Оглавление

Глава 5

Свободное электромагнитное поле и его взаимодействие с системами зарядов

5.1. Гамильтониан электромагнитного поля

Рассмотрим описание электромагнитного поля в нерелятивистской квантовой механике. Электромагнитное поле можно условно разделить на “два типа”: электромагнитное поле, создаваемое какими-либо источниками, и свободное электромагнитное поле, которое существует “само по себе”. Поле, создаваемое источником, определяется свойствами источника и ему соответствует в квантовой механике оператор, который описывает источник. Например, оператор магнитного поля магнитного момента определяется оператором магнитного момента $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$ (см., параграф **??**), т.е. все коммутационные соотношения будут следовать именно из коммутационных соотношений оператора $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ с другими операторами. Оператору заряда в нерелятивистской квантовой механике соответствует простое умножение на соответствующий заряд, поэтому оператор статического электрического поля в координатном представлении есть некоторая функция координат.

Совершенно иначе представляется свободное электромагнитное поле. Поскольку оно существует *независимо* от каких-либо других (квантовых) систем и само по себе представляет квантовую систему, то должно описываться *своим гамильтонианом.* Оператор Гамильтона свободного электромагнитного поля введем согласно принципу соответствия, используя результаты параграфа 4.3 Части 1.

Предварительно сделаем ряд замечаний. Состояние частицы определяется вектором $|\psi\rangle$, который в координатном представлении есть волновая функция: $\langle\mathbf{r}|\psi\rangle$. Свободное электромагнитное поле само по себе есть волна и полностью задается векторным потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$, поэтому возникает искушение взять его в качестве волновой функции, тем более что он удовлетворяет волновому уравнению, т.е. уравнению для частицы с нулевой массой. Однако это было бы грубой ошибкой, потому что векторный потенциал есть *физическая величина*, которой мы должны поставить в соответствие оператор $\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r},t)$ и получить $\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \langle\psi_{\text{поля}}|\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r},t)|\psi_{\text{поля}}\rangle$.

Заметим, что, написав $|\psi_{\text{поля}}\rangle$, мы предполагаем, что нам известно выражение *произвольного* состояния поля, но в общем случае мы не могли явно записать произвольное состояние даже для частицы. Продвинуться в этом направлении в свое время помог фундаментальный принцип суперпозиции, благодаря которому удалось представить произвольное состояние в виде суперпозиции определенных состояний. Разложение произвольного состояния по некоторому базису также можно рассматривать как суперпозицию состояний. В частности, базисные векторы могут описывать и состояния свободной частицы $|\mathbf{p}\rangle$. Например,

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle.$$

В этом случае среднее значение какой-либо физической величины есть

$$\langle f\rangle = \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} a^*_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'}.$$

Векторный потенциал *произвольного* свободного электромагнитного поля можно разложить по плоским волнам – элементарным решениям волнового уравнения:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}\mathrm{d}\omega}{(2\pi)^4}\mathbf{A}_{\mathbf{k}\omega}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{kr}-\omega t)}. \tag{5.1}$$

В таком случае амплитуды Фурье $\mathbf{A}_{\mathbf{k}\omega}$ можно рассматривать как значение оператора векторного потенциала в базисе *элементарных состояний* свободного электромагнитного поля – плоских монохроматических волнах. Плоская волна определяется своим 4-волновым вектором, нулевая компонента которого равна $\omega = c|\mathbf{k}|$, и поляризацией.[1] Исходя из сказанного, можно для вектора состо-

[1] Напомним, что плоская монохроматическая волна обязательно поляризована. В произвольном случае поляризация эллиптическая, в частном – циркулярная (левая или правая) либо линейная.

яния поля всегда записать

$$|\psi_{\text{поля}}\rangle = \sum_{\mathbf{k},\alpha} a_{\mathbf{k},\alpha}|\mathbf{k},\alpha\rangle. \tag{5.2}$$

Здесь $|\mathbf{k},\alpha\rangle$ – вектор базисного состояния (плоской монохроматической волны), α обозначает ее поляризацию.

