Изв. АН Армянской ССР, Физика, 15, 239—246 (1980)

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЙ ПО ПАРАМЕТРУ МЕТОД ДЛЯ КВАЗИЭНЕРГИЙ

Г. Ю. КРЮЧКОВ, А. О. МЕЛИКЯН

Предложен метод вычисления квазиэнергий и амплитуд переходов между квазиэнергетическими состояниями, основанный на дифференциальных по параметрам задачи уравнениях. Показано, что средние значения величин в квазиэнергетических состояниях выражаются через спектр квазиэнергий.

1. Введение

Как известно [1, 2], наиболее удобный метод исследования квантовых систем с периодическим по времени гамильтонианом $H(t+T)=H(t)$ ($T=2\pi/\omega$, ω — соответствующая частота) основан на введении квазиэнергетических состояний (КЭС)

$$\psi_k = e^{-iE_{k,q}t}\, u_{k,q}(\mathbf{r}, t), \quad u_{k,q}(\mathbf{r}, t+T) = u_{k,q}(\mathbf{r}, t) \tag{1}$$

с квазиэнергиями (КЭ) $E_{k,q} = E_k + q\omega$ ($q = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$). Функции $u_{k,q}$ удовлетворяют уравнению Шредингера

$$\left(H - i\frac{\partial}{\partial t}\right) u_{k,q} = E_{k,q}\, u_{k,q} \tag{2}$$

и выражаются через решение с КЭ $E_{k,0} = E_k$ следующим образом:

$$u_{k,q}(\mathbf{r}, t) = e^{iq\omega t}\, u_k(\mathbf{r}, t). \tag{3}$$

Как это наиболее последовательно продемонстрировано в работе [3], для вычисления КЭ и КЭС можно пользоваться методами стационарной теории возмущений, где матричные элементы операторов дополнительно усреднены по периоду и в качестве энергий входят КЭ. О других способах вычислений см. [4, 5].

В настоящей работе предложен метод вычисления КЭ и амплитуд переходов между КЭС, не связанный с теорией возмущений, уравнения которого содержат уже усредненные по периоду матричные элементы и точные КЭ без обращения на промежуточном этапе к квазиэнергетическим волновым функциям. С этой целью используется предложенный Киржницем подход, основанный на законе эволюции квантовой системы с изменением не времени (т. е. уравнения (2)), а одного из параметров теории: заряда, напряженности поля и т. п. [6]. Такой подход имеет целый ряд преимуществ при решении многих проблем квантовой механики и квантовой теории поля [7]. В приложении к КЭС этот метод удобен при изучении резонансных явлений в сильных полях, так как позволяет указать критерий резонанса.

2. КЭ и вычисление средних

Рассмотрение этого раздела основано на использовании процедуры дифференцирования собственных значений операторов по параметрам, приводящей к формуле для КЭ

$$\frac{\partial E_k}{\partial \lambda} = \ll u_k \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| u_k \gg, \tag{4}$$

которая обобщает известную для дискретного спектра энергий формулу Гельмана-Фейнмана. Здесь скалярное произведение в пространстве периодических с периодом T функций определяется следующим образом [3]:

$$\ll u(\mathbf{r},\ t)\, v(\mathbf{r},\ t) \gg = \frac{1}{T} \int\limits_{-T/2}^{T/2} dt \int d\mathbf{r}\, u^* (\mathbf{r},\ t)\, v(\mathbf{r},\ t).$$

Формулу (4) можно получить дифференцированием уравнения (2) по произвольному параметру λ с использованием свойств ортонормированности и периодичности функций u_k.

В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением случая, когда невозмущенный гамильтониан имеет дискретный спектр ω_α:

$$H = H_0 + V(\mathbf{r},\ t),\ H_0 |\varphi_\alpha\rangle = \omega_\alpha |\varphi_\alpha\rangle,$$

причем возмущение является периодическим, но не монохроматическим:

$$V(\mathbf{r},\ t) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} V^{(q)}(\mathbf{r})\, e^{-iq\omega t}.$$

Собственные функции и собственные значения оператора $H_0 - i\partial/\partial t$ есть

$$\varphi_{\alpha,\, n} = \varphi_\alpha e^{in\omega t},\ E^{(0)}_{\alpha,\, n} = \omega_\alpha + n\omega, \tag{5}$$

