Китаев А.Е.
kitaev_a_e@mail.ru

К спонтанной релаксации двухуровневой системы.

1

Запишем интегро-дифференциальное уравнение следующего вида:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\widehat{H}_0\psi+\frac{i\hbar e}{mc}((\frac{1}{c}\int\frac{\left[\frac{d(e\vec{r}_0\psi^*(t,\vec{r}_0)\psi(t,\vec{r}_0))}{dt}\right]_{ret}}{|\vec{r}-\vec{r}_0|}dV_0+$$
$$+\frac{1}{4\pi c}\int\frac{\left[\frac{d}{dt}grad\int\frac{[div\,(e\vec{r}_1\psi^*(t,\vec{r}_1)\psi(t,\vec{r}_1))]_{ret}}{|\vec{r}_0-\vec{r}_1|}dV_1\right]_{ret}}{|\vec{r}-\vec{r}_0|}dV_0)\nabla)\psi. \qquad (1)$$

Здесь $\widehat{H}_0$ - оператор Гамильтона (если отбросить второе слагаемое правой части, мы получим уравнение Шредингера, которое можно считать «нулевым» приближением для (1)). Индекс «ret» справа от квадратных скобок обозначает запаздывающее решение (аргумент *t* у функции внутри квадратных скобок заменяется на *t-R/c*). В электродинамике через аналогичные запаздывающие величины выражаются общие решения волновых уравнений для векторного и скалярного потенциала.

Внутри квадратных скобок дифференциальные операторы действуют на величину

$$\vec{p}=e\vec{r}\psi^*(t,\vec{r})\psi(t,\vec{r})\,. \qquad (2)$$

Это есть плотность дипольного момента $\vec{p}$, записанная через волновую функцию.

Уравнение (1) выглядит достаточно сложно. Чтобы сделать более понятной его структуру, запишем его так:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\widehat{H}_0\psi+\frac{i\hbar e}{mc}(\vec{A}\nabla)\psi. \qquad (3)$$

Это есть уравнение Шредингера с «возмущающим» векторным потенциалом. Вообще говоря, уравнение нужно записать так:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\widehat{H}_0\psi+\frac{i\hbar e}{mc}(\vec{A}\nabla)\psi+\frac{i\hbar e}{2mc}(div\vec{A})\psi\,.$$

Но с помощью калибровки векторного потенциала третье слагаемое в правой части можно сделать равным нулю.

Далее – выразим векторный потенциал через источник (то-есть через ток - обозначим его «штрихом», подразумевая, что в выражение входит и ток смещения).

$$\vec{A}(t,\vec{r})=\frac{1}{c}\int\frac{\left[\vec{j}'(t,\vec{r}_0)\right]_{ret}}{|\vec{r}-\vec{r}_0|}dV_0.$$

Чему равняется ток?

$$\vec{j}'(t,\vec{r})=\frac{d\vec{p}(t,\vec{r})}{dt}+\frac{1}{4\pi}\frac{d}{dt}grad\int\frac{[div\;\vec{p}(t,\vec{r}_1)]_{ret}}{|\vec{r}-\vec{r}_1|}dV_1. \qquad (4)$$

В результате векторный потенциал выражается так:

$$\vec{A}(t,\vec{r}) = \frac{1}{c}\int \frac{\left[\frac{d\vec{p}(t,\vec{r}_0)}{dt} + \frac{1}{4\pi}\frac{d}{dt} grad\int \frac{[div\ \vec{p}(t,\vec{r}_1)]_{ret}}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_1|} dV_1\right]_{ret}}{|\vec{r}-\vec{r}_0|} dV_0 =$$

$$= \frac{1}{c}\int \frac{\left[\frac{d\vec{p}(t,\vec{r}_0)}{dt}\right]_{ret}}{|\vec{r}-\vec{r}_0|} dV_0 + \frac{1}{4\pi c}\int \frac{\left[\frac{d}{dt} grad\int \frac{[div\ \vec{p}(t,\vec{r}_1)]_{ret}}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_1|} dV_1\right]_{ret}}{|\vec{r}-\vec{r}_0|} dV_0. \qquad (5)$$

Подставив все это в соотношение (3), мы получим уравнение (1).