Векторный потенциал выражался через комплексные амплитуды $\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}}$ и $\boldsymbol{\alpha}^*_{\mathbf{k}}$, которым мы должны поставить в соответствие операторы $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{k}}(t)$ и $\hat{\boldsymbol{\alpha}}^+_{\mathbf{k}}(t)$, а сам оператор векторного потенциала должен иметь вид:

$$\widehat{\mathbf{A}} = \sum_{\mathbf{k},\alpha} \left(\hat{\alpha}_{\mathbf{k},\alpha}(t)\mathbf{e}_\alpha \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{kr}} + \hat{\alpha}^+_{\mathbf{k},\alpha}\mathbf{e}_\alpha(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{kr}}\right). \tag{5.3}$$

Мы здесь ввели в явном виде поляризацию плоских волн.

Обобщенные координаты и импульсы электромагнитного поля также были выражены через амплитуды векторного потенциала $\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}}$ и $\boldsymbol{\alpha}^*_{\mathbf{k}}$. Поэтому операторы обобщенных координат и импульсов должны быть записаны как

$$\begin{aligned}
\widehat{Q}_{\mathbf{k},\alpha} &= \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}}\left(\hat{\alpha}_{\mathbf{k},\alpha}(t) + \hat{\alpha}^+_{\mathbf{k},\alpha}(t)\right), \\
\widehat{P}_{\mathbf{k},\alpha} &= -\mathrm{i}\omega\sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}}\left(\hat{\alpha}_{\mathbf{k},\alpha}(t) - \hat{\alpha}^+_{\mathbf{k},\alpha}(t)\right).
\end{aligned} \tag{5.4}$$

Таким образом, запишем согласно принципу соответствия оператор Гамильтона электромагнитного поля:

$$\widehat{H} = \sum_{\mathbf{k},\alpha}\widehat{H}_{\mathbf{k},\alpha} = \sum_{\mathbf{k},\alpha}\frac{1}{2}\left(\widehat{P}^2_{\mathbf{k},\alpha} + \omega_k^2\widehat{Q}^2_{\mathbf{k},\alpha}\right), \tag{5.5}$$

где операторы обобщенных координат и импульсов удовлетворяют коммутационным соотношениям[2]:

$$\left[\widehat{P}_{\mathbf{k},\alpha}, \widehat{Q}_{\mathbf{k}',\beta}\right] = -\mathrm{i}\hbar\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\alpha,\beta}. \tag{5.6}$$

[2]Поскольку скобки Пуассона обобщенных координат и импульсов “классического” электромагнитного поля равны

$$\{P_{\mathbf{k},\alpha}, Q_{\mathbf{k},\beta}\} = \sum_{\mathbf{k}',\alpha'}\left(\frac{\partial P_{\mathbf{k},\alpha}}{\partial P_{\mathbf{k}',\alpha'}}\frac{\partial Q_{\mathbf{k},\beta}}{\partial Q_{\mathbf{k}',\alpha'}} - \frac{\partial P_{\mathbf{k},\alpha}}{\partial Q_{\mathbf{k}',\alpha'}}\frac{\partial Q_{\mathbf{k},\beta}}{\partial P_{\mathbf{k}',\alpha'}}\right) = \delta_{\alpha,\beta},$$

им ставятся в ссответствие согласно одному из постулатов квантовой механики “квантовые скобки Пуассона” (5.6).

Таким образом видим, что задача может быть решена так же, как для системы связанных гармонических осцилляторов в §**??**. Введем безразмерные переменные

$$\hat{p}_{\mathbf{k},\alpha} = \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega_k}}\widehat{P}_{\mathbf{k},\alpha}, \qquad \hat{q}_{\mathbf{k},\alpha} = \sqrt{\frac{\omega_k}{\hbar}}\widehat{Q}_{\mathbf{k},\alpha} \tag{5.7}$$

и соответствующие неэрмитовы повышающие и понижающие операторы

$$a_{\mathbf{k},\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{q}_{\mathbf{k},\alpha} + \mathrm{i}\hat{p}_{\mathbf{k},\alpha}\right), \; a^{+}_{\mathbf{k},\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{q}_{\mathbf{k},\alpha} - \mathrm{i}\hat{p}_{\mathbf{k},\alpha}\right). \tag{5.8}$$

Как следует из формулы (5.6), операторы (5.8) удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$\left[a_{\mathbf{k},\alpha}, a^{+}_{\mathbf{k}',\alpha'}\right] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\alpha,\alpha'}. \tag{5.9}$$

Согласно соотношениям (5.7), (5.8) и (4.27) части 1 имеем

$$\hat{\alpha}_{\mathbf{k},\alpha} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}}\hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}, \tag{5.10}$$