и разложение КЭС по полной системе (5) имеет вид

$$u_k(\mathbf{r},\ t) = \sum_\alpha a^k_\alpha(t)\, \varphi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} c^k_{\alpha,\, n}\, \varphi_{\alpha,\, n}. \tag{6}$$

Формула (4) и разложение (6) приводят к ряду соотношений, выражающих средние от операторов через КЭ. В целях иллюстрации приведем некоторые из них. Наиболее простое соотношение имеет вид [8]

$$\frac{\partial E_k}{\partial \omega_\alpha} = \frac{1}{T} \int\limits_{-T/2}^{T/2} |a^k_\alpha(t)|^2\, dt = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c^k_{\alpha,\, n}|^2,$$

где правая часть есть средняя по периоду вероятность нахождения системы в состоянии $|\varphi_\alpha\rangle$.

Другие формулы можно получить, расписывая величину

$$\ll u_k|V|u_k\gg=\sum_{q=-\infty}^{\infty}\sum_{\alpha,\beta}\rho^{k^*}_{\alpha\beta,q}V^{(q)}_{\alpha\beta},$$

где

$$V^{(q)}_{\alpha\beta}=\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2}dt\,e^{iq\omega t}<\varphi_\alpha|V(t)|\varphi_\beta>,$$

$$\rho^k_{\alpha\beta,q}=\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2}dt\,e^{iq\omega t}\,a^k_\alpha(t)\,a^{k^*}_\beta(t)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}c^k_{\alpha,n}\,c^{k^*}_{\beta,n+q}, \tag{7}$$

с помощью которой для значений $V^{(q)}_{\alpha\beta}\neq 0$ (причем возможно и равенство в силу определенной симметрии системы) получаем

$$\frac{\partial E_k}{\partial V^{(q)}_{\alpha\beta}}=\rho^{k^*}_{\alpha\beta,q}. \tag{8}$$

Отметим, что при $V^{(q)}_{\alpha\beta}=0$ для конкретных значений α, β и q величину ρ можно найти из обычного уравнения, следующего из (2):

$$(m\omega-\omega_{\alpha\beta})\,\rho^k_{\alpha\beta,m}=\sum_{\sigma,\,n=-\infty,\,\infty}V^{(m-n)}_{\alpha\sigma}\,\rho^k_{\sigma\beta,n}-\sum_{\sigma,\,n=-\infty,\,\infty}\rho^k_{\alpha\sigma,n}\,V^{(m-n)}_{\sigma,\beta}.$$

Для q-ой компоненты Фурье среднего значения произвольного периодического по времени оператора Q

$$<u_k|Q|u_k>=\sum_{q=-\infty}^{\infty}Q^{(k)}_q\,e^{-iq\omega t},\quad Q^{(k)}_q=\sum_{\alpha,\beta,r}Q^{(q-r)}_{\alpha\beta}\,\rho^k_{\beta\alpha,r} \tag{9}$$

формула (8) дает

$$Q^{(k)}_q=\sum_{\alpha,\beta,r}(\partial E_k/\partial V^{(-r)}_{\alpha\beta})\,Q^{(q-r)}_{\alpha\beta}. \tag{10}$$

Это говорит о том, что знание КЭ как функции параметров задачи позволяет вычислить фурье-компоненты средних значений операторов. Формулы (9) и (10) справедливы также для не зависящего от времени оператора Q, для которого отлична от нуля только нулевая гармоника $Q^{(0)}_{\alpha\beta}$.

В частности, в дипольном приближении гамильтониан взаимодействия с электромагнитным полем имеет вид $V^{(q)}=-\mathbf{d}\varepsilon_q$, где $\mathbf{d}=e\sum_\alpha\mathbf{r}_\alpha$ — полный дипольный момент системы, ε_q — фурье-компонента напряженности поля, и для вектора поляризации $\mathbf{P}_{kk}(t)=<u_k|\mathbf{d}|u_k>$ получаем [5]

$$\partial E_k/\partial\varepsilon^*_q=-\mathbf{P}^{(k)}_q. \tag{11}$$

Эта формула обобщает известное соотношение между энергией и средним значением дипольного момента в постоянном поле на случай периодического поля. Теперь волновое уравнение для фурье-компонент поля в среде можно записать в виде

$$\left(\Gamma^2+\frac{\omega_q^2}{c^2}\right)\varepsilon_q=-\frac{4\pi}{c^2}\frac{\partial E_k}{\partial\varepsilon_q^*}.$$

Соотношение (11) позволяет ввести гамильтониан для взаимодействующих коллинеарных волн в среде, причем роль времени выполняет координата, вдоль которой происходит распространение волн. В частности, благодаря этому приему удалось найти точное решение задачи о генерации третьей гармоники в резонансной среде [9].