Уточню процедуру получения соотношения (4).

$$\vec{j}'(t,\vec{r}) = \vec{j}(t,\vec{r}) + \frac{1}{4\pi}\frac{d\vec{E}}{dt}.$$

Электрическое поле, входящее в это выражение, имеет своим источником плотность поляризации.

$$div\,\vec{E} = 4\pi\rho_p,$$

$$\rho_p = -div\,\vec{p}.$$

Ток же (без штриха) – это есть производная плотности поляризации по времени:

$$\vec{j}(t,\vec{r}) = \frac{d\vec{p}}{dt}.$$

В формулах использован значок полной производной, так как предполагается, что мы находимся в системе отсчета, где не происходит конвективного сноса источников полей (в этом случае частная производная равносильно полной).

Повторюсь: исходный пункт наших рассуждений – это уравнение (1) или пара эквивалентых ему уравнений (3) и (5) (с учетом выражения для плотности дипольного момента (2)).

2

Перед тем, как двигаться дальше, решим вспомогательную задачу. Пусть имеется однородно поляризованный шар, но его плотность поляризации изменяется со временем.

$$\vec{p} = P_0(t)\vec{z}_0. \qquad (6)$$

Найдем плотность тока через плотность поляризации:

$$\vec{j}(t,\vec{r}) = \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{dP_0}{dt}\vec{z}_0.$$

Помимо тока, есть еще переменное электрическое поле, созданное такой поляризацией (см., например, [4]):

$$\vec{E} = -\frac{4\pi}{3}P_0\vec{z}_0. \qquad (7)$$

В роли источника для векторного потенциала выступит сумма обычного тока и тока смещения.

$$\vec{j}' = \vec{j} + \frac{1}{4\pi}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t} = \frac{dP_0}{dt}\vec{z}_0 - \frac{1}{4\pi}\frac{4\pi}{3}\frac{dP_0}{dt}\vec{z}_0 = \frac{2}{3}\frac{dP_0}{dt}\vec{z}_0. \qquad (8)$$

Нам нужно решить уравнение

$$\Delta\vec{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c}\vec{j}' = -\frac{4\pi}{c}\left(\frac{2}{3}\frac{dP_0}{dt}\vec{z}_0\right).$$

Его решение:

$$\vec{A}=\frac{1}{c}\int\frac{\left[\vec{j}'\right]_{ret}}{R}dV_0.$$

Используем приведенное в [2] разложение в ряд функции от запаздывающего аргумента:

$$[...]_{ret}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}(\frac{R}{c})^n\frac{\partial^n}{\partial t^n}[...].$$

Внутри шара при размерах шара, стремящихся к нулю,

$$\left[\vec{j}'\right]_{ret}\approx-\frac{R}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{j}'$$

(мы используем член вышеприведенного ряда с номером n=1).

Тогда векторный потенциал внутри шара

$$\vec{A}=\frac{1}{c^2}\int\frac{R\frac{\partial}{\partial t}\vec{j}'}{R}dV_0=-\frac{2}{3c^2}\vec{z}_0\frac{\partial^2 P_0}{\partial t^2}\int dV_0=-\vec{z}_0\frac{2}{3c^2}\frac{\partial^2 P_0}{\partial t^2}V_A. \qquad (9)$$

Итог – векторный потенциал внутри шара не зависит от пространственных координат (зависит лишь от времени, как и плотность поляризации). Он прямо пропорционален объему шара (V_A).

ПРИМЕР: возьмем квантовую плотность поляризации.

$$\vec{p}=e\vec{r}\psi^*(t,\vec{r})\psi(t,\vec{r})=e\vec{r}(C_1^*e^{i\omega_1 t}\psi_1^*(\vec{r})+C_2^*e^{i\omega_2 t}\psi_2^*(\vec{r}))(C_1e^{-i\omega_1 t}\psi_1(\vec{r})+C_2e^{-i\omega_2 t}\psi_2(\vec{r}))=$$
$$=e\vec{r}(C_1^*C_1\psi_1^*(\vec{r})\psi_1(\vec{r})+C_2^*C_1\psi_2^*(\vec{r})\psi_1(\vec{r})e^{i(\omega_2-\omega_1)t}+$$
$$+C_1^*C_2\psi_1^*(\vec{r})\psi_2(\vec{r})e^{-i(\omega_2-\omega_1)t}+C_2^*C_2\psi_2^*(\vec{r})\psi_2(\vec{r})).$$