поэтому оператор векторного потенциала принимает вид[3]:

$$\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r},t) = \sum_{\mathbf{k},\alpha}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}}\left(a^{+}_{\mathbf{k},\alpha}\mathbf{e}^{*}_{\alpha}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{kr}} + a_{\mathbf{k},\alpha}\mathbf{e}_{\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{kr}}\right). \tag{5.11}$$

Наконец, гамильтониан свободного электромагнитного поля можно также выразить через повышающие и понижающие операторы

$$\widehat{H} = \sum_{\mathbf{k},\alpha}\hbar\omega_k\left(a^{+}_{\mathbf{k},\alpha}a_{\mathbf{k},\alpha} + \frac{1}{2}\right). \tag{5.12}$$

5.2. Энергетический спектр и состояния электромагнитного поля

Поскольку гамильтониан (5.12) представляет собой сумму гамильтонианов независимых подсистем, вектор состояния поля можно

[3]Заметим, что временная зависимость операторов $a_{\mathbf{k},\alpha}$ и $a^{+}_{\mathbf{k},\alpha}$ такая же, как и для коэффициентов разложения $\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}}$ и $\boldsymbol{\alpha}^{*}_{\mathbf{k}}$ соответственно.

представить в виде, аналогичном (**??**)[4]:

$$|\Psi_{\mathrm{f}}\rangle = \prod_{\mathbf{k},\alpha} |n_{\mathbf{k},\alpha}\rangle, \tag{5.13}$$

где

$$a^{+}_{\mathbf{k},\alpha} a_{\mathbf{k},\alpha} |n_{\mathbf{k},\alpha}\rangle = n_{\mathbf{k},\alpha} |n_{\mathbf{k},\alpha}\rangle. \tag{5.14}$$

Здесь $n_{\mathbf{k},\alpha} = 0,\, 1,\, 2, \ldots$ – целое неотрицательное число.

Соответственно

$$E = \sum_{\mathbf{k},\alpha} E_{\mathbf{k},\alpha}, \quad \text{где} \quad E_{\mathbf{k},\alpha} = \hbar\omega_k \left(n_{\mathbf{k},\alpha} + \frac{1}{2} \right). \tag{5.15}$$

Видно, что энергия электромагнитного поля в целом может изменяться непрерывно, однако в каждой степени свободы изменяется на величину, кратную $\hbar\omega_k$, поскольку энергия элементарных возбуждений квантована. Эти кванты называют фотонами.

Возвращаясь к определению энергии поля (5.15), видим, что энергия основного состояния

$$E_0 = E_{\min} = \sum_{k,\alpha} \hbar\omega_k/2 = \infty.$$

Таким образом, мы встретились с расходимостью, которую необходимо устранить. В данном случае все просто (хотя и смешно с точки зрения классической математики): поскольку полученная ∞ *всегда* "одна и та же", изменим (перенормируем) начало отсчета для энергии именно на эту, хотя и бесконечную величину: энергию основного состояния поля. В основном состоянии *нет ни одного элементарного возбуждения*, и оно называется *вакуумом*. Теперь можно окончательно записать гамильтониан свободного электромагнитного поля:

$$\widehat{H} = \sum_{\mathbf{k},\alpha} \hbar\omega_k a^{+}_{\mathbf{k},\alpha} a_{\mathbf{k},\alpha}. \tag{5.16}$$

Состояния электромагнитного поля определяются числом фотонов с различными волновыми векторами и поляризациями:

$$|\Psi_{\text{поле}}\rangle = |n_{\mathbf{k}_1,\alpha_1}, n_{\mathbf{k}_2,\alpha_2}, \ldots\rangle. \tag{5.17}$$

[4] Такая запись состояния, строго говоря, неверна, однако поскольку для нас важна только *сепарабельность пространства состояний*, а нигде больше в таком виде мы состояние записывать не будем, то данная нестрогость значения не имеет.

