ЖЭТФ, 2010, том 138, вып. 6 (12), стр. 1011–1017

СИЛА, ДЕЙСТВУЮЩАЯ НА АТОМ И КЛАССИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

В. П. Макаров*, ***А. А. Рухадзе*****

Институт общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 марта 2010 г.

В рамках квантово-механической теории возмущений (возмущение — квазимонохроматическое электромагнитное поле) получена формула для усредненной по периоду поля силы, с которой поле действует на атом. Получено приближенное решение классического (ньютоновского) уравнения движения в таком же поле для гармонического изотропного осциллятора. Формулы для силы, действующей на частицу, в обеих задачах полностью совпадают, если их выразить через соответствующие поляризуемости (атома и осциллятора). Эти результаты согласуются с результатами, которые получаются в макроскопической электродинамике для разреженных сред.

1. АТОМ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ — ОСНОВНЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ

Мы исходим из гамильтониана Паули для атома, взаимодействующего с электромагнитным полем (см. [1, § 113] и [2, § 33]):

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_a \left(\hat{\mathbf{P}}_a + \frac{e}{c}\,\mathbf{A}_a\right)^2 + \\ + \frac{1}{2M_n}\left(\hat{\mathbf{P}}_n - \frac{Ze}{c}\,\mathbf{A}_n\right)^2 + \\ + 2\beta\sum_a \hat{\mathbf{s}}_a\cdot\mathbf{H}_a - \hat{\boldsymbol{\mu}}_n\cdot\mathbf{H}_n + U^{(0)}. \quad (1.1)$$

Здесь m и $(-e)$ — масса и заряд электрона, M_n — масса ядра;

$$\hat{\mathbf{P}}_a = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}_a}, \quad \hat{\mathbf{P}}_n = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}_n} \qquad (1.2)$$

— операторы обобщенных импульсов частиц, $\mathbf{R}_a$ ($a = 1, 2, \ldots, Z$) — координаты электронов, $\mathbf{R}_n$ — координаты ядра в лабораторной системе отсчета, $\mathbf{A}_a = \mathbf{A}(\mathbf{R}_a, t)$, $\mathbf{A}_n = \mathbf{A}(\mathbf{R}_n, t)$, $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ — векторный потенциал электромагнитного поля, скалярный потенциал поля полагаем равным нулю (см. [3, §§ 17, 18]), $\beta = e\hbar/2mc$ — магнетон Бора, $\hat{\mathbf{s}}_a$ — операторы спинов электронов, $\hat{\boldsymbol{\mu}}_n$ — оператор магнитного момента ядра, $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \operatorname{rot}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ — напряженность магнитного поля, $U^{(0)}$ — энергия кулоновского взаимодействия между всеми частицами (электронами и ядром). Гамильтониан Паули (1.1) записан с точностью до v/c, где v — скорость электронов.

Вместо координат $\mathbf{R}_a$ и $\mathbf{R}_n$ удобно ввести, как в работе [4], координаты электронов относительно ядра и координаты центра масс атома (см. [5, §§ 13, 40]):

$$\mathbf{r}_a = \mathbf{R}_a - \mathbf{R}_n, \\ \mathbf{R} = \frac{1}{M}\left(m\sum_a \mathbf{R}_a + M_n\mathbf{R}_n\right), \qquad (1.3) \\ M = Zm + M_n.$$

Отсюда и из (1.2) находим

$$\mathbf{R}_a = \mathbf{R} - \frac{m}{M}\,\mathbf{r}_e + \mathbf{r}_a, \quad \mathbf{R}_n = \mathbf{R} - \frac{m}{M}\,\mathbf{r}_e, \\ \mathbf{r}_e = \sum_a \mathbf{r}_a, \qquad (1.4)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_a = \hat{\mathbf{p}}_a + \frac{m}{M}\,\hat{\mathbf{P}}, \quad \hat{\mathbf{P}}_n = -\hat{\mathbf{p}}_e + \frac{M_n}{M}\,\hat{\mathbf{P}}, \qquad (1.5)$$

где

$$\hat{\mathbf{p}}_a = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_a}, \quad \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}}, \quad \hat{\mathbf{p}}_e = \sum_a \hat{\mathbf{p}}_e. \quad (1.6)$$

Подстановки (1.4) и (1.5) приводят гамильтониан (1.1) к следующему виду:

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\,\hat{\mathbf{P}}^2 + \hat{H}^{(0)} + \hat{U}, \qquad (1.7)$$

*E-mail: vpmac@ran.gpi.ru
**E-mail: rukh@fpl.gpi.ru

где

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{1}{2m}\sum_a \hat{\mathbf{p}}_a^2 + U^{(0)} + \frac{1}{2M_n}\hat{\mathbf{p}}_e^2 \qquad (1.8)$$