Так как плотность поляризации будет дифференцироваться по времени, мы оставим лишь 2-е и 3-е слагаемые.

$$\vec{p}_v=e\vec{r}(C_2^*C_1\psi_2^*(\vec{r})\psi_1(\vec{r})e^{i(\omega_2-\omega_1)t}+C_1^*C_2\psi_1^*(\vec{r})\psi_2(\vec{r})e^{-i(\omega_2-\omega_1)t}). \qquad (10)$$

Индекс «v» в последней формуле означает, что мы имеем дело с переменной плотностью дипольного момента (то-есть зависящей от времени).

Далее оставим лишь последнее слагаемое, считая его резонансным. Экспонента с мнимым показателем, входящая в это слагаемое, сократится с экспонентой, входящей в уравнение для амплитуды функции с большей энергией (см. ниже) – именно в этом смысл «резонансности».

$$\vec{p}_v=e\vec{r}C_1^*C_2\psi_1^*(\vec{r})\psi_2(\vec{r})e^{-i(\omega_2-\omega_1)t}. \qquad (11)$$

Усредним эту величину на некотором шаре объема V_A.

$$\left\langle\vec{p}_v\right\rangle=eC_1^*C_2e^{-i(\omega_2-\omega_1)t}\frac{\iiint\limits_{V_0}\vec{r}\psi_1^*(\vec{r})\psi_2(\vec{r})dV}{V_A}=eC_1^*C_2e^{i(\omega_1-\omega_2)t}\frac{\vec{r}_{12}}{V_A}. \qquad (12)$$

Обратим внимание – в числителе дроби стоит матричный элемент координаты (радиус-вектора). Сравним исходную формулу (12) с выражением (6), считая, что ось z сонаправлена с направлением матричного элемента радиус-вектора. Тогда

$$P_0(t)=eC_1^*C_2e^{i(\omega_1-\omega_2)t}\frac{\left|\vec{r}_{12}\right|}{V_A}.$$

Запишем с учетом всего этого выражение для векторного потенциала внутри шара (обратим внимание – объем шара сократится):

$$\vec{A}=\frac{2(\omega_1-\omega_2)^2}{3c^2}eC_1^*C_2e^{i(\omega_1-\omega_2)t}\vec{r}_{12}=\vec{e}_0\frac{2(\omega_1-\omega_2)^2}{3c^2}eC_1^*C_2e^{i(\omega_1-\omega_2)t}\left|\vec{r}_{12}\right|. \qquad (13)$$

Здесь единичный вектор $\vec{e}_0$ совпадает по направлению с матричным элементом радиус-вектора.

Вычислим электрическое поле внутри шара:

$$\vec{E} = -\vec{e}_0 \frac{2i(\omega_1 - \omega_2)^3}{3c^3} eC_1^* C_2 e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} \left|\vec{r}_{12}\right| = -\vec{e}_0 \frac{2i(\omega_1 - \omega_2)^3}{3c^3} eC_1^* C_2 e^{i\omega_{12}t} \left|\vec{r}_{12}\right|. \qquad (14)$$

3

Вернемся к интегро-дифференциальному уравнению (1). Попробуем получить его приближенное решение, учитывая наличие лишь двух невозмущенных функций (невозмущенный случай – это отбрасывание интегральных слагаемых, уравнение тогда превращается в обычное уравнение Шредингера).

Если частота перехода между соответствующими уровнями невелика (и переменное поле однородно на масштабе атома), то можно заменить уравнение с векторным потенциалом на уравнение со скалярным потенциалом.

$$\varphi = \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}\vec{r}. \qquad (15)$$

Уравнение (3) тогда можно заменить на такое:

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_0\psi + \frac{e}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}\vec{r}\psi = \hat{H}_0\psi - e\vec{E}\vec{r}\psi. \qquad (16)$$

Напомню – векторный потенциал (и электрическое поле) выражаются через волновую функцию (см. выше).

Решение ищется в следующем виде:

$$\psi = C_1(t)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}\psi_1(\vec{r}) + C_2(t)e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}\psi_2(\vec{r}). \qquad (17)$$

С учетом этого можно получить следующую систему из двух дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{dC_1}{dt} = \dfrac{e}{i\hbar c}C_1\displaystyle\int \psi^*{}_1(\vec{r}\,\frac{\partial \vec{A}}{\partial t})\psi_1 dV + \dfrac{e}{i\hbar c}C_2 e^{i\omega_{12}t}\int \psi^*{}_1(\vec{r}\,\frac{\partial \vec{A}}{\partial t})\psi_2 dV, \\ \dfrac{dC_2}{dt} = \dfrac{e}{i\hbar c}C_1 e^{-i\omega_{12}t}\displaystyle\int \psi^*{}_2(\vec{r}\,\frac{\partial \vec{A}}{\partial t})\psi_1 dV + \dfrac{e}{i\hbar c}C_2\int \psi^*{}_2(\vec{r}\,\frac{\partial \vec{A}}{\partial t})\psi_2 dV. \end{cases} \qquad (18)$$

Так как при введении замены (3) на (16) предполагается, что векторный потенциал не зависит от пространственных координат, эту систему можно записать и так:

$$\begin{cases} \dfrac{dC_1}{dt} = \dfrac{e}{i\hbar c}C_1\vec{r}_{11}\dfrac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \dfrac{e}{i\hbar c}C_2 e^{i\omega_{12}t}\vec{r}_{12}\dfrac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \\ \dfrac{dC_2}{dt} = \dfrac{e}{i\hbar c}C_1 e^{-i\omega_{12}t}\vec{r}_{21}\dfrac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \dfrac{e}{i\hbar c}C_2\vec{r}_{22}\dfrac{\partial \vec{A}}{\partial t}. \end{cases} \qquad (19)$$

Преобразуем второе уравнение системы (19) , вводя в него напряженность электрического поля и считая, что симметричный матричный элемент радиус-вектора равен 0:

$$\frac{dC_2}{dt} = -\frac{e}{i\hbar}C_1 e^{-i\omega_{12}t}\vec{r}_{21}\vec{E}. \qquad (20)$$

Подставим сюда электрическое поле, определяемое формулой (14). Получим

$$\frac{dC_2}{dt} = -\frac{e}{i\hbar}C_1 e^{-i\omega_{12}t}\vec{r}_{21}(-1)\vec{e}_0\frac{2i(\omega_1 - \omega_2)^3}{3c^3}eC_1^* C_2 e^{i\omega_{12}t}\left|\vec{r}_{12}\right|.$$

Если считать, что частота второго состояния больше частоты первого состояния (и что $\vec{r}_{12} = \vec{r}_{21}$),

$$\frac{dC_2}{dt} = -e^2 \frac{2(\omega_2 - \omega_1)^3}{3\hbar c^3} \left|\vec{r}_{21}\right|^2 \left|C_1\right|^2 C_2.$$

Для амплитуды первого состояния можно получить следующее уравнение:

$$\frac{dC_1}{dt} = e^2 \frac{2(\omega_2 - \omega_1)^3}{3\hbar c^3} \left|\vec{r}_{21}\right|^2 \left|C_2\right|^2 C_1$$

(уточню – для этого в выражении (10) нужно в качестве резонансного оставить первое слагаемое).

Итак, нами получена следующая нелинейная система уравнений для амплитуд:

$$\begin{cases} \dfrac{dC_1}{dt} = \gamma \left|C_2\right|^2 C_1, \\ \dfrac{dC_2}{dt} = -\gamma \left|C_1\right|^2 C_2. \end{cases} \qquad (21)$$

Здесь

$$\gamma = \frac{2e^2}{3c^3\hbar} \omega_{21}{}^3 \left|\vec{r}_{21}\right|^2.$$

Это есть коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения, деленный на 2.