Соответственно

$$
\begin{aligned}
&a^{+}_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}|\Psi_{\text{поле}}\rangle = a^{+}_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}|n_{\mathbf{k}_1,\alpha_1}n_{\mathbf{k}_2,\alpha_2},\, \ldots,\, n_{\mathbf{k}_i,\alpha_i},\, \ldots\rangle = \\
&= \sqrt{n_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}+1}|n_{\mathbf{k}_1,\alpha_1}n_{\mathbf{k}_2,\alpha_2},\, \ldots,\, n_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}+1,\, \ldots\rangle, \\
&a_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}|\Psi_{\text{поле}}\rangle = a_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}|n_{\mathbf{k}_1,\alpha_1}n_{\mathbf{k}_2,\alpha_2},\, \ldots,\, n_{\mathbf{k}_i,\alpha_i},\, \ldots\rangle = \\
&= \sqrt{n_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}}|n_{\mathbf{k}_1,\alpha_1}n_{\mathbf{k}_2,\alpha_2},\, \ldots,\, n_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}-1,\, \ldots\rangle.
\end{aligned}
\tag{5.18}
$$

Произвольное состояние поля можно получить, подействовав соответствующим числом раз повышающим оператором на основное, вакуумное состояние:

$$
|\Psi\rangle = \prod_i \frac{\left(a^{+}_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}\right)^{n_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}}}{\sqrt{n_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}!}}|0\rangle. \tag{5.19}
$$

Операторы $a^{+}_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}$ и $a_{\mathbf{k}_i,\alpha_i}$ называют соответственно операторами *рождения и уничтожения* фотонов.

5.3. Гамильтониан системы заряженных частиц, взаимодействующих со свободным электромагнитным полем

Если в задачах возникает необходимость учесть взаимодействие системы заряженных частиц с переменным электромагнитным полем (излучение, поглощение или рассеяние электромагнитных волн), следует учитывать, что рассматриваемая система перестает быть замкнутой, поскольку ее состояние нельзя рассматривать независимо от состояния поля. Поэтому гамильтониан всегда представляется в виде

$$
\widehat{H} = \widehat{H}_e + \widehat{H}_f + \widehat{V}, \tag{5.20}
$$

где $\widehat{H}_e$, $\widehat{H}_f$ соответственно гамильтонианы свободной системы зарядов (например, сложного атома или молекулы) и свободного электромагнитного поля, а $\widehat{V}$ – оператор взаимодействия системы зарядов и поля. Поскольку мы рассматриваем нерелятивистские системы зарядов, взаимодействие всегда можно рассматривать как малое возмущение. В этом случае нулевое приближение (решение невозмущенной задачи) имеет простой вид:

$$
|\Psi^{(0)}\rangle = |\Psi^{(0)}_e\rangle|\Psi_f\rangle, \quad E^{(0)} = E_e + E_f, \tag{5.21}
$$

где $E_f = \sum \hbar\omega_k n_{k,\alpha}$, а состояние свободного электромагнитного поля определяется соответствующим вектором (5.19).

Оператор взаимодействия с электромагнитным полем имеет “стандартный” вид:

$$\widehat{V} = -\sum_a \frac{e_a}{m_a c}\widehat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}}_a + \sum_a \frac{e_a^2}{2m_a c^2}\widehat{\mathbf{A}}^2 - \sum_a g_a \mu_{0a}\widehat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}\hat{\mathbf{s}}_a, \qquad (5.22)$$

где, однако, как векторный потенциал, так и магнитное поле зависят от времени. Будем в дальнейшем для определенности рассматривать взаимодействие сложного атома с электромагнитным полем, тогда в операторе (5.22) можно учитывать только взаимодействия электронов, и он принимает более простой вид:

$$\widehat{V} = \frac{e}{mc}\sum_a \widehat{\mathbf{A}}(t,\mathbf{r}_a)\hat{\mathbf{p}}_a + \mu_0 \sum_a \widehat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}(t,\mathbf{r}_a)\hat{\mathbf{s}}_a + \frac{e^2}{2mc^2}\sum_a \widehat{\mathbf{A}}^2(t,\mathbf{r}_a). \quad (5.23)$$

Так же, как и в задачах о взаимодействии с внешним (постоянным) электромагнитным полем, третьим слагаемым в операторе (5.23) практически всегда можно пренебречь. В статическом магнитном поле (эффект Зеемана) первое и второе слагаемые были одного порядка. Оценим их в нашей задаче. Поскольку переменное поле рассматривается в электромагнитной волне, которая определяется волновым вектором $\mathbf{k}$, имеем $\mathcal{H} \sim kA$. Соответственно для первого взаимодействия получаем оценку

$$V_1 \sim \frac{e}{mc}p_0 A, \text{ где } \quad p_0 = \frac{me^2}{\hbar} \quad \text{и} \quad V_1 \sim \frac{e^3}{\hbar c}A = \alpha e A.$$

Для второго слагаемого имеем

$$V_2 \sim \frac{e\hbar}{mc}\mathcal{H} \sim \frac{e\hbar}{mc}kA \sim \alpha\frac{\hbar^2}{me^2}ekA \sim ka_0 V_1.$$

Таким образом, вторым слагаемым можно пренебречь, если $ka_0 \ll 1$. Это неравенство соответствует критерию применимости нерелятивистского приближения для излучения электромагнитного поля системой зарядов. В нерелятивистских задачах квантовой механики это выражение также должно быть малым параметром. Действительно, частота электромагнитного поля определяется атомной единицей энергии: $\omega \sim E_0/\hbar \sim me^4/\hbar^3$, поэтому

$$ka_0 \sim \frac{\omega}{c}a_0 \sim \frac{me^4}{\hbar^3 c}\cdot\frac{\hbar^2}{me^2} = \alpha \ll 1.$$

Таким образом, в нерелятивистских задачах второе (магнитное) взаимодействие в операторе (5.23) следует учитывать только в случае, когда вклад первого слагаемого в первом порядке теории возмущений равен нулю.

Итак, оставим только первое слагаемое в операторе возмущения (5.23) и запишем его для взаимодействия со свободным (квантованным) полем:

$$\widehat{V} = \frac{e}{mc} \sum_a \sum_{\mathbf{k},\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}} \left(a^+_{\mathbf{k},\alpha} \mathbf{e}^*_\alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{kr}} + a_{\mathbf{k},\alpha} \mathbf{e}_\alpha \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{kr}} \right) \hat{\mathbf{p}}_a. \tag{5.24}$$

Первое слагаемое в операторе (5.24) описывает взаимодействие системы зарядов с испусканием (излучением) фотона с определенным волновым вектором и поляризацией, а второе – с поглощением соответствующего фотона. При этом вклад от второго слагаемого отличен от нуля только если поле находится в возбужденном состоянии, в котором присутствует нужное возбуждение. Первое слагаемое дает отличный от нуля вклад, даже если поле находится в основном состоянии (отсутствует в обычном смысле). В таком случае оно описывает *спонтанное излучение*.

5.4. Электрическое дипольное излучение

В этом параграфе также для определенности будем рассматривать в качестве системы зарядов сложный атом, тогда состояние $|\Psi_e\rangle \equiv |\Psi_{\text{Ат}}\rangle$ и, соответственно, $\widehat{H}_e = \widehat{H}_{\text{Ат}}$.

Взаимодействие со свободным электромагнитным полем (5.24) зависит от времени и поэтому должно приводить к переходам между состояниями невозмущенной системы. Поскольку невозмущенная системы состоит из двух подсистем, *общий* энергетический спектр которой (5.21) непрерывен, можно говорить только о вероятности перехода в единицу времени в интервал конечных состояний с энергией E_f:

$$\mathrm{d}w = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f|\widehat{V}|i\rangle \right|^2 \delta(E_i^{(0)} - E_f^{(0)}) \mathrm{d}\nu_f, \tag{5.25}$$

где интервал конечных состояний определяется состояниями поля (5.2), причем две возможные поляризации относятся к разным состояниям.

Пусть атом находится в отличном от нуля электромагнитном поле, тогда возможны два процесса: возбуждение атома с поглощением фотонов и, если атом находился в возбужденном состоянии, переход в состояния с меньшей энергией с испусканием фотонов. В первом случае вероятность возбуждения в единицу времени определяется вторым слагаемым взаимодействия (5.24) и поэтому пропорциональна числу фотонов с данным волновым вектором n_f. Во втором случае вероятность перехода в единицу времени определяется вторым слагаемым взаимодействия и пропорционален $n_f + 1$. Таким образом, вероятность перехода с возбужденного уровня энергии атома на уровень с меньшей энергией *всегда* больше вероятности возбуждения с данного уровня на более высокий уровень. Различие не зависит от интенсивности электромагнитного поля и составляет вероятность *спонтанного излучения.* Именно спонтанное излучение определяет времена жизни возбужденных состояний свободных атомов и соответственно естественные ширины линий излучения. Рассмотрим сейчас только спонтанное излучение, поэтому будем считать, что в начальном состоянии электромагнитное поле отсутствует, а атом находится в некотором возбужденном состоянии. В конечном состоянии атом обладает меньшей энергией, но при этом возбужденное состояние электромагнитного поля описывается одним фотоном с соответствующими волновым вектором и поляризацией:

$$|i\rangle = |\psi_i\rangle|0\rangle, \quad |f\rangle = |\psi_f\rangle|1_{\mathbf{k},\alpha}\rangle. \tag{5.26}$$

