ՀԱՅԿԱԿԱՆ ՍՍՀ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ ԶԵԿՈՒՅՑՆԵՐ
ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР
LXXI 1980 5

УДК 539.1

ФИЗИКА

Г. Ю. Крючков, Ю. П. Малакян

Радиационный сдвиг атомных квазиэнергетических уровней

(Представлено чл.-корр. АН Армянской ССР М. Л. Тер-Микаеляном 1/VII 1980)

1. Обычно при изучении поведения атомных уровней в световом поле игнорируется вопрос о величине радиационных сдвигов этих уровней, обусловленных взаимодействием электрона с собственным полем излучения. В частности, не рассматривается эффект влияния сильного поля на радиационное смещение. Остается также не выясненным вопрос о способе правильного учета радиационных поправок к энергиям в присутствии внешнего поля. В настоящей работе мы не ставили себе целью решить эту задачу в общем виде и ограничились вычислением радиационных сдвигов квазиэнергетических уровней, возникающих в системе «атом + периодическое поле» при пренебрежении релаксационными явлениями. Основным результатом работы является формула (8) для сдвига квазиэнергий, справедливая для полей, напряженность которых E меньше атомных $E_{at} \sim 10^9$ *в/см*, учитывающая влияние поля в общем случае как отсутствия, так и при наличии резонансов.

2. Мы исходим из гамильтониана одноэлектронного атома, взаимодействующего с полем $\vec{E}(t) = \mathrm{Re}(\vec{E}_0 e^{-i\omega t})$ в дипольном приближении и квантованным полем излучения $\vec{a}$

$$H = H_0 - \vec{E}\vec{d} - e\vec{\alpha}\vec{a}, \quad H_0 = \vec{\alpha}\vec{p} + \beta m + e\phi(r). \tag{1}$$

Здесь: $\phi(r)$ — кулоновский потенциал, $\vec{d} = e\vec{r}$ — дипольный момент электрона. Хотя движение электрона в атоме нерелятивистское, мы рассмотрели релятивистский гамильтониан, чтобы в атомных волновых функциях $\varphi_i(\vec{r})$ учесть тонкую структуру уровней.

Вычисления проводятся в картине Фарри. Без учета радиационных эффектов система «атом + поле» для режима адиабатического включения поля обладает квазиэнергетическими волновыми функциями

$$\psi_l(\vec r, t) = e^{-iE_l t} u_l(\vec r, t) = e^{-iE_l t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_i c^l_{n,i} e^{-in\omega t} \varphi_i(\vec r), \tag{2}$$

где E_l — квазиэнергии [1]. Функции ψ_l выбраны так, чтобы при выключении взаимодействия с внешним полем $\psi_l \to \exp(-i\omega_l t)\varphi_l(\vec r)$, где ω_l — невозмущенные атомные уровни энергий [2,3]. (В случае внезапного включения волновые функции системы представляются в виде суперпозиций ψ_l и учет радиационных сдвигов E_l приведет к изменению частоты осцилляций населенностей атома.)

Учет члена $e\vec\alpha\vec a$ приводит к радиационному сдвигу ΔE_l, который мы вычислим в низшем порядке т. в. Для этого воспользуемся схемой, обычно используемой в бесполевом случае, когда вводится импульс обрезания $(Z\alpha)^2 m \ll k_{min} \ll (Z\alpha) m$ и отдельно учитываются вклады взаимодействия с мягкими $\omega_k < k_{min}$ и жесткими $\omega_k > k_{min}$ виртуальными фотонами [4]. Для низкочастотного вклада получаем выражение

$$\Delta E_l = -\frac{2\alpha}{3\pi} k_{min} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \sum_j |\vec P^{(q)}_{jl}|^2 + \frac{2\alpha}{3\pi} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \sum_{j\neq l} |\vec P^{(q)}_{jl}|^2 (E_l - E_j + q\omega) \ln(k_{min}/|E_l - E_j + q\omega|), \tag{3}$$

$$\vec P^{(q)}_{lj} = \langle\langle u_l | \vec V e^{-iq\omega t} | u_j \rangle\rangle, \tag{4}$$