— гамильтониан свободного атома в системе отсчета, где его центр масс покоится, (см. [1, § 120]) и

$$\hat{U} = \frac{e}{2mc}\sum_a (\hat{\mathbf{p}}_a\cdot\mathbf{A}_a + \mathbf{A}_a\cdot\hat{\mathbf{p}}_a) + 2\beta\sum_a \hat{\mathbf{s}}_a\cdot\mathbf{H}_a + \\ + \frac{Ze}{2M_nc}(\hat{\mathbf{p}}_e\cdot\mathbf{A}_n + \mathbf{A}_n\cdot\hat{\mathbf{p}}_e) - \hat{\boldsymbol{\mu}}_n\cdot\mathbf{H}_n + \\ + \frac{e}{2Mc}\left(\hat{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{A}_{en} + \mathbf{A}_{en}\cdot\hat{\mathbf{P}}\right) + \\ + \frac{1}{2m}\left(\frac{e}{c}\right)^2\sum_a \mathbf{A}_a^2 + \frac{1}{2M_n}\left(\frac{Ze}{c}\right)^2\mathbf{A}_n^2 \qquad (1.9)$$

— энергия взаимодействия атома с полем; теперь (см. (1.4))

$$\mathbf{A}_a = \mathbf{A}\left(\mathbf{R} - \frac{m}{M}\mathbf{r}_e + \mathbf{r}_a, t\right), \\ \mathbf{A}_n = \mathbf{A}\left(\mathbf{R} - \frac{m}{M}\mathbf{r}_e, t\right), \qquad (1.10) \\ \mathbf{A}_{en} = \sum_a \mathbf{A}_a - Z\mathbf{A}_n.$$

Далее мы пренебрегаем членами порядка (m/M). Тогда (см. (1.8) и (1.9))

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{1}{2m}\sum_a \hat{\mathbf{p}}_a^2 + U^{(0)}, \qquad (1.11)$$

$$\hat{U} = \frac{e}{2mc}\sum_a (\hat{\mathbf{p}}_a\cdot\mathbf{A}_a + \mathbf{A}_a\cdot\hat{\mathbf{p}}_a) + \\ + 2\beta\sum_a \hat{\mathbf{s}}_a\cdot\mathbf{H}_a + \frac{1}{2m}\left(\frac{e}{c}\right)^2\sum_a \mathbf{A}_a^2, \qquad (1.12)$$

где теперь $\mathbf{A}_a = \mathbf{A}(\mathbf{R}+\mathbf{r}_a, t)$.

Мы будем полагать, что поле слабое по сравнению с атомным полем, так что энергию взаимодействия атома с полем (1.12) можно рассматривать как возмущение по сравнению с гамильтонианом (1.11). Мы полагаем, что расстояние λ, на котором поле заметно изменяется (длина волны), существенно больше «размера» атома $\sim a_B = \hbar^2/me^2$. Тогда $\mathbf{A}_a$ и $\mathbf{H}_a$ в (1.12) можно разложить по степеням $\mathbf{r}_a$ (точнее, соответствующие матричные элементы разложить по степеням малого параметра a_B/λ). Далее, где это возможно, мы будем полностью пренебрегать изменением поля на атомных расстояниях (это соответствует, очевидно, дипольному приближению). При этом выражение (1.12) еще более упрощается:

$$\hat{U} = \frac{e}{mc}\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}_e + \frac{Ze^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2, \qquad (1.13)$$

где теперь $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{R}, t)$.

Для простоты дальнейших вычислений будем полагать, что в отсутствие поля атом находится в (основном) состоянии с полным моментом $J = 0$. Полагаем, что тогда движение атома как целого определяется силой $\mathbf{F}(\mathbf{R}, t)$, которая получается усреднением по электронному движению соответствующего оператора $\hat{\mathbf{F}}$. Сила, действующая на частицу, — производная по времени от ее импульса (а не обобщенного импульса, см. [3, § 17]). Поэтому оператор силы, с которой поле действует на атом, при учете (1.5) и (1.10), записывается в виде

$$\hat{\mathbf{F}} = \frac{d}{dt}\left[\sum_a\left(\hat{\mathbf{P}}_a + \frac{e}{c}\mathbf{A}_a\right) + \left(\hat{\mathbf{P}}_n - \frac{Ze}{c}\mathbf{A}_n\right)\right] = \\ = \frac{d}{dt}\left(\hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}_{en}\right) = \\ = -e\mathbf{E}_{en} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}_{en}\right], \qquad (1.14)$$

где

$$\mathbf{E}_{en} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}_{en}}{\partial t}, \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

— напряженность электрического поля; в последнем равенстве в (1.14) мы использовали известную формулу для производной от оператора (см. [1, § 9]). Если в (1.14) подставить гамильтониан в виде (1.7), (1.11) и (1.13) и пренебречь малыми по параметру a_B/λ величинами, получим следующее выражение для оператора силы:

$$\hat{\mathbf{F}} = (\mathbf{d}\cdot\nabla)\mathbf{E} + \frac{e}{mc}\mathbf{H}\times\hat{\mathbf{p}}_e - \frac{Z}{m}\left(\frac{e}{c}\right)^2\mathbf{A}\times\mathbf{H}, \quad (1.15)$$

