{ab}^{ab}\left(\frac{\vec{k}}{k}\right) = \tag{19}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^{\infty} \frac{J(k,\omega)}{h\omega_0 + h\omega + i\epsilon} k\, dk \int A_{ab}^{ab} \left(\frac{\vec{k}}{k}\right) dO,$$

где dO – элемент телесного угла. Легко проверить равенства

$$\int A_{ab}^{ab}\left(\frac{\vec{k}}{k}\right) dO = \frac{8\pi}{3} |< a | \vec{p} | b >|^2 \tag{20}$$

и

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{J(k,\omega)}{h\omega_0 + h\omega + i\epsilon} = \frac{n(k)}{h\omega_0 + ck + i\epsilon} + \frac{n(k)+1}{h\omega_0 - ck + i\epsilon} . \tag{21}$$

Из (15) с помощью (19)–(21), обозначая $\nu = ck$ получим

$$K_{bb} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{m^2 c^3 h} |< a | \vec{p} | b >|^2 \int_0^{\infty} \nu d\nu \left\{ \frac{n(\nu)+1}{\omega_0 - \nu + i\epsilon} + \frac{n(\nu)}{\omega_0 + \nu + i\epsilon} \right\} \tag{22}$$

откуда при $T \to 0^0 K$ находим формулу для затухания:

$$\Gamma_b = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega_0}{h m^2 c^3} |< a | \vec{p} | b >|^2 = \frac{4}{3} \frac{\omega_0^3}{h c^3} |\vec{d}_{ab}|^2 . \tag{23}$$

Это выражение совпадает с хорошо известным значением естественной ширины спектральных линий [5,6]. Мы не останавливаемся на вычислении сдвига энергии и обсуждении его линейной расходимости при больших ν, так как это является обычным примером расходимости собственной энергии в полевых теориях.

4. Таким образом, с помощью уравнения Шредингера с затуханием [1] можно просто вычислять сдвиг энергии и затухание в различных конкретных системах. Это показывает и настоящее рассмотрение хорошо известной задачи о вычислении естественной ширины спектральных линий. Мы вычисляли ширину уровней с помощью уравнения для неравновесных средних.

Однако хорошо известно [2], что уравнения для неравновесных средних эквивалентны уравнениям для соответствующих равновесных функций Грина, которые эквивалентны обычной теории возмущений, если последняя применима.

Заметим, что изложенная методика рассмотрения задачи об уширении линий может оказаться полезной для целого ряда конкретных проблем [9].

В заключение выражаем глубокую благодарность профессору Д.Н. Зубареву за интересные обсуждения, профессору Е. Червонко и М.Ю. Новикову за полезные замечания.

Литература

1. Д.Н. Зубарев, А.Л. Куземский, К. Валясек. Теоретическая и математическая физика, 5, 280 (1970).
2. Д.Н. Зубарев. "Неравновесная статистическая термодинамика", "Наука", Москва, 1971.
3. Д.Н. Зубарев. УФН, 71, 71 (1960).
4. Р. Нокс. "Теория экситонов", "Мир", 1966.
5. В. Гайтлер. "Квантовая теория излучения". ИЛ, 1955.
6. М. Гольдбергер, К. Ватсон. "Теория столкновений"."Мир", 1967.
7. M. Lax. Phys.Rev., 129, 2342, 1963.
8. M. Lax. "1966 Brandeis Lectures in Theoretical Physics" (Gordon and Breach, Inc., New York, 1968).
9. J. Cooper. Rev.Mod.Phys., 39, 167, 1967.

Рукопись поступила в издательский отдел
14 июля 1971 года.