где $\vec V$ — оператор скорости электрона, а двойная скобка означает обычное интегрирование по d^3r и усреднение по периоду поля $T = 2\pi/\omega$. Матричные элементы (4) выражаются через коэффициенты $c^l_{n,i}$ следующим образом:

$$\vec P^{(q)}_{lj} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{i_1 i_2} c^{l*}_{n+q,i_1} c^j_{n,i_2} \omega_{i_1 i_2} \vec r_{i_1 i_2}. \tag{4a}$$

В формуле (3) под логарифмом мы пренебрегли величиной $E_l - E_j + q\omega$ по сравнению с k_{min}. Ясно, что это справедливо для тех q, когда величина $E_l - E_j + q\omega$ порядка энергии связи атома $(Z\alpha)^2 m$. Для больших значений q величины $|\vec P^{(q)}_{lj}|^2$ сильно подавлены, так что в сумме по q в (3) этими членами можно пренебречь. Отметим также, что в силу соотношения $\vec P^{(q)}_{lj} = \vec P^{(-q)*}_{jl}$ диагональные члены $l = j$ выпадают из суммы по j в (3).

В низкоэнергетической части необходимо произвести перенормировку массы. В нерелятивистском приближении массовый контрчлен принимает вид $\delta m(\beta - 1) \to \delta m(\vec P/m)^2$, и поскольку имеет место соотношение

$$\langle u_l | \vec V^2 | u_l \rangle = \sum_{q,j} |\vec P^{(q)}_{lj}|^2, \tag{5}$$

то первый член в (3) включается в перенормировку массы.

В области $\omega_k > k_{min}$ поле ядра учитывается в первом порядке т. в. и сдвиг представляется в виде

$$\Delta E_i^{>} = e \langle\langle u_i | \delta\varphi | u_i \rangle\rangle . \qquad (6)$$

где величина $\delta\varphi$ содержит радиационные поправки к кулоновскому потенциалу, вычисленные в бесполевом случае (4)*. Вклады внешнего поля в $\delta\varphi$ имеют порядок $(eE/m\omega) \ll \frac{E}{E_{at}}$ и в (6) опущены. Формула (6) аналогична выражению для бесполевого случая [1] с той лишь разницей, что все операторы в $\delta\varphi$ усредняются теперь по новым волновым функциям.

Объединяя (7) и (6) и используя правило сумм

$$\sum_{q=-\infty}^{\infty} \sum_{j \neq i} (E_j - E_i + q\omega) |\vec{P}_{ji}^{(q)}|^2 = \frac{e}{2m^2} \langle u_i | \nabla^2 \varphi(r) | u_i \rangle , \qquad (7)$$

окончательно получаем

$$\Delta E_i = \frac{2\alpha}{3\pi} \sum_{q,\, j \neq i} |\vec{P}_{ji}^{(q)}|^2 (E_j - E_i + q\omega) \ln \frac{m}{2|E_i - E_j + q\omega|} +$$

$$+ \frac{e\alpha}{3\pi m^2} \frac{19}{30} \langle u_i | \nabla^2 \varphi(r) | u_i \rangle + \frac{e\alpha}{4\pi m^2} \left\langle u \left| \vec{\sigma} \vec{l} \, \frac{1}{r} \cdot \frac{d\varphi}{dr} \right| u_i \right\rangle , \qquad (8)$$

где $\vec{l}$ — оператор орбитального момента.

Отметим, что формула (8) включает два эффекта влияния поля на радиационный сдвиг: 1) учитывает эффект перемешивания атомных уровней, 2) содержит непосредственное влияние поля на радиационный сдвиг каждого уровня в отдельности.

