

LATVIJAS UNIVERSITĀTE
FIZIKAS UN MATEMĀTIKAS FAKULTĀTE
FIZIKAS NODAĻA

**AR LĀZERU LAUKU IETĒRPTO STĀVOKĻU
SUPERSĪKSTUKTŪRA:
TEORĒTISKAIS APRAKSTS UN EKSPERIMENTĀLĀS
IZPĒTES IESPĒJAS SĀRMU METĀLU ATOMU KŪĻOS**

MAĢISTRA DARBS

Autors: Artūrs Ciniņš

Stud apl. ac06014

Darba vadītājs: Dr. Phys. Vjačeslavs Kaščejevs

Rīga 2011

ANOTĀCIJA

Autlera - Taunsa efekts kopš tā atklāšanas 1955. gadā ir guvis plašu pielietojumu spektroskopijā un citās fizikas nozarēs. Ar šī efekta palīdzību ir iespējams izmērīt kvantu mehānisku objektu, piemēram atomu, spontānās emisijas raksturlielumus kā arī panākt efektīvu kvantu stāvokļu apdzīvotību kontroli.

Supersikstruktūras mijiedarbības dēļ atomu sikstruktūras līmeņi sašķēļas vairākās komponentēs. Šo efektu var izmantot dažādu atoma kodola īpašību noteikšanā, tomēr Autlera - Taunsa efekta kontekstā supersikstruktūras mijiedarbība ir kaitējošs faktors. Veicot atomu enerģijas līmeņu viļņu funkciju interferences eksperimentus,niecīga supersikstruktūras sašķēļšanās noved pie neprognozējama interferences rezultāta.

Līdz šim pasaules zinātniskajā literatūrā nebija atrodams ar spēcīgu ārējo lauku ietērptu kvantu sistēmas stāvokļu supersikstruktūras veidošanās teorētisks apskats. Ietērpto stāvokļu supersikstruktūras sašķēļšanās aprēķināšanai līdz šim tikušas piedāvātas vienīgi skaitliskas simulācijas. Šajā darbā tiek piedāvāta metode, ar kuras palīdzību iespējams analītiski aprēķināt ietērpto stāvokļu supersikstruktūras komponentu enerģijas gadījumā, kad uz atomu iedarbojas spēcīgs elektromagnētiskais starojums, un supersikstruktūras mijiedarbības enerģija ir maza salīdzinājumā ar atoma un starojuma mijiedarbības enerģiju.

Atslēgas vārdi: Supersikstruktūras mijiedarbība, elektromagnētiskā viļņa polarizācija, AC Štarka efekts, Autlera - Taunsa efekts, ietērptie stāvokļi, ietērpto stāvokļu supersikstruktūra.

ABSTRACT

The Autler - Townes effect has been used for variety of applications of spectroscopy. Such applications include measurements of lifetimes and branching ratios of excited states in atoms and molecules, effective population control of atomic states etc.

Observation of hyperfine interactions on the other hand is an effective tool for measuring properties of atomic nucleus. The hyperfine splitting of atomic fine structure levels is however a disturbing factor in measurements employing Autler - Townes effect. If, for example, an experiment which involves atomic level wave function interference is done in a system with small hyperfine splittings, the different pathway lengths of the atomic levels may be reason for unpredictable results of the experiment.

Until this work was written down there was no evidence of anyone trying to describe formation of hyperfine sublevels of laser-field dressed atomic levels. The only known approach to this problem was to run numerical or computer simulations. This work presents analytic approach to hyperfine splittings of dressed atomic states. An analytic formula for calculating energies of dressed state hyperfine levels has been derived for a case when interaction between atom and external field is much stronger than the one between electron and nucleus in atom.

Keywords: Hyperfine structure interaction, polarization of electromagnetic wave, AC Stark effect, Autler - Townes effect, dressed state picture, hyperfine structure of dressed states.