где

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{R}, t), \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{R}, t), \quad \mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{R}, t),$$

а $\mathbf{d} = -e\mathbf{r}_e$ — дипольный момент атома. Соответствующее выражение для силы записывается в виде

$$\mathbf{F}(\mathbf{R}, t) = (\mathbf{d}_0(\mathbf{R}, t)\cdot\nabla)\,\mathbf{E} + \\ + \frac{e}{mc}\mathbf{H}\times\mathbf{p}_0(\mathbf{R}, t) - \frac{Z}{m}\left(\frac{e}{c}\right)^2\mathbf{A}\times\mathbf{H}, \qquad (1.16)$$

где $\mathbf{d}_0$ и $\mathbf{p}_0$ — дипольный момент и импульс электронов, усредненные по основному состоянию атома в присутствии поля:

$$\mathbf{d}_0(\mathbf{R}, t) = \int d\{\xi\}\Psi_0^*(\{\xi\}, t; \mathbf{R})\times \\ \times\mathbf{d}\Psi_0(\{\xi\}, t; \mathbf{R}), \qquad (1.17)$$

$$\mathbf{p}_0(\mathbf{R}, t) = \int d\{\xi\}\Psi_0^*(\{\xi\}, t; \mathbf{R})\times \\ \times\hat{\mathbf{p}}_e\Psi_0(\{\xi\}, t; \mathbf{R}), \qquad (1.18)$$

Ψ_0 — электронная волновая функция основного состояния атома в поле, параметрически зависящая от координат центра масс атома $\mathbf{R}$; через $\xi_a = \{\mathbf{r}_a, \sigma_a\}$ мы обозначаем совокупность координат и спиновой переменной $\sigma_a = \pm 1/2$ электрона, а $\{\xi\}$ — совокупность переменных ξ_a всех электронов,

$$d\{\xi\} = \prod_a d\xi_a,$$

$$\int f(\xi_a)\, d\xi_a = \sum_{\sigma_a = \pm 1/2} \int f(x_a, y_a, z_a, \sigma_a)\, dx_a dy_a dz_a$$

(см. [1, § 61]).

Мы будем рассматривать поля вида

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \operatorname{Re} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, t) \exp(-i\omega t), \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \operatorname{Re} \mathbf{H}_0(\mathbf{r}, t) \exp(-i\omega t), \end{aligned} \tag{1.19}$$

где «амплитуды» $\mathbf{E}_0$ и $\mathbf{H}_0$ — медленные (по сравнению с $\exp(-i\omega t)$) функции времени. Будем также полагать, что частота поля достаточно далека от частот атомных переходов ω_{n0}. Поэтому, если τ_0 — время, характеризующее функции $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{H}_0(\mathbf{r}, t)$, то параметры

$$\frac{1}{\omega \tau_0}, \quad \frac{1}{|\omega - \omega_{n0}| \tau_0} \ll 1. \tag{1.20}$$

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА И ЭЛЕКТРОННОГО ИМПУЛЬСА

Средние значения дипольного момента (1.17) и электронного импульса (1.18) отличны от нуля только при учете энергии взаимодействия $\hat{U}$ (1.13). Поправка первого приближения к волновой функции основного состояния атома записывается в виде (см. [1, §§ 40, 42])

$$\delta\Psi_0 = -\frac{ie}{\hbar m c} \sum_n \Psi_n^{(0)}(\{\xi\}, t)\, (\mathbf{p}_e)_{n0} \times \\ \times \int_{-\infty}^{t} dt' \mathbf{A}(\mathbf{R}, t') \exp(i\omega_{n0} t'), \tag{2.1}$$

где

$$\Psi_n^{(0)}(\{\xi\}, t) = \exp\left(-\frac{iE_n^{(0)} t}{\hbar}\right) \psi_n^{(0)}(\{\xi\}), \tag{2.2}$$

$$\omega_{nn'} = \frac{1}{\hbar}\left[E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}\right], \tag{2.3}$$

$\psi_n^{(0)}(\{\xi\})$ — ортонормированные волновые функции стационарных состояний атома в отсутствие поля, а $E_n^{(0)}$ — соответствующие энергии — решения уравнения Шредингера

$$\hat{H}^{(0)} \psi_n^{(0)}(\{\xi\}) = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}(\{\xi\}) \tag{2.4}$$

с гамильтонианом (1.11).