4

Займемся решением системы (21). Запишем первое уравнение с учетом условия нормировки, следующего из этой системы:

$$\frac{dC_1}{dt} = \gamma(1 - \left|C_1\right|^2) C_1. \qquad (22)$$

Запишем комплексное число C_1 в экспоненциальной форме:

$$C_1 = S_1 e^{i\varphi_1}, \qquad S_1 = \left|S_1\right|. \qquad (23)$$

Уравнение (22) можно записать так:

$$\frac{dC_1}{(1 - \left|C_1\right|^2) C_1} = \gamma dt.$$

Или же, используя экспоненциальную форму (23):

$$\frac{dS_1 e^{i\varphi_1}}{(1 - S_1{}^2) S_1 e^{i\varphi_1}} + i \frac{S_1 e^{i\varphi_1} d\varphi_1}{(1 - S_1{}^2) S_1 e^{i\varphi_1}} = \gamma dt,$$

$$\frac{dS_1}{(1 - S_1{}^2) S_1} + \frac{id\varphi_1}{(1 - S_1{}^2)} = \gamma dt. \qquad (24)$$

Запишем реальную часть уравнения (24).

$$\frac{dS_1}{(1 - S_1{}^2) S_1} = \gamma dt.$$

Его решение:

$$S_1 = \left|C_1\right| = \frac{\sqrt{B} e^{\gamma t}}{\sqrt{1 + B e^{2\gamma t}}}. \qquad (25)$$

Теперь – мнимая часть уравнения (24):

$$\frac{id\varphi_1}{(1 - S_1{}^2)} = 0.$$

Из этого следует, что фаза φ_1 является константой.

Итак,

$$C_1 = e^{i\varphi_1} \frac{\sqrt{B} e^{\gamma t}}{\sqrt{1 + Be^{2\gamma t}}}. \qquad (26)$$

Здесь *B* и φ_1 - произвольные константы.

Аналогично можно найти решение для C_2.

$$C_2 = \frac{e^{i\varphi_2}}{\sqrt{1 + Be^{2\gamma t}}} = \frac{e^{i\varphi_2}}{\sqrt{B}} \frac{e^{-\gamma t}}{\sqrt{1 + \frac{1}{B} e^{-2\gamma t}}}. \qquad (27)$$

Величина *B* здесь та же самая, а фаза – другая.

5

Вычислим теперь плотность тока 2-уровневой системы (она находится как производная по времени от плотности дипольного момента). Будем считать, что амплитуды C_i меняются плавно, их производными по времени будем пренебрегать.

$$\vec{j} = e\vec{r} C_2^*(t) C_1(t) \psi_2^*(\vec{r}) \psi_1(\vec{r}) i\omega_{21} e^{i\omega_{21} t} - e\vec{r} C_1^*(t) C_2(t) \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) i\omega_{21} e^{-i\omega_{21} t} =$$
$$= i\omega_{21} e\vec{r} (C_2^*(t) C_1(t) \psi_2^* \psi_1 e^{i\omega_{21} t} - C_1^*(t) C_2(t) \psi_1^* \psi_2 e^{-i\omega_{21} t}).$$

Если волновые функции – действительные, то

$$\vec{j} = i\omega_{21} e\vec{r} \psi_1 \psi_2 (C_2^*(t) C_1(t) e^{i\omega_{21} t} - C_1^*(t) C_2(t) e^{-i\omega_{21} t}).$$

Подставим найденные нами выше значения для C_i.

$$\vec{j} = -2\omega_{21} e\vec{r} \psi_1(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) \frac{\sqrt{B} e^{\gamma t}}{1 + Be^{2\gamma t}} \sin(\omega_{21} t + \varphi_1 - \varphi_2).$$

Если проинтегрировать это выражение по пространству (занятому атомом), мы получим

$$\left\langle \vec{j} \right\rangle = -2\omega_{21} e\vec{r}_{12} \frac{\sqrt{B} e^{\gamma t}}{1 + Be^{2\gamma t}} \sin(\omega_{21} t + \varphi_1 - \varphi_2).$$

Произвольная константа *B* сдвигает функцию тока вдоль оси времени. И, соответственно, определяет момент, в который колоколообразная функция

$$\frac{\sqrt{B} e^{\gamma t}}{1 + Be^{2\gamma t}}$$

достигнет максимума. Произвольные константы φ_1, φ_2 определяют фазу колебаний тока. Естественно считать, что у разных атомов, распределенных по пространству, эти константы являются случайными величинами.

Список литературы:

1) Лоудон Р. «Квантовая теория света», М. «Мир» 1976
2) Джексон Дж. «Классическая электродинамика», М «Мир» 1965 с.636-638
3) Зоммерфельд А. «Электродинамика», М «Издательство иностранной литературы» 1958
4) Тамм И.Е. «Основы теории электричества», М. “Наука” 1973.