3. Наиболее простой случай реализуется для однофотонного резонанса между атомными уровнями 1 и 2, когда: $\varepsilon = \omega_{21} - \omega \ll \omega_{21}$, $|V_{21}| \ll \omega_{21}$, где $V_{21} = \langle \varphi_2 | \vec{E}_0 \vec{d} | \varphi_1 \rangle$. Величины $|\vec{P}_{ij}^{(q)}|^2$ вычисляются с помощью квазиэнергетических волновых функций в резонансном приближении [2,3].

Радиационный сдвиг (к. э.) имеет следующий вид:

$$\Delta E_{1,2} = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{|\varepsilon|}{2\Omega}\right)\delta_1 + \frac{1}{2}\left(1 \mp \frac{|\varepsilon|}{2\Omega}\right)\delta_2 , \qquad (9)$$

где $\delta_{1,2}$ — радиационные сдвиги в отсутствии поля, а $\Omega = \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon^2 + |V_{21}|^2}$ — частота Раби.

Формулы (9) справедливы при условиях: $\delta_{1,2} \ll \Omega$, $|\delta_2 - \delta_1| \gg |V_{21}|^2/\omega$, первое из которых является критерием применимости т. в., а второе соответствует пренебрежению нерезонансными вкладами. Для любых

---

* Радиационные поправки к взаимодействию электрона с внешним полем подавлены по сравнению с соответствующими вкладами в $\delta\varphi$ параметром $E/E_{at} \ll 1$.

значений $\delta_{2,1}$ имеется широкий диапазон ε, E_0, для которых эти условия выполняются.

Как видно из (9), при $|V_{21}| \gg \varepsilon$ сдвиги $\Delta E_{1,2}$ становятся одного порядка, даже если $\delta_{1,2}$ существенно отличаются. Это легко понять, заметив, что коэффициенты при $\delta_{1,2}$ совпадают с вероятностями нахождения системы в состояниях $\psi_{1,2}$ и что последние в этом предельном случае одинаковы. В предельном случае слабых полей $|V'_{21}| \ll \varepsilon$ получаем $\Delta E_i \to \delta_i$.

Формула (8) применима и в другом интересном случае двух близких уровней, для которых $V_{ij} \sim \omega_{ij}$ для полей все ёше меньше атомных.

Потребность в формуле (8) возникает при решении различных квантовоэлектродинамических задач взаимодействия атома с внешним полем, в частности, для случая рассеяния света или электрона на атоме.

В заключение выражаем благодарность М. Л. Тер-Микаеляну и А. О. Меликяну за обсуждения.

Институт физических исследований
Академии наук Армянской ССР

Գ. ՅՈՒ. ԿՐՅՈՒՉԿՈՎ, ՅՈՒ. Պ. ՄԱԼԱՔՅԱՆ

Ատոմի քվազիէներգետիկ մակարդակների ռադիացիոն շեղումը

Քվանտային էլեկտրադինամիկայի տեսանկյունից հետազոտված է ատոմ + արտաքին պարբերական դաշտ սիստեմի քվազիէներգետիկ մակարդակների ռադիացիոն շեղումը։

Ատոմական դաշտերի համեմատ, փոքր արտաքին դաշտերի դեպքում ստացված է ընդհանուր բանաձև այդ շեղումների համար։ Մանրամասնորեն դիտարկված է մի ֆոտոնային ռեզոնանսի դեպքը։ Նշվում են այդ բանաձևի կիրառման այլ դեպքեր։

ЛИТЕРАТУРА—ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

[1] *J. N. Shirley*. Phys. Rev., vol. B 138, 979 (1965); *В. И. Ритус*. ЖЭТФ, т. 51, 1544 (1966); *Я. Б. Зельдович*, ЖЭТФ, т. 51, 1492 (1966); УФН, т. 110, 139 (1973). [2] *М. Л. Тер-Микаелян*. Препринт ИФИ 74–11. Ереван, 1974. [3] *Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов*. Атом в сильном световом поле, Атомиздат, М., 1978. [4] *J. D. Bjorken, S. D. Drell*. Relativistic Quantum Mechanics N. Y., 1964.