При выключении взаимодействия $E_k\to\omega_k$, $u_k\to\varphi_k$ и соответственно $c^k_{\alpha,n}\to\delta_{k\alpha}\delta_{n0}$. В первом порядке теории возмущений по взаимодействию получаем

$$c^{k\,(1)}_{\alpha,n}=V^{(n)\,*}_{k\alpha}/(\omega_k-\omega_\alpha-n\omega),$$

и (11) переходит в известное выражение для сдвига уровня в низшем порядке теории возмущений.

3. Основные уравнения

Обычный метод нахождения КЭС связан с решением уравнения (2) в базисе (5), т. е. бесконечной системы однородных уравнений

$$\sum_{\gamma,p}[\delta_{\alpha\gamma}\delta_{np}-(E-E^{(0)}_{\alpha,n})^{-1}V^{(n-p)}_{\alpha\gamma}]\,c^k_{\gamma,p}=0, \qquad (12)$$

детерминант которой определяет спектр КЭ:

$$D=\det|\delta_{\alpha\gamma}\delta_{np}-(E-E^{(0)}_{\alpha,n})^{-1}V^{(n-p)}_{\alpha\gamma}|=0. \qquad (13)$$

В дополнение к такой схеме расчета в настоящем разделе предлагается метод, основанный на дифференциальных по заряду e уравнениях, представляющих собой естественное обобщение известных уравнений стационарной теории на случай периодического по времени гамильтониана.

Отсылая за подробностями к работе [7], отметим, что центральное место при выводе этих уравнений занимает условие полноты КЭС $|k,q\gg$:

$$\sum|k,q\gg\ll k,q|=1,\quad \ll k,q\,|\,p,m\gg=\delta_{kp}\delta_{qm}. \qquad (14)$$

В t-представлении имеем

$$\sum_{k,q}u_{k,q}(\mathbf{r},t)\,u^*_{k,q}(\mathbf{r}',t')=\tilde\delta(t'-t)\,\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}),$$

где величина

$$\tilde\delta(\tau)=\sum_{q=-\infty}^{\infty}e^{iq\omega\tau}$$

является δ-функцией на периоде T:

$$\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2}\tilde\delta(t-t_0)\,f(t)\,dt=f(t_0).$$

Уравнение для вектора состояния имеет следующий вид (чтобы различить матричные элементы по возмущенному и невозмущенному базисам для обозначения последних используются греческие буквы):

$$\frac{d}{de}|k,\ q\gg = \sum_{p,\ m}' \frac{\widetilde{V}_{pk}^{(q-m)}|p,\ m\gg}{E_k - E_p + (q-m)\omega}, \tag{15}$$

где

$$V_{pk}^{(r)} = \ll u_p|V(t)\,e^{i\omega rt}|\,u_k\gg,$$

$\widetilde{V} = V/e$. Конечно, вместо заряда можно взять любой другой параметр λ; тогда вместо $\widetilde{V}$ в формулы будет входить величина $\partial H/\partial\lambda$.

Используя (15), легко найти уравнение для произвольного (для простоты, не зависящего от e) оператора Q

$$\frac{d}{de}Q_{pk}^{(r)} = \sum_{l,\ \sigma}' \left(\frac{\widetilde{V}_{pl}^{(\sigma)}\,Q_{lk}^{(r-\sigma)}}{E_p - E_l - \sigma\omega} + \frac{Q_{pl}^{(\sigma)}\,\widetilde{V}_{lk}^{(r-\sigma)}}{E_k - E_l + (r-\sigma)\,\omega}\right). \tag{16}$$