Учитывая, что (см. [1, § 7])

$$\langle n | \hat{\mathbf{p}}_e | n' \rangle = i\omega_{nn'} m \langle n | \mathbf{r}_e | n' \rangle, \tag{2.5}$$

и интегрируя по частям, можно записать равенство (2.1) в следующем виде:

$$\delta\Psi_0 = \delta\Psi_{0E} + \delta\Psi_{0A}, \tag{2.6}$$

$$\delta\Psi_{0E}(\{\xi\}) = \frac{i}{\hbar} \sum_n \Psi_n^{(0)}(\{\xi\}, t)\, \mathbf{d}_{n0} \times \\ \times \int_{-\infty}^{t} \exp(i\omega_{n0} t') \mathbf{E}(\mathbf{R}, t')\, dt', \tag{2.7}$$

$$\delta\Psi_{0A}(\{\xi\}, t; \mathbf{R}) = \frac{i}{\hbar c} \exp\left(-\frac{iE_0^{(0)} t}{\hbar}\right) \mathbf{A}(\mathbf{R}, t) \times \\ \times \sum_n \mathbf{d}_{n0} \psi_n^{(0)}(\{\xi\}). \tag{2.8}$$

Фурье-образ функции $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, t)$ содержит только малые (по сравнению с ω) частоты. Поэтому, ограничиваясь слагаемыми первого порядка по малым параметрам (1.20), находим

$$\delta\Psi_{0E} = \delta\Psi_{0E}^{(0)} + \delta\Psi_{0E}^{(1)}, \tag{2.9}$$

$$\delta\Psi_{0E}^{(0)} = \frac{1}{2\hbar} \exp\left(-\frac{iE_0^{(0)} t}{\hbar}\right) \sum_n \psi_n^{(0)} \mathbf{d}_{n0} \times \\ \times \left[\frac{\mathbf{E}_0(\mathbf{R}, t) \exp(-i\omega t)}{\omega_{n0} - \omega} + \frac{\mathbf{E}_0^*(\mathbf{R}, t) \exp(i\omega t)}{\omega_{n0} + \omega}\right], \tag{2.10}$$

$$\delta\Psi_{0E}^{(1)} = \frac{1}{2\hbar} \exp\left(-\frac{iE_0^{(0)} t}{\hbar}\right) \sum_n \psi_n^{(0)} \mathbf{d}_{n0} \times \\ \times \left[\frac{(\partial \mathbf{E}_0 / \partial t) \exp(-i\omega t)}{(\omega_{n0} - \omega)^2} + \right. \\ \left. + \frac{(\partial \mathbf{E}_0^* / \partial t) \exp(i\omega t)}{(\omega_{n0} + \omega)^2}\right]. \tag{2.11}$$

После подстановки (2.6)–(2.11) в (1.17) и (1.18) $\mathbf{d}_0(\mathbf{R}, t)$ и $\mathbf{p}_0(\mathbf{R}, t)$ оказываются выраженными через тензор поляризуемости атома в основном состоянии $\alpha_{0ij}(\omega)$. Для невырожденного состояния тензор поляризуемости — вещественный и симметричный (см. [2, § 59]) и сводится к скаляру, так что

$$\alpha_{0ij}(\omega) = -\frac{2}{\hbar}\sum_n \frac{\omega_{n0}(d_i)_{0n}(d_j)_{n0}}{\omega^2-\omega_{n0}^2} = \alpha_0(\omega)\delta_{ij}. \quad (2.12)$$

Простые, но весьма громоздкие вычисления приводят к следующим выражениям:

$$\mathbf{d}_0(\mathbf{R},t) = \alpha_0(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{R},t) - \frac{d\alpha_0}{d\omega}\times \\ \times \operatorname{Im}\frac{\partial \mathbf{E}_0(\mathbf{R},t)}{\partial t}\exp(-i\omega t), \quad (2.13)$$

$$\mathbf{p}_0(\mathbf{R},t) = -\frac{Ze}{c}\mathbf{A} - \frac{m\omega}{e}\alpha_0 \operatorname{Im}\mathbf{E}_0\exp(-i\omega t) - \\ -\frac{m}{e}\frac{d\omega\,\alpha_0}{d\omega}\operatorname{Re}\frac{\partial \mathbf{E}_0}{\partial t}\exp(-i\omega t). \quad (2.14)$$

3. СИЛА, ДЕЙСТВУЮЩАЯ НА АТОМ

Подставляем выражения (2.13) и (2.14) в (1.16) и используем равенство

$$(\mathbf{E}\cdot\nabla)\mathbf{E} = \frac{1}{2}\nabla E^2 + \frac{1}{c}\mathbf{E}\times\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (3.1)$$

которое прямо следует из уравнения Максвелла

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}.$$

В результате получим

$$\mathbf{F}(\mathbf{R},t) = \frac{1}{2}\alpha_0\nabla E^2 + \\ + \frac{\alpha_0}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\times\mathbf{H} + \frac{d\alpha_0}{d\omega}\operatorname{Re}\exp(-i\omega t)\times \\ \times\left[\frac{\omega}{c}\frac{\partial \mathbf{E}_0}{\partial t}\times\mathbf{H} + i\left(\frac{\partial \mathbf{E}_0}{\partial t}\cdot\nabla\right)\mathbf{E}\right]. \quad (3.2)$$