SATURS

Apzīmējumu un saīsinājumu saraksts	1
Ievads	4
Fizikālie modeļi un matemātiskais aparāts	6
1 Darbā izmantotie matemātiskie un fizikālie principi	6
1.1 Sfēriskā bāze	6
1.2 Klebša - Gordāna koeficients un Vignera 3j simbols	7
1.3 Vignera-Ekarta teorēma	9
2 Atoma modelis	11
2.1 Atoma kā kvantu sistēmas vispārīgs apraksts	11
2.2 Atoma iekšējās mijiedarbības un papildus korekcijas	13
2.3 Daudzelektronu atomi	14
2.4 Atoma pilnais Hamiltona operators	15
2.5 Izolēta atoma Hamiltona operators bez supersīkstruktūras mijiedarbības	16
2.6 Supersīkstruktūras mijiedarbība	16
3 Elektromagnētiskais starojums	19
3.1 Elektromagnētiskā viļņa matemātiskais apraksts	19
3.2 Elektromagnētiskā viļņa polarizācija	19
Ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras teorija	22
4 Atoma un elektromagnētiskā starojuma mijiedarbības tuvināts apraksts	22
4.1 Laikā mainīgā elektriskajā laukā ievietota atoma pilnā enerģija	22
4.2 Atoma un lineāri polarizēta ārējā lauka mijiedarbības Hamiltoniānis	26
4.3 Rotējoša viļņa tuvinājums	28
4.4 Ietērpto stāvokļu aina	32
4.5 Autlera - Taunsa efekts	41
5 Ietērpto stāvokļu supersīkstruktūra	45
5.1 Supersīkstruktūras Hamiltoniānis ietērpto stāvokļu bāzē	45
5.2 Pilnā sistēmas Hamiltoniāņa īpašvērtības perturbāciju teorijas pirmajā tuvinājumā	50
5.3 Analītiskā tuvinājuma precizitātes novērtējums	52
5.4 Eksperimentālas novērošanas iespēju novērtējums	53

Rezultāti	59
6 Darba rezultāti un diskusija	59
7 Secinājumi	62
Pateicības	63
Literatūras avoti	64

APZĪMĒJUMU UN SAĪSINĀJUMU SARAKSTS

Matemātiskie objekti

a - skalārs lielums

\mathbf{a} - vektoriāls lielums

$\check{\mathbf{a}}$ - vienības vektors

\hat{A} - operators

$\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{a}}$ - vektor-operatori

A - operatoram \hat{A} atbilstošā matrica

$A_{nm} = \langle \Psi_n | \hat{A} | \Psi_m \rangle$ - operatora \hat{A} matricas elements bāzē, kuru veido ortonormētu vektoru $|\Psi_i\rangle$ sistēma. n - rindas indekss, m - kolonnas indekss

$|\Psi_n\rangle \langle \Psi_m|$ - kvadrātiska matrica, kuras rindu skaitu nosaka ortonormētu vektoru $|\Psi_i\rangle$ skaits, bet vienīgā nenulles elementa A_{nm} vērtība ir a

a^* - lieluma a kompleksi saistītais lielums

a^\dagger - lieluma a Ermita saistītais lielums:

a_q - vektora \mathbf{a} kovariantās komponentes sfēriskajā bāzē

a^q - vektora \mathbf{a} kontravariantās komponentes sfēriskajā bāzē

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ - vektoru \mathbf{a} un \mathbf{b} skalārais reizinājums

$\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ - vektoru \mathbf{a} un \mathbf{b} vektoriālais reizinājums

Fizikālie lielumi un konstantes

h - Planka konstante, $h = 6.62606896(33) \cdot 10^{-34} J \cdot s$

\hbar - svīrtotā Planka konstante, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

ϵ_0 - vakuuma dielektriskā caurlaidība, $\epsilon_0 = 8.854... \cdot 10^{-12} F/m$

c - elektromagnētisko viļņu izplatīšanās ātrums vakuumā, $c = 299792458 m/s$

$\hat{\mathbf{d}}$ - atoma elektriskā dipola momenta vektoroperators

$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ - Vignera 3J simbols

$\langle J_1 m_1 J_2 m_2 | J m \rangle$ - Klebša-Gordāna koeficients

A - atoma masas skaitlis, nuklonu skaits kodolā

Z - protonu skaits atoma kodolā

ν - viļņa svārstību frekvence

ω - elektromagnētiskā viļņa cikliskā frekvence, $\omega = 2\pi\nu$

ω_0 - elektriskā dipola pārejas atomā rezonanses frekvence

$\Delta \equiv \omega - \omega_0$ - elektromagnētiskā starojuma frekvences izskaņojums no atoma elektriskā dipola pārejas rezonanses frekvences

\mathcal{E}_0 - elektriskā lauka svārstību amplitūda elektromagnētiskajā vilnī

$\check{\epsilon}$ - elektromagnētiskā viļņa polarizācijas vektors

\hat{H} - fizikālas sistēmas pilnais Hamiltona operators

\hat{H}_{p1} - fizikālas sistēmas pilnais Hamiltona operators, kura matricas elementi aprēķināti, izmantojot perturbāciju teorijas nedeģenerētiem stāvokļiem pirmo tuvinājumu

\hat{H}_{B0} - no ārējām mijiedarbībām izolēta atoma elektronu Hamiltona operators

\hat{H}_N - Hamiltona operators, kas apraksta kodola enerģiju ārējā laukā

\hat{H}_F - supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltona operators

\hat{H}_{ext} - Hamiltona operators, kas apraksta atoma mijiedarbību ar ārēju lauku

\hat{V} - Hamiltona operators, kas apraksta atoma mijiedarbību ar ārēju lauku elektriskā dipola tuvinājumā

\hat{V}_{ge} - Hamiltona operators, kas satur tikai operatora \hat{V} matricas elementus $\langle g, m_{J,g} | \hat{V} | e, m_{J,e} \rangle$ \hat{V}_{RVT} - Hamiltona operators, kas apraksta atoma mijiedarbību ar ārēju lauku rotējoša viļņa tuvinājumā

\hat{H}_B - Hamiltona operators, kas apraksta pilno atoma enerģiju, ja tas ievietots ārējā elektriskajā laukā. Neiekļauj supersīkstruktūras mijiedarbību!

$\hat{\hat{H}}_B$ - Hamiltona operators, kas apraksta pilno atoma enerģiju, ja tas ievietots ārējā elektriskajā laukā, pēc bāzes vektoru unitāras transformācijas. Neiekļauj supersīkstruktūras mijiedarbību!

$\hat{\hat{H}}_{B0}$ - no ārējām mijiedarbībām izolēta atoma elektronu Hamiltona operators pēc bāzes vektoru unitāras transformācijas

$\hat{\hat{V}}$ - Hamiltona operators, kas apraksta atoma mijiedarbību ar ārēju lauku elektriskā dipola tuvinājumā pēc bāzes vektoru unitāras transformācijas

\hat{H}_{RVT} - Hamiltona operators, kas apraksta pilno atoma enerģiju rotējoša viļņa tuvinājumā, ja tas ievietots ārējā elektriskajā laukā. Neiekļauj supersīkstruktūras mijiedarbību!

$\mathcal{Q}_{\Delta J} \equiv \frac{\epsilon_0}{\hbar} \langle g || d || e \rangle$ - atoma un mainīga elektriskā lauka mijiedarbības stiprumu raksturojošs lielums

$\Delta J \equiv J_e - J_g$ - elektrona pilnā leņķiskā momenta kvantu skaitļa izmaiņa elektriskā dipola pārejā

$\langle g || d || e \rangle$ - reducētais elektriskā dipola matricas elements

Ω_{ij} - elektriskā dipola pārejas $|j\rangle \rightarrow |i\rangle$ Rabi frekvence

$\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J, t) \equiv V_{ge}(m_J) \equiv \langle g, m_J | \hat{V} | e, m_J \rangle$ - Operatora \hat{V} matricas elements

$\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J) \equiv \langle g, m_J | \hat{V}_{RVT} | e, m_J \rangle$ - Operatora \hat{V}_{RVT} matricas elements

$E(s, m_J)$ - ietērptā stāvokļa enerģija, ja netiek ievērota supersīkstruktūras mijiedarbība

$E_{AT \max}$ - attālums enerģijