

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
"Санкт-Петербургский государственный университет"

Физический факультет
Кафедра общей физики I

КУРСОВАЯ РАБОТА
Поглощение света диполем

Студента 3 курса, 319 группы
Романовского Михаила Сергеевича

Направление: 011200 – «Физика»
Основная образовательная программа
«Физика»

Руководитель работы:
Т. Ю. Голубева

Работа защищена с оценкой
«___» (_____)

«___» _____ 2017 г.

_____/_____/_____
подпись / ФИО /

Санкт-Петербург
2017 г.

Содержание

1. Введение	3
2. Двухуровневый атом	3
3. Средний дипольный момент	7
4. Энергия, поглощаемая диполем	8
5. Поток энергии	9
6. Вывод	10
Список литературы	10

1 Введение

В данной работе рассмотрено полуклассическое взаимодействие светового поля с одиночным двухуровневым атомом в дипольном приближении [1]. То есть, поведение атома описывается квантовомеханически, а поле рассматривается как классическая плоская монохроматическая волна, резонансно взаимодействующая с атомом. В такой модели атом представляет собой диполь, колеблющийся в поле классической волны. Данный подход хорошо работает в случае сильных полей, например, генерируемых лазерами.

Двухуровневый атом - это модель атома, который обладает только двумя энергетическими уровнями [2]. Для наших целей эта модель хорошо подходит, так как в случае резонансного взаимодействия атома с монохроматической волной в реальных системах основную роль чаще всего играет именно резонансный переход между двумя энергетическими уровнями из всех.

Дипольное приближение - модель, в которой носители положительного и отрицательного зарядов считаются точечными, а размеры излучающей системы малы по сравнению с расстояниями, на которых рассматривается поле [2]. В нашем случае будут рассматриваться длины волн, характерные для оптического спектра, и атом с боровским радиусом. Эти условия и позволяют использовать дипольное приближение.

Полуклассический подход - модель, в которой к электромагнитному полю используется классический подход, а сама частица, взаимодействующая с полем, рассматривается с квантовой точки зрения. В случае сильных полей такая модель даёт хорошие результаты. Причина этого лежит в принципе соответствия [3].

Показано, что поток энергии поглощаемого атомом излучения больше, чем поток энергии свободного поля, проходящий через площадку, равную геометрическому поперечному сечению атома.

2 Двухуровневый атом

Запишем вектор состояния двухуровневого атома в виде линейной суперпозиции векторов $|\psi_1(r)\rangle$ и $|\psi_2(r)\rangle$ с амплитудами вероятности $C_1(t), C_2(t)$ [4]:

$$|\psi(r, t)\rangle = C_1(t) |\psi_1(r)\rangle + C_2(t) |\psi_2(r)\rangle. \quad (1)$$

$$|C_1(t)| + |C_2(t)| = 1 \quad (2)$$

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (3)$$

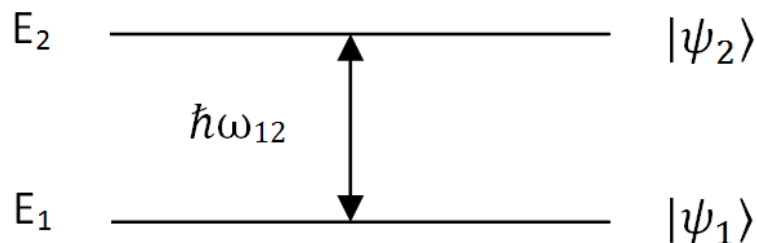


Рис. 1: Схема уровней энергии двухуровневого атома.

В дальнейшем мы не будем указывать зависимость векторов состояния от координаты по двум причинам. Во-первых, нас интересует поведение волнового вектора во времени.

Во-вторых, координатная составляющая здесь входит только в векторы, соответствующие энергетическим уровням, и не влияет на процессы перехода с одного уровня на другой.

В поле классической волны оператор энергии \hat{H} принимает вид [5]:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (4)$$

где \hat{H}_0 - оператор энергии для атома вне поля, \hat{V} - оператор взаимодействия атома с полем.

Рассмотрим отдельно каждую компоненту \hat{H} . Для оператора \hat{H}_0 справедливо уравнение на собственные значения:

$$\hat{H}_0 |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle, \quad (5)$$

где E_i - энергия соответствующего уровня i , i принимает значения 1 и 2, $E_i = \hbar\omega_i$, ω_i - частота, соответствующая i -му уровню энергии.