Правая часть (3.2) содержит быстро (с частотой 2ω) осциллирующие слагаемые и медленно изменяющуюся со временем функцию, которая и представляет интерес. Усредняя равенство (3.2) по периоду $2\pi/\omega$, находим окончательное выражение для силы, действующей на атом:

$$\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{R},t) = \frac{1}{4}\alpha_0(\omega)\nabla|\mathbf{E}_0|^2 + \\ + \frac{\alpha_0}{2c}\frac{\partial}{\partial t}\operatorname{Re}\mathbf{E}_0^*\times\mathbf{H}_0 + \frac{1}{2}\frac{d\alpha_0}{d\omega}\times \\ \times\left[\frac{\omega}{c}\operatorname{Re}\frac{\partial \mathbf{E}_0^*}{\partial t}\times\mathbf{H}_0 + \operatorname{Im}\left(\frac{\partial \mathbf{E}_0^*}{\partial t}\cdot\nabla\right)\mathbf{E}_0\right], \quad (3.3)$$

где, напомним, $\mathbf{E}_0 = \mathbf{E}_0(\mathbf{R},t)$ и $\mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_0(\mathbf{R},t)$.

Если поле представляет собой почти монохроматическую плоскую волну с частотой ω и волновым вектором $\mathbf{k}$, то (см. (1.19))

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}_{00}(\mathbf{r},t)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}), \\ \mathbf{H}_0(\mathbf{r},t) = \mathbf{H}_{00}(\mathbf{r},t)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}), \quad (3.4)$$

где амплитуды $\mathbf{E}_{00}$ и $\mathbf{H}_{00}$ — медленные (по сравнению с $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$) функции координат: если l_0 — расстояние, характеризующее эти функции, то параметр

$$\frac{1}{kl_0} \ll 1. \quad (3.5)$$

Из уравнений Максвелла при учете (1.19) и (3.4) получаются уравнения для амплитуд

$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{E}_{00} - i\operatorname{div}\mathbf{E}_{00} = 0, \\ \mathbf{k}\times\mathbf{E}_{00} - i\operatorname{rot}\mathbf{E}_{00} = \frac{\omega}{c}\mathbf{H}_{00} + \frac{i}{c}\frac{\partial \mathbf{H}_{00}}{\partial t}, \\ \mathbf{k}\cdot\mathbf{H}_{00} - i\operatorname{div}\mathbf{H}_{00} = 0, \\ \mathbf{k}\times\mathbf{H}_{00} - i\operatorname{rot}\mathbf{H}_{00} = -\frac{\omega}{c}\mathbf{E}_{00} - \frac{i}{c}\frac{\partial \mathbf{E}_{00}}{\partial t}. \quad (3.6)$$

Используя (3.6) и пренебрегая малыми по параметру (3.5) величинами, из (3.3) получаем следующее выражение для силы, с которой электромагнитная волна действует на атом:

$$\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{R},t) = \frac{1}{4}\alpha_0(\omega)\nabla|\mathbf{E}_{00}|^2 + \\ + \frac{1}{4\omega^2}\frac{\partial\omega^2\alpha_0(\omega)}{\partial\omega}\frac{\partial|\mathbf{E}_{00}|^2}{\partial t}\mathbf{k}. \quad (3.7)$$

Отношение второго слагаемого в (3.7) к первому, в общем случае, по порядку величины равно $kl_0/(\omega\tau_0)$, т. е. определяется отношением двух малых параметров (1.20) и (3.5) и не обязательно мало.

Представляет интерес случай, когда частота ω близка к частоте ω_{n0} некоторого атомного перехода, так что

$$|\Omega| \ll \omega_{n0}, \quad \Omega = \omega - \omega_{n0}, \quad (3.8)$$

но при этом условия (1.20) продолжают выполняться. Тогда

$$\alpha_0(\omega) = -\frac{|(d_z)_{0n}|^2}{\hbar\Omega} \quad (3.9)$$

и, пренебрегая в (3.7) малыми величинами, получаем

$$\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{R},t) = -\frac{|(d_z)_{0n}|^2}{4\hbar\Omega}\nabla|\mathbf{E}_{00}|^2 + \\ + \frac{|(d_z)_{0n}|^2}{4\hbar\Omega}\mathbf{k}\frac{1}{\Omega}\frac{\partial|\mathbf{E}_{00}|^2}{\partial t}. \quad (3.10)$$

Отношение второго слагаемого к первому в (3.10) существенно возрастает по сравнению с общим случаем: теперь оно

$$\sim \frac{kl_0}{\omega\tau_0}\,\frac{\omega_{n0}}{\Omega}.$$

Формулу (3.10) следует сравнить с соответствующей формулой из работы [6, § 4]. Согласно [6], полная сила так же представляется в виде суммы так называемой градиентной силы, которая совпадает с первым слагаемым в правой части (3.10), и силы, которую авторы работы [6] называют силой светового давления. Она получается из второго слагаемого в (3.10), если в нем $\partial|\mathbf{E}_{00}|^2/\partial t$ заменить на $2\gamma|\mathbf{E}_{00}|^2$, где $\hbar\gamma$ — естественная ширина n-го возбужденного уровня. Ясно, что при достаточно коротком лазерном импульсе (в данном случае при $\tau_0 \le 1/\gamma$) становится важной не только его пространственная, но и временная форма. Заметим, что сила, связанная с временной формой импульса, направлена по или против волнового вектора.