В частности, для возмущения $\widetilde{V}$ имеем уравнение

$$\frac{d}{de}\widetilde{V}_{pk}^{(r)} = \sum_{l,\ \sigma} \widetilde{V}_{pl}^{(\sigma)}\,\widetilde{V}_{lk}^{(r-\sigma)}\left(\frac{1}{E_p - E_l - \sigma\omega} + \frac{1}{E_k - E_l + (r-\sigma)\,\omega}\right). \tag{17}$$

К ним нужно добавить граничные условия при $e = 0$:

$$E_k \to \omega_k,\ Q_{pk}^{(r)} \to \left\langle \varphi_p\left|\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} dt\,e^{ir\omega t}\,Q(t)\right|\varphi_k\right\rangle. \tag{18}$$

В отличие от приведенных в предыдущем разделе соотношений, которые носят вспомогательный характер, уравнения (15)—(17) вместе с формулой для КЭ

$$dE_k/de = \widetilde{V}_{kk}^{(0)} \tag{19}$$

образуют замкнутую систему для определения КЭ и матричных элементов по КЭС и полностью заменяют (12) и (13).

В заключение этого раздела приведем формулы, связывающие детерминант D с функцией Грина КЭС

$$G = \left[E - \left(H - i\frac{\partial}{\partial t}\right)\right]^{-1} = \sum_{k,\ q}' \frac{|k,\ q\gg\ll k,\ q|}{E - E_{k,\ q}}, \tag{20}$$

которая в t-представлении имеет вид

$$G(x',\ x,\ E) = \sum_{k,\ q}' \frac{u_{k,\ q}(x')\,u_{k,\ q}^{*}(x)}{E - E_{k,\ q}}$$

и удовлетворяет уравнению

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t'} + E - H(t')\right]G(x',\ x,\ E) = \widetilde{\delta}(t'-t)\,\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}),$$

где $x=(\mathbf{r},\ t)$. В невозмущенном базисе (5) это уравнение приобретает вид бесконечной системы алгебраических уравнений, которую запишем в общепринятой форме

$$G_{\alpha\beta}^{(n,\ m)}=G_{(o)\,\alpha\beta}^{(n,\ m)}+G_{(o)\,\alpha\sigma}^{(n,\ r)}\,V_{\sigma\gamma}^{(r-p)}\,G_{\gamma\beta}^{(p,\ m)}, \tag{21}$$

где

$$G_{\alpha\beta}^{(n,\ m)}=\frac{1}{T^2}\int\limits_{-T/2}^{T/2} dt\,dt' < \varphi_{\alpha,\ n}(t')\,|G|\,\varphi_{\beta,\ m}(t) >,$$

через невозмущенную функцию Грина

$$G_{(o)}(x',\ x,\ E)=\sum_{\alpha,\ n}\varphi_{\alpha,\ n}(x')\,\varphi^{*}_{\alpha,\ n}(x)/(E-E^{(o)}_{\alpha,\ n}),$$

$$G_{(o)\,\alpha\beta}^{(n,\ m)}=\delta_{\alpha\beta}\,\delta_{nm}/(E-E^{(o)}_{\alpha,\ n}).$$

Воспользовавшись тем, что системы уравнений (12) и (21) имеют одинаковые детерминанты, и используя формулу дифференцирования детерминанта, $\delta \ln \det x = \mathrm{Sp}(x^{-1}\,\delta x)$, получаем

$$\delta \ln D=-\,\mathrm{Sp}\,[GG_0^{-1}\,\delta\,(G_0V)].$$

Для случая $\delta V=\widetilde{V}\delta e$ в базисе (14) эта формула приводит к следующему представлению:

$$\partial \ln D/\partial e=\sum_{p,\ m}\widetilde{V}^{(0)}_{pp}/(E_{p,\ m}-E). \tag{22}$$

В случае $\delta(G_0V)=G_0\delta V$, расписывая ее в базисе (5), получаем

$$\partial \ln D/\partial V^{(m)}_{\alpha\beta}=-\sum_q G_{\beta\alpha}^{(q,\ q+m)}. \tag{23}$$

Вариация $\omega_\alpha\to\delta\omega_\alpha$ приводит к соотношению

$$\partial \ln D/\partial\omega_\alpha=\sum_n(G_{\alpha\alpha}^{(n,\ n)}-G_{(o)\,\alpha\alpha}^{(n,\ n)}). \tag{24}$$