Введём единичный оператор \hat{I} [6]:

$$\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \hat{I}. \quad (6)$$

Этот оператор на любой вектор состояния действует следующим образом:

$$\hat{I} |\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (7)$$

Поддействуем оператором \hat{I} на оператор \hat{H}_0 слева и справа:

$$\hat{H}_0 = \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \hat{H}_0 \sum_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| = \sum_{i,j} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \hat{H}_0 |\psi_j\rangle \langle \psi_j|, \quad (8)$$

где $i, j = 1, 2$.

Воспользуемся формулой (5) и перенесём E_j в конец выражения:

$$\sum_{i,j} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \hat{H}_0 |\psi_j\rangle \langle \psi_j| = \sum_{i,j} |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi_j\rangle \langle \psi_j| E_j. \quad (9)$$

В силу ортонормированности базисных векторов 3:

$$\sum_{i,j} |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi_j\rangle \langle \psi_j| E_j = \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| E_i, \quad (10)$$

$$\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| E_i = \hbar\omega_1 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + \hbar\omega_2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2|. \quad (11)$$

Далее рассмотрим оператор \hat{V} в дипольном приближении [5]:

$$\hat{V} = \hat{d}\mathcal{E}, \quad (12)$$

где $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$ - напряжённость поля классической волны, $\hat{d} = -e\hat{r}$ - оператор дипольного момента атомного перехода.

Поддействуем оператором \hat{I} на оператор \hat{V} слева и справа:

$$\hat{V} = - \sum_{i,j} |\psi_i\rangle \langle \psi_j| e\hat{r} |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \mathcal{E}(t). \quad (13)$$

Проведём промежуточные вычисления и найдём вид оператора \hat{d} в матричном представлении:

$$d_{ij} = \langle \psi_i | e\hat{r} | \psi_j \rangle \quad (14)$$

$$\hat{d} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{pmatrix} \quad (15)$$

Вычислим матричные элементы d_{11} и d_{12} :

$$\langle \psi_1 | e\hat{r} | \psi_1 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(r) e\hat{r} \psi_1(r) dr = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_1(r)|^2 e r dr = 0, \quad (16)$$

$$\langle \psi_1 | e\hat{r} | \psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(r) e\hat{r} \psi_2(r) dr \neq 0. \quad (17)$$

Выражение (16) справедливо в силу того, что под интегралом стоит произведение чётной и нечётной функции, а сам интеграл берётся по симметричному промежутку. Выражение (17), напротив, содержит произведение двух нечётных функций и одной чётной, и он также берётся по симметричному промежутку, поэтому он не равен нулю.

В силу эрмитовости оператора \hat{d} можно утверждать, что $d_{ij} = d_{ji}^*$, а так как матричные элементы оператора \hat{d} - наблюдаемые, то и $d_{ij} = d_{ji}^* = d_{ji}$.

После промежуточных вычислений получим:

$$\hat{V} = - (|\psi_1\rangle \langle \psi_2| d_{12} + |\psi_2\rangle \langle \psi_1| d_{21}) \mathcal{E}(t). \quad (18)$$

Мы получили вид всех интересующих нас операторов. Теперь рассмотрим, как будут развиваться амплитуды вероятности с течением времени. Для этого мы используем нестационарное уравнение Шрёдингера.

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (19)$$

Ещё раз запишем выражение для вектора состояния и продифференцируем его по времени:

$$|\psi(t)\rangle = C_1(t) |\psi_1\rangle + C_2(t) |\psi_2\rangle, \quad (20)$$

$$|\dot{\psi}(t)\rangle = \dot{C}_1(t) |\psi_1\rangle + \dot{C}_2(t) |\psi_2\rangle. \quad (21)$$

Подставим всё в нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$\dot{C}_1(t) |\psi_1\rangle + \dot{C}_2(t) |\psi_2\rangle = -\frac{i}{\hbar} (\hbar\omega_1 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + \hbar\omega_2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2| - \quad (22)$$

$$- |\psi_1\rangle \langle \psi_2| d_{12} \mathcal{E}(t) - |\psi_2\rangle \langle \psi_1| d_{21} \mathcal{E}(t)) (C_1(t) |\psi_1\rangle + C_2(t) |\psi_2\rangle) = \quad (23)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} (\hbar\omega_1 C_1(t) |\psi_1\rangle + \hbar\omega_2 C_2(t) |\psi_2\rangle - d_{12} \mathcal{E} C_2(t) |\psi_1\rangle - d_{21} \mathcal{E} C_1(t) |\psi_2\rangle). \quad (24)$$