Соответственно

$$E_i^{(0)} = E_i, \quad E_f^{(0)} = E_f + \hbar\omega_k, \tag{5.27}$$

где $E_{i,f}$ – энергия атома в начальном и конечном состояниях. Описанный процесс можно схематически представить в виде рис. 5.1

Матричный элемент в формуле (5.25) равен

$$\langle f|\widehat{V}|i\rangle = \frac{e}{mc}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}}\langle\psi_f|\sum_a \hat{\mathbf{p}}_a \mathbf{e}_\alpha^* \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{kr}}|\psi_i\rangle. \tag{5.28}$$

Подставим теперь матричный элемент (5.28) в формулу, определяющую вероятность перехода (5.25), и заметим, что объемы, входящие в определение числа состояний и в квадрат модуля матричного элемента перехода, сокращаются. Это означает, что результат

Рис. 5.1. Схематическое изображение переходов в системе "атом+поле" при котором происходит излучение одного фотона с частотой $\omega_{if} = (E^i\text{Ат} + E^f\text{Ат})/\hbar$. Показано, что суммарная энергия системы при этом сохраняется

не зависит от объема, выбранного для описания состояний квантованного электромагнитного поля:

$$\mathrm{d}w_{if} = \frac{c^2}{2\pi\omega_k}\left(\frac{e}{mc}\right)^2 \left|\langle\psi_f|\mathbf{e}_\alpha^* \sum_a \hat{\mathbf{p}}_a \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{kr}}|\psi_i\rangle\right|^2 \times$$
$$\times\,\delta(E_i - E_f - \hbar\omega_k)k^2\mathrm{d}k\mathrm{d}\Omega. \tag{5.29}$$

В дальнейших преобразованиях учтем малый параметр нашей задачи $ka_0 \sim \alpha \ll 1$ и положим $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{kr}_a} \approx 1$. Таким образом, полученный результат будет описывать только *электрическое дипольное* излучение. Для вычисления матричного элемента оператора импульса заметим, что $\hat{\mathbf{p}}_a = m\dot{\mathbf{r}}_a = m\mathrm{i}\hbar^{-1}[\widehat{H}, \mathbf{r}_a]$, поэтому

$$\langle\psi_f|\mathbf{e}_\alpha^* \sum_a \hat{\mathbf{p}}_a|\psi_i\rangle = \frac{\mathrm{i}m}{\hbar}\mathbf{e}_\alpha^* \sum_a \langle\psi_f|[\widehat{H}, \mathbf{r}_a]|\psi_i\rangle.$$

Оставшийся матричный элемент теперь легко преобразовать:

$$\langle\psi_f|[\widehat{H}, \mathbf{r}_a]|\psi_i\rangle = \langle\psi_f|\widehat{H}\mathbf{r}_a|\psi_i\rangle - \langle\psi_f|\mathbf{r}_a\widehat{H}|\psi_i\rangle =$$
$$= E_f\langle\psi_f|\mathbf{r}_a|\psi_i\rangle - \langle\psi_f|\mathbf{r}_a|\psi_i\rangle E_i = (E_f - E_i)\langle\psi_f|\mathbf{r}_a|\psi_i\rangle.$$

Занося заряд электрона под знак суммы и вводя оператор дипольного момента атома $\sum_a e\mathbf{r}_a = \mathbf{d}$, имеем

$$\mathrm{d}w_{if} = \frac{\omega_{if}^2}{2\pi\omega_k} \left|\langle\psi_f|(\mathbf{e}_\alpha^* \mathbf{d})|\psi_i\rangle\right|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega_k) k^2 \mathrm{d}k \mathrm{d}\Omega. \tag{5.30}$$

Учтем далее, что $k = \omega_k/c$, а также свойство δ-функции $\delta(\alpha x) = |\alpha|^{-1}\delta(x)$, и перейдем к интегрированию по частоте:

$$\mathrm{d}w_{if} = \frac{\omega_{if}^2}{2\pi\hbar c^3} \left|(\mathbf{e}_\alpha \mathbf{d})_{if})\right|^2 \delta(\omega_{if} - \omega_k)\omega_k \mathrm{d}\omega_k \mathrm{d}\Omega. \tag{5.31}$$