В отличие от (12) система уравнений (21) является неоднородной и для нее можно использовать обычные итерационные методы решений. Этот факт делает формулы (22) и (23) полезными также для приближенных вычислений детерминанта.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Проанализируем двухуровневое приближение с помощью уравнений (17) и (19). Подчеркнем, что матричные элементы в этих уравнениях взяты по точным КЭ функциям. Допустим, что для квазиэнергий с номерами 1 и 2 имеет место однофотонный резонанс, т. е. $|E_1-E_2-\omega|$ много меньше всех других знаменателей в (17), причем это условие имеет место для всех значений ε, включая $\varepsilon = 0$. Тогда можно ограничиться рассмотрением всего лишь двух КЭ состояний, для которых уравнения (17) дают интеграл движения

$$V_{21}^{(1)}(E_1 + \alpha) = \beta, \tag{П.1}$$

где $\alpha = \frac{1}{2}(\omega - \omega_1 - \omega_2)$.

Для квазиэнергий получаем обычную формулу

$$E_1 - E_2 = \sqrt{(\omega_2 - \omega_1 - \omega)^2 + |\langle \varphi_2 | V^{(1)} | \varphi_1 \rangle|^2}, \tag{П.2}$$

где матричный элемент берется уже по невозмущенным состояниям. Рассматривая интеграл (П.1), можно убедиться, что члены с малыми знаменателями в (17) имеют также и малые числители, так что дробь остается конечной.

Представляет интерес вычисление нерезонансных матричных элементов. Для $V_{1\nu}^{(k)}$, например, получаем

$$V_{1\nu}^{(k)} = A_\nu^k \cos\left(\int^{\varepsilon} \frac{V_{21}^{(1)}}{E_1 - E_2 - \omega}\, d\varepsilon_1\right), \tag{П.3}$$

откуда следует, что числители нерезонансных членов в (17) не возрастают.

Институт физических исследований
АН Арм. ССР

Поступила 7.I.1980

ЛИТЕРАТУРА

1. *Я. Б. Зельдович.* ЖЭТФ, 51, 1492 (1966); УФН, 110, 139 (1974).
2. *В. И. Ритус.* ЖЭТФ, 51, 1544 (1966).
3. *H. Sambe.* Phys. Rev., A6, 2203 (1973).
4. *Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов.* Атом в сильном световом поле, Атомиздат, М., 1978.
5. *А. О. Меликян.* Квантовая электроника, 4, 429 (1977).
6. *Д. А. Киржниц.* Сб. Проблемы теоретической физики. Памяти И. Е. Тамма, Изд. Наука, М., 1972.
7. *Д. А. Киржниц, Г. Ю. Крючков, Н. Ж. Такибаев.* ЭЧАЯ, 10, 741 (1979).
8. *I. N. Shirley.* Phys. Rev., B 138, 979 (1965).
9. *А. О. Меликян, С. Г. Саакян.* ЖЭТФ, 76, 1530 (1979).

ԸՍՏ ՊԱՐԱՄԵՏՐԻ ԴԻՖԵՐԵՆՑԻԱԼ ՄԵԹՈԴ ՔՎԱԶԻԷՆԵՐԳԻԱՆԵՐԻ ՀԱՄԱՐ

Գ. ՅՈՒ. ԿՐՅՈՒՉԿՈՎ, Ա. Հ. ՄԵԼԻՔՅԱՆ

Առաջարկված է պարամետրերի դիֆերենցիալ հավասարումների վրա հիմնված քվազի-էներգիաների և քվազիէներգետիկ վիճակների միջև անցումների ամպլիտուդների հաշվարկի մեթոդ։ Ցույց է տրված, որ միջինները քվազիէներգետիկ վիճակներում արտահայտվում են քվազիէներգիաների սպեկտրի միջոցով։

A METHOD OF DIFFERENTIATION OVER PARAMETERS FOR QUASIENERGIES

G. Yu. KRYUCHKOV, A. O. MELIKYAN

A method for calculating the quasienergies and the transition probabilities between the quasienergy states using the differential equations over the parameters is presented. It is shown, that the mean values in the quasienergy states may be expressed through the quasienergy spectrum.