Введём частоту Раби $\Omega = \frac{d_{12}\mathcal{E}_0}{\hbar}$. Заметим, что $d_{12} = d_{21} = d_{12}^*$. Раскроем скобки:

$$\dot{C}_1(t) |\psi_1\rangle + \dot{C}_2(t) |\psi_2\rangle = -i\omega_1 C_1(t) |\psi_1\rangle - i\omega_2 C_2(t) |\psi_2\rangle + i\Omega C_2(t) |\psi_1\rangle \cos \omega t + i\Omega C_1(t) |\psi_2\rangle \cos \omega t. \quad (25)$$

Так как $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ - ортогональные вектора, мы можем разделить уравнения:

$$\dot{C}_1 = -i\omega_1 C_1 + i\Omega C_2 \cos \omega t \quad (26)$$

$$\dot{C}_2 = -i\omega_2 C_2 + i\Omega C_1 \cos \omega t \quad (27)$$

Перейдём к медленно меняющимся амплитудам $a_i(t) = C_i(t) e^{i\omega_i t}$:

$$C_1 = a_1 e^{-i\omega_1 t} \Rightarrow \dot{C}_1 = \dot{a}_1 e^{-i\omega_1 t} - a_1 i\omega_1 e^{-i\omega_1 t} \quad (28)$$

$$C_2 = a_2 e^{-i\omega_2 t} \Rightarrow \dot{C}_2 = \dot{a}_2 e^{-i\omega_2 t} - a_2 i\omega_2 e^{-i\omega_2 t} \quad (29)$$

Также, используя

$$\cos \omega t = \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (30)$$

перепишем уравнение (26) в виде:

$$\dot{a}_1 e^{-i\omega_1 t} - i\omega_1 a_1 e^{-i\omega_1 t} = -i\omega_1 a_1 e^{-i\omega_1 t} + i\Omega a_2 e^{-i\omega_2 t} \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}). \quad (31)$$

После упрощения получим:

$$\dot{a}_1 = i\Omega a_2 e^{-i(\omega_2 - \omega_1)t} \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}). \quad (32)$$

Введём частоту атомного перехода $\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1$:

$$\dot{a}_1 = \frac{1}{2} i\Omega a_2 (e^{-i(\omega_{21} - \omega)t} + e^{-i(\omega_{21} + \omega)t}). \quad (33)$$

Избавимся от быстроосциллирующей компоненты $e^{-i(\omega_{21} + \omega)t}$. Используем резонансное приближение $\omega_{21} = \omega$ и в итоге получим:

$$\dot{a}_1 = \frac{1}{2} i\Omega a_2. \quad (34)$$

Аналогично рассматривая уравнение для $\dot{C}_2(t)$, получим систему уравнений:

$$\begin{cases} \dot{a}_1 = i\frac{\Omega}{2} a_2 \\ \dot{a}_2 = i\frac{\Omega}{2} a_1 \end{cases} \quad (35)$$

Рассмотрим уравнение на \dot{a}_1 :

$$a_2 = -\frac{2i}{\Omega} \dot{a}_1 \Rightarrow \dot{a}_2 = -\frac{2i}{\Omega} \ddot{a}_1, \quad (36)$$

$$-\frac{2i}{\Omega} \ddot{a}_1 = i\frac{\Omega}{2} a_1, \quad (37)$$

$$\ddot{a}_1 = \frac{i^2}{4} |\Omega|^2 a_1. \quad (38)$$

Будем искать решение уравнения в виде $a_1 = e^{\lambda t}$, где λ - комплексная постоянная:

$$a_1 = e^{\lambda t} \Rightarrow \lambda^2 = \frac{i^2}{4} |\Omega|^2 \quad (39)$$

$$\lambda_{1,2} = \pm \frac{i}{2} \Omega \quad (40)$$

Очевидно, что a_1 имеет следующее общее решение:

$$a_1 = b_1 e^{i\frac{\Omega}{2}t} + b_2 e^{-i\frac{\Omega}{2}t}, \quad (41)$$

где b_i - это, вообще говоря, комплексный множитель.

Аналогично найдём решение для a_2 :

$$a_2 = b'_1 e^{i\frac{\Omega}{2}t} + b'_2 e^{-i\frac{\Omega}{2}t}. \quad (42)$$

Заметим, что в начальный момент времени диполь находится в низшем энергетическом состоянии, поэтому справедливы следующие граничные условия:

$$a_1(0) = 1 \Rightarrow b_1 + b_2 = 1 \quad (43)$$

$$a_2(0) = 0 \Rightarrow b'_1 = -b'_2 \quad (44)$$

Применяя эти граничные условия к выражениям (41) и (42), получим следующие результаты:

$$a_2 = b'_1 \left(e^{i\frac{\Omega}{2}t} - e^{-i\frac{\Omega}{2}t} \right) \frac{1}{2i} 2i = 2ib'_1 \sin \frac{\Omega}{2}t \quad (45)$$

$$\dot{a}_2 = i\frac{\Omega}{2}a_1 \Rightarrow a_1 = -\frac{2i}{\Omega}\dot{a}_2 \quad (46)$$

$$a_1 = -\frac{2i}{\Omega}2ib'_1 \frac{\Omega}{2} \cos \frac{\Omega}{2}t = 2b'_1 \cos \frac{\Omega}{2}t = b'_1 \left(e^{i\frac{\Omega}{2}t} + e^{-i\frac{\Omega}{2}t} \right) \quad (47)$$

$$b'_1 = b_1; b'_2 = b_2 \Rightarrow b_1 = b_2 \quad (48)$$

$$b_1 + b_2 = 2b_1 = 1 \quad (49)$$

$$b_1 = b_2 = b' = \frac{1}{2} \quad (50)$$

Таким образом:

$$\begin{cases} a_1 = \cos \frac{\Omega}{2}t \\ a_2 = i \sin \frac{\Omega}{2}t \end{cases} \quad (51)$$

Вернёмся к вектору состояния, описывающему состояние диполя.

$$|\psi\rangle = C_1 |\psi_1\rangle + C_2 |\psi_2\rangle \quad (52)$$

Определив коэффициенты a_1 и a_2 , можно полностью определить вид амплитуд вероятности C_1 и C_2

$$C_1 = a_1 e^{-i\omega_1 t}, \quad C_2 = a_2 e^{-i\omega_2 t} \quad (53)$$

Подставим a_1 и a_2 , затем подставим C_1 и C_2 в вектор состояния:

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\Omega}{2}t e^{-i\omega_1 t} |\psi_1\rangle + i \sin \frac{\Omega}{2}t e^{-i\omega_2 t} |\psi_2\rangle. \quad (54)$$

3 Средний дипольный момент

Найдём среднее значение оператора \hat{d} . Для этого заключим оператор дипольного момента в обкладки вектора состояния $\langle\psi|\hat{d}|\psi\rangle$. Очевидно, что слагаемые, включающие в себя матричные элементы d_{11} и d_{22} будут равняться нулю, поэтому запишем:

$$\langle d \rangle = i \cos \frac{\Omega}{2}t e^{i\omega_1 t} \sin \frac{\Omega}{2}t e^{-i\omega_2 t} d_{12} - i \sin \frac{\Omega}{2}t e^{i\omega_2 t} \cos \frac{\Omega}{2}t e^{-i\omega_1 t} d_{21} \quad (55)$$

Зная, что $d_{12} = d_{21}$, упростим выражение:

$$\langle d \rangle = d_{12} \frac{i}{2} \sin \Omega t (e^{-i\omega_{21}t} - e^{i\omega_{21}t}) \frac{i}{i} = \frac{d_{12}}{2i} \sin \Omega t (e^{i\omega_{21}t} - e^{-i\omega_{21}t}) = d_{12} \sin \Omega t \sin \omega_{21}t \quad (56)$$

Итого:

$$\langle d \rangle = d_{12} \sin \Omega t \sin \omega_{21}t. \quad (57)$$

Отсюда понятно, что амплитуда диполя является функцией времени, которая при обычных условиях меняется медленно по сравнению со световыми колебаниями. Действительно, $d(t) = d_{12} \sin \Omega t$ возрастает от начального нулевого значения до максимального значения d_{12} , а затем уменьшается, пока вновь не достигнет нуля. По окончании этого цикла, в момент времени $T = \frac{\pi}{\Omega}$ атом с определённой вероятностью находится в верхнем энергетическом состоянии, то есть переход завершён.

Для наглядности построим графики $d(t)$, $|C_1|^2$, $|C_2|^2$ от нулевого момента времени до T и нормируем их на единицу. Можно видеть, что действительно амплитуды вероятности для соответствующих энергетических уровней достигают своих максимумов именно в начале либо в конце периода. То есть, энергетический переход действительно завершается в момент достижения нулевого значения дипольного момента.

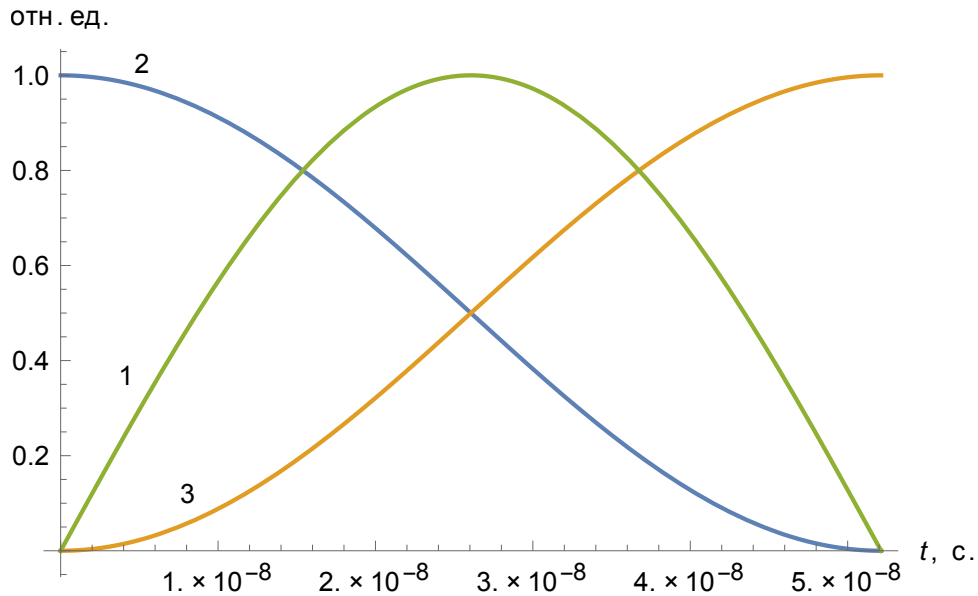


Рис. 2: 1 - амплитуда дипольного момента $d(t)$, отн. ед.; 2 - вероятность нахождения $|C_1|^2$ атома в нижнем энергетическом состоянии E_1 , отн. ед.; 3 - вероятность нахождения $|C_2|^2$ атома в верхнем энергетическом состоянии E_2 , отн. ед.

4 Энергия, поглощаемая диполем

Легко проверить, что энергия, поглощённая атомом в этом цикле, определяемая как работа, которую поле совершает над атомом, равна энергии одного фотона $\hbar\omega$

$$\int_0^T E(t) \frac{d}{dt} \langle d(t) \rangle dt = E_0 d_{12} \int_0^T \cos \omega t \frac{d}{dt} \left(\sin \omega t \sin \frac{d_{12} E_0}{\hbar} t \right) dt = \quad (58)$$

$$= E_0 d_{12} \int_0^T \cos \omega t (\omega \cos \omega t \sin \Omega t + \Omega \sin \omega t \cos \omega t) dt = \quad (59)$$

$$= E_0 d_{12} \int_0^T (\omega \cos^2 \omega t \sin \Omega t + \Omega \cos \omega t \sin \omega t \cos \Omega t) dt \quad (60)$$

Используя интегрирование по частям и теорему о среднем:

$$\int_0^T \Omega \cos \omega t \sin \omega t \cos \Omega t dt = 0. \quad (61)$$

Получим:

$$\int_0^T E(t) \frac{d}{dt} \langle d(t) \rangle dt = E_0 d_{12} \int_0^T \omega \cos^2 \omega t \sin \Omega t dt = \frac{1}{2} \omega E_0 d_{12} \int_0^T \sin \Omega t dt = \hbar \omega. \quad (62)$$

5 Поток энергии

Обратим внимание на тот этап процесса поглощения, когда передача энергии максимальна. Это происходит при максимальном значении амплитуды дипольного момента, то есть в момент времени $\frac{T}{2}$. Усреднённый по времени поток энергии, поглощаемый атомом, при $t = \frac{T}{2}$ имеет вид:

$$F = \frac{1}{2} \omega E_0 d_{12}, \quad (63)$$

а усреднённая по времени плотность потока энергии в падающей волне:

$$\bar{S} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c E_0^2 \quad (64)$$

Введём сечение поглощения σ таким образом, чтобы поток энергии через σ , который задаётся выражением $\sigma \bar{S}$ был равен F .

$$\sigma = \frac{F}{\bar{S}} = \frac{\omega d_{12}}{\varepsilon_0 c E_0} \quad (65)$$

Теперь обратим внимание на T . В данной задаче мы предполагаем, что спонтанное излучение в течение времени перехода T не оказывает значительного действия. Это значит, что

$$T \ll \tau, \quad (66)$$

где τ - среднее время жизни атома в верхнем энергетическом состоянии. Из квантовомеханических соображений можно показать, что [1]:

$$\tau^{-1} = \frac{1}{3\pi\varepsilon_0} \frac{\omega}{\hbar c^3} d_{12}^2, \quad (67)$$

тогда неравенство (66) может быть записано в следующем виде:

$$E_0 \gg \frac{1}{3\varepsilon_0} \frac{\omega^3}{c^3} d_{12}. \quad (68)$$

Путём несложных преобразований из (65) и (68) получим

$$\sigma \gg \frac{3\lambda^2}{4\pi}. \quad (69)$$

Оценим сечение поглощения атома. Для этого возьмём $\sigma = \frac{1}{100\pi}\lambda^2$, $\lambda = 5000\text{Å}$. Легко видеть, что $\sigma \approx 8 \cdot 10^{-16} \text{ м}^2$

В то же время, геометрическое сечение атома, которое можно оценить по формуле $\sigma = \pi r^2$, где r - борковский радиус, примерно равняется $9 \cdot 10^{-21} \text{ м}^2$

Очевидно, что сечение поглощения действительно много больше, чем геометрическое сечение атома.

6 Вывод

В ходе данной работы была рассмотрена полуклассическая модель атома в дипольном приближении, взаимодействующего с сильным световым полем. Было получено сравнение сечения поглощения атома и его геометрического сечения.

Хотя, на первый взгляд, полученные результаты кажутся парадоксальными, они вполне легко объясняются в рамках всё той же полуклассической модели. Для этого всего лишь надо учесть волну, которую испускает диполь, колеблясь под действием внешнего поля. Интерференция падающей и испускаемой волн существенным образом увеличивает плотность потока энергии электромагнитного поля вблизи диполя.

Один из основных вариантов развития данной работы - это рассмотрение нерезонансного случая и изучение зависимости сечения поглощения от расстройки резонанса, рассмотрение предельных случаев для длинных и коротких волн.

Необходимо заметить, что хотя сечение поглощения квадратично зависит от длины волны поля, это не значит, что у любого вещества сечение поглощения также будет квадратично расти с увеличением длины волны. В данной работе рассматривается только резонансный случай.

Список литературы

- [1] Х. Пауль, Р. Фишер. Поглощение света диполем. УФН, том 141, вып. 2. Пер. В.Г. Терзиева, 1983 г.
- [2] Гайнутдинов Р.Х., Калачев А.А., Мутыгуллина А.А., Хамадеев М.А., Салахов М.Х. Взаимодействие атомов с полем лазерного излучения и резонансная флуоресценция. Учебно-методическое пособие (2013).
- [3] Бете Г. Квантовая механика. М. и Л.: Мир, 1965 г. - 333 с.
- [4] Скалли М.О., Зубайри М.С. Квантовая оптика. Пер. с англ. А.А. Калачёва, Т.Г. Митрофановой, В.В. Самарцева, Р.Н. Шахмуратова. Под ред. В.В. Самарцева. М.: Физматлит, 2003 г. - 510 с.
- [5] Л. Аллен, Дж. Эберли. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. Пер. с англ. Т.М. Ильиновой и М.С. Стрижевской. Под ред. В.Л. Стрижевского. М.: Мир, 1978 г. - 221 с.
- [6] П. Дирак. Принципы квантовой механики. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1979. - 480 с.