Мы здесь обозначили матричный элемент оператора дипольного момента $\mathbf{d}_{fi} = \langle\psi_f|\mathbf{d}|\psi_i\rangle$ и учли его эрмитовость: $\mathbf{d}_{fi} = \mathbf{d}_{if}^*$. Выполняя интегрирование по частоте, получаем *угловое распределение* вероятности излучения фотона в единицу времени в дипольном приближении:

$$\frac{\mathrm{d}w_{if}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\omega_{if}^3}{2\pi\hbar c^3} \left|(\mathbf{e}_\alpha \mathbf{d}_{if})\right|^2. \tag{5.32}$$

Две возможные поляризации фотона $\mathbf{e}_\alpha$ и волновой вектор $\mathbf{k}$ составляют ортогональный локальный репер и $(\mathbf{e}_\alpha \mathbf{k}) = 0$. Поэтому формулу (5.32) можно упростить, проведя суммирование по возможным поляризациям:

$$\frac{\mathrm{d}w_{if}}{\mathrm{d}\Omega} = \sum_\alpha \frac{\omega_{if}^3}{2\pi\hbar c^3} \left|(\mathbf{e}_\alpha \mathbf{d}_{if})\right|^2. \tag{5.32a}$$

Дальнейшие преобразования полезно представить в подробном виде. Разложим вектор дипольного момента по ортогональному реперу (рис. 5.2):

$$\mathbf{d} = \mathbf{e}_1(\mathbf{e}_1\mathbf{d}) + \mathbf{e}_2(\mathbf{e}_2\mathbf{d}) + \mathbf{n}(\mathbf{n}\mathbf{d}),$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$, и для его квадрата имеем

$$\mathbf{d}^2 = (\mathbf{e}_1\mathbf{d})^2 + (\mathbf{e}_2\mathbf{d})^2 + (\mathbf{n}\mathbf{d})^2.$$

Сумма квадратов скалярных произведений дипольного момента с возможными поляризациями равна

$$(\mathbf{e}_1\mathbf{d})^2 + (\mathbf{e}_2\mathbf{d})^2 = \mathbf{d}^2 - (\mathbf{n}\mathbf{d})^2 = [\mathbf{d} \times \mathbf{n}]^2. \tag{5.33}$$

Рис. 5.2. Разложение вектора дипольного момента по локальному реперу

Теперь для углового распределения вероятности излучения имеем формулу, аналогичную полученной в классической электродинамике для интенсивности излучения системы зарядов в дипольном приближении:

$$\frac{\mathrm{d}w_{if}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\omega_{if}^3}{2\pi\hbar c^3} \left|\mathbf{n} \times \mathbf{d}_{if}\right|^2. \tag{5.34}$$

Полная вероятность излучения в единицу времени легко получается интегрированием по всем углам и определяет *время жизни* τ атома в возбужденном состоянии:

$$w_{if} = \frac{4\omega_{if}^3}{3\hbar c^3} \left|\mathbf{d}_{if}\right|^2 = \frac{1}{\tau}. \tag{5.35}$$

Легко заметить, что полученный результат в два раза превышает классический. Действительно, для интенсивности излучения можно записать, используя выражение (5.35):

$$I = \hbar\omega_{if} w_{if} = \frac{4}{3}\frac{\omega_{if}^4}{c^3}\mathbf{d}_{if}^2 \to \frac{4}{3}\frac{\ddot{\mathbf{d}}^2}{c^3}.$$

Оценим время жизни атома в возбужденном состоянии:

$$w \sim \frac{m^3 e^{12}}{\hbar^9 c^3} \cdot e^2 a_0^2 \sim \frac{e^8 m e^2}{\hbar^6 c^3} = \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{m e^4}{\hbar^3} \sim \alpha^3 \omega_{\text{Ат}}.$$

Поскольку $\omega_{\text{Ат}} \sim 10^{15}\text{с}^{-1}$, получаем характерное время жизни атомов в возбужденных состояниях $\tau \sim 10^{-9}$с. Полученная оценка справедлива только в том случае, если матричный элемент оператора дипольного момента между двумя состояниями отличен от нуля. Естественно, матричный элемент отличен от нуля далеко не для всех состояний. Условия, при каких начальном и конечном состояниях $\mathbf{d}_{if} \neq 0$ называются *правилами отбора* для электрического дипольного излучения.