Представляет интерес также случай большой частоты: для всех существенных в поляризуемости (2.12) состояний $\omega \gg \omega_{n0}$. Тогда (см. [2, § 59])

$$\alpha_0(\omega) = -\frac{Ze^2}{m\omega^2}\,. \qquad (3.11)$$

При этом сила (3.3) пропорциональна числу электронов Z и в расчете на один электрон сила

$$\mathbf{F} = -\frac{e^2}{4m\omega^2}\,\nabla|\mathbf{E}_0|^2 + \frac{e^2}{2mc\omega^2}\times \times \operatorname{Re}\left(\frac{\partial\mathbf{E}_0^*}{\partial t}\times\mathbf{H}_0 - \mathbf{E}_0^*\times\frac{\partial\mathbf{H}_0}{\partial t}\right) + + \frac{e^2}{m\omega^3}\operatorname{Im}\left(\frac{\partial\mathbf{E}_0}{\partial t}\cdot\nabla\right)\mathbf{E}_0. \qquad (3.12)$$

Поскольку в формулу (3.12) постоянная Планка не входит, она может быть получена в рамках чисто классической (не квантовой) физики — нужно решить задачу о движении заряженной частицы в электромагнитном поле (1.19). В следующем разделе мы рассмотрим, однако, более общую задачу в рамках классической физики — о движении в таком поле гармонического изотропного осциллятора. Заметим, что в случае почти монохроматической плоской волны (3.4) выражение (3.12) упрощается:

$$\mathbf{F} = -\frac{e^2}{4m\omega^2}\nabla|\mathbf{E}_{00}|^2, \qquad (3.13)$$

т. е. сила оказывается равной так называемой силе Миллера [7].

4. ИЗОТРОПНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

Пусть в отсутствие внешнего поля частица с массой m и зарядом q может совершать гармонические колебания с изотропной частотой ω_0. В электромагнитном поле движение частицы с точностью порядка v/c (где v — скорость частицы), описывается уравнением (см. [3, § 17])

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} + \omega_0^2\mathbf{r} = \frac{q}{m}\left[\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{H}(\mathbf{r},t)\right]. \qquad (4.1)$$

Движение частицы, индуцируемое полем (1.19), будет представлять собой (см. [5, § 30]) перемещение вдоль некоторой плавной траектории $\mathbf{R}(t)$ с одновременными осцилляциями $\boldsymbol{\rho}(t)$ около нее:

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{R}(t) + \boldsymbol{\rho}(t). \qquad (4.2)$$

Осцилляции $\boldsymbol{\rho}(t)$ мы будем считать малыми по сравнению с расстоянием, на котором поле заметно изменяется. Поэтому, пренебрегая малыми величинами, имеем

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(\mathbf{R},t) + (\boldsymbol{\rho}\cdot\nabla)\mathbf{E}(\mathbf{R},t) \qquad (4.3)$$

и аналогичное равенство для $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$.

Уравнение (4.1) после подстановки в него (4.2) и (4.3) при пренебрежении в нем величинами порядка $\dot{R}/c$ (см. [5, § 30]) приводится к виду

$$\ddot{\mathbf{R}} + \ddot{\boldsymbol{\rho}} + \omega_0^2(\mathbf{R}+\boldsymbol{\rho}) = \frac{q}{m}\times \times\left[\mathbf{E}(\mathbf{R},t) + (\boldsymbol{\rho}\cdot\nabla)E(\mathbf{R},t) + \frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{\rho}}\times\mathbf{H}(\mathbf{R},t)\right]. \qquad (4.4)$$

Выделяя здесь осциллирующие с частотой ω слагаемые, получаем уравнение

$$\ddot{\boldsymbol{\rho}} + \omega_0^2\boldsymbol{\rho} = \frac{q}{m}\mathbf{E}(\mathbf{R},t), \qquad (4.5)$$

где поле $\mathbf{E}$ имеет вид (1.19). Полагаем, что расстройка $\Omega = \omega - \omega_0$ не очень мала:

$$\frac{1}{|\Omega|\tau_0} \ll 1$$

(см. (1.20)). Тогда с точностью

$$\sim \frac{1}{\omega\tau_0} \sim \frac{1}{|\Omega|\tau_0}$$

решение уравнения (4.5) имеет вид

$$\boldsymbol{\rho}(t) = -\frac{q}{m(\omega^2-\omega_0^2)}\operatorname{Re}\exp(-i\omega t)\times \times\left[\mathbf{E}_0(\mathbf{R},t) - \frac{2i\omega}{\omega^2-\omega_0^2}\,\frac{\partial\mathbf{E}_0}{\partial t}\right]. \qquad (4.6)$$

Уравнение для $\mathbf{R}(t)$ получается из (4.4) и (4.5):

$$m(\ddot{\mathbf{R}}+\omega_0^2\mathbf{R}) = q\left[(\boldsymbol{\rho}\cdot\nabla)\mathbf{E}+\frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{\rho}}\times\mathbf{H}(\mathbf{R},t)\right]. \quad (4.7)$$

Правая часть уравнения (4.7) содержит осциллирующие с частотой 2ω слагаемые и медленную (по сравнению с $\exp(-i\omega t)$) часть. Искомую среднюю силу, действующую на осциллятор, мы получим, усреднив уравнение (4.7) по периоду $2\pi/\omega$; учитывая (1.19), получим

$$\overline{\mathbf{F}} = \operatorname{Re}\left[\left(\overline{\exp(-i\omega t)\boldsymbol{\rho}}\cdot\nabla\right)\mathbf{E}_0 + \right. \\ \left. + \frac{1}{c}\overline{\exp(-i\omega t)\dot{\boldsymbol{\rho}}}\times\mathbf{H}_0\right]. \quad (4.8)$$

Используя (4.6) и получающееся из него выражение для $\dot{\boldsymbol{\rho}}$, находим

$$\overline{\exp(-i\omega t)\boldsymbol{\rho}} = \\ = -\frac{q}{2m(\omega^2-\omega_0^2)}\left(\mathbf{E}_0^* + \frac{2i\omega}{\omega^2-\omega_0^2}\frac{\partial\mathbf{E}_0^*}{\partial t}\right), \quad (4.9)$$

$$\overline{\exp(-i\omega t)\dot{\boldsymbol{\rho}}} = \\ = \frac{q}{2m(\omega^2-\omega_0^2)}\left(-i\omega\mathbf{E}_0^* + \frac{\omega^2+\omega_0^2}{\omega^2-\omega_0^2}\frac{\partial\mathbf{E}_0^*}{\partial t}\right). \quad (4.10)$$

Формулы (4.8)–(4.10) определяют силу $\overline{\mathbf{F}}$. Видно, что она выражается через поляризуемость осциллятора $\alpha(\omega)$, связывающую дипольный момент осциллятора $\mathbf{d} = q\mathbf{r}$ с монохроматическим полем (см. [2, § 59]). Как следует из (4.6) и (1.19), при $|\mathbf{E}_0| = \text{const}$ имеем

$$\alpha(\omega) = -\frac{q^2}{m(\omega^2-\omega_0^2)}. \quad (4.11)$$

Из (4.8)–(4.11) находим

$$\overline{\mathbf{F}} = \frac{1}{2}\alpha(\omega)\operatorname{Re}(\mathbf{E}_0^*\cdot\nabla)\mathbf{E}_0 - \frac{\omega}{2c}\alpha(\omega)\operatorname{Im}\mathbf{E}_0^*\times\mathbf{H}_0 + \\ + \frac{1}{2}\frac{d\alpha}{d\omega}\left[\operatorname{Im}\left(\frac{\partial\mathbf{E}_0^*}{\partial t}\cdot\nabla\right)\mathbf{E}_0 + \right. \\ \left. + \frac{\omega^2+\omega_0^2}{2c\omega}\operatorname{Re}\left(\frac{\partial\mathbf{E}_0^*}{\partial t}\times\mathbf{H}_0\right)\right]. \quad (4.12)$$

Это выражение можно заметно упростить, если использовать уравнение (3.1), подставив в него поле вида (1.19). В результате получаем окончательное выражение для силы в виде

$$\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{R},t) = \frac{1}{4}\alpha(\omega)\nabla|\mathbf{E}_0|^2 + \frac{\alpha(\omega)}{2c}\frac{\partial}{\partial t}\operatorname{Re}\mathbf{E}_0^*\times\mathbf{H}_0 + \\ + \frac{1}{2}\frac{d\alpha}{d\omega}\left[\frac{\omega}{c}\operatorname{Re}\left(\frac{\partial\mathbf{E}_0^*}{\partial t}\times\mathbf{H}_0\right) + \right. \\ \left. + \operatorname{Im}\left(\frac{\partial\mathbf{E}_0^*}{\partial t}\cdot\nabla\right)\mathbf{E}_0\right]. \quad (4.13)$$

Заметим, что это выражение по форме полностью совпадает с выражением (3.3), полученным при квантово-механическом расчете силы, действующей на атом.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы получили выражение (3.3) для силы, с которой электромагнитное поле вида (1.19) действует на атом. Если поле представляет собой почти монохроматическую плоскую волну (1.19), (3.4), то выражение для силы имеет вид (3.7). Наряду с известной так называемой градиентной силой, которая определяется пространственной формой лазерного импульса, существует еще сила, которая определяется временной формой импульса и направлена либо вдоль, либо против волнового вектора волны. При достаточно коротком во времени импульсе эту силу необходимо учитывать.

Решена также задача классической механики о движении гармонического изотропного осциллятора в электромагнитном поле. Оказалось, что усредненная по периоду поля сила (4.13), действующая на осциллятор, если она выражена через поляризуемость, полностью совпадает с силой, действующей на атом. Поэтому можно полагать, что выражением (4.13) определяется усредненная по периоду сила, действующая в электромагнитном поле (1.19) на любую нерелятивистскую частицу (без собственного магнитного момента), если только ее размер существенно меньше расстояния, на котором заметно изменяется поле (длина волны).

Диэлектрическая проницаемость разреженного газа таких частиц (см. [8, §§ 11, 15])

$$\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi n\alpha(\omega), \quad (5.1)$$

где n — число частиц в единице объема. Тогда из (4.13) и (5.1) получаем следующее выражение для силы, действующей на единицу объема газа:

$$\mathbf{f} = n\overline{\mathbf{F}} = \mathbf{f}^{(H)} + \mathbf{f}^{(A)} + \mathbf{f}^{(d)}, \quad (5.2)$$

где

$$\mathbf{f}^{(H)} = \frac{\varepsilon(\omega)-1}{16\pi}\,\nabla|\mathbf{E}_0|^2, \tag{5.3}$$

$$\mathbf{f}^{(A)} = \frac{\varepsilon(\omega)-1}{8\pi c}\,\frac{\partial}{\partial t}\,\mathrm{Re}\,\mathbf{E}_0^*\times\mathbf{H}_0, \tag{5.4}$$

$$\mathbf{f}^{(d)} = \frac{1}{8\pi}\,\frac{\partial\varepsilon}{\partial\omega}\times \\ \times\left[\frac{\omega}{c}\,\mathrm{Re}\left(\frac{\partial\mathbf{E}_0^*}{\partial t}\times\mathbf{H}_0\right)+\mathrm{Im}\left(\frac{\partial\mathbf{E}_0^*}{\partial t}\cdot\nabla\right)\mathbf{E}_0\right]. \tag{5.5}$$

Формулы (5.2)–(5.5) содержат единственную величину, характеризующую вещество — диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\omega)$, и поэтому они должны получаться и в рамках макроскопической электродинамики с $\varepsilon(\omega)$ вида (5.1). Действительно, $\mathbf{f}^{(H)}$ вида (5.3) — это сила Гельмгольца (см. [8, §§ 15, 75]), $\mathbf{f}^{(A)}$ вида (5.4) — это сила Абрагама (см. [8, §§ 75, 81]). Что же касается силы $\mathbf{f}^{(d)}$, обязанной учету дисперсии диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega)$, то этот вопрос в макроскопической электродинамике окончательно решенным считать нельзя. Сила (5.5) отличается от соответствующего выражения, полученного в работе [9] (см. также [8, § 81]), но совпадает с тем, которое получено в работе [10]: в работе [9] отсутствует второе слагаемое в квадратных скобках в правой части (5.5). Поэтому следует согласиться с авторами работы [10] в том, что формула для силы, связанной с дисперсией $\varepsilon(\omega)$, приведенная в [9] (и в [8, § 81]), содержит ошибку. Можно также утверждать, что соответствующая формула, приведенная в работе [10] — правильная (по крайней мере, если вещество — достаточно разреженный газ с $\varepsilon(\omega)$ вида (5.1)). Заметим, наконец, что в случае почти монохроматической плоской волны (3.4) с частотой ω, настолько большой, что (см. [8, § 78])

$$\varepsilon(\omega) = 1-\frac{4\pi n_e e^2}{m\omega^2}, \tag{5.6}$$

где n_e — число электронов в единице объема, полная сила (5.2) сводится к силе Гельмгольца $\mathbf{f}^{(H)}$ вида (5.3):

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}^{(H)} = -\frac{n_e e^2}{4m\omega^2}\,\nabla|\mathbf{E}_{00}|^2. \tag{5.7}$$

В расчете на одну частицу — это сила (3.13).

Показано, таким образом, что результаты микроскопических подходов (квантово-механического для атома и классического ньютоновского для осциллятора), как и должно быть, полностью согласуются с результатами, которые получаются в макроскопической электродинамике для разреженных сред.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974).
2. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1980).
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, Москва (1973).
4. В. П. Макаров, А. А. Рухадзе, ЖЭТФ **125**, 345 (2004).
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, Наука, Москва (1973).
6. В. Г. Миногин, В. С. Летохов, *Давление лазерного излучения на атомы*, Наука, Москва (1986).
7. А. В. Гапонов, М. А. Миллер, ЖЭТФ **34**, 242 (1958).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).
9. Х. Вашими, В. И. Карпман, ЖЭТФ **71**, 1010 (1976).
10. Ю. С. Бараш, В. И. Карпман, ЖЭТФ **85**, 1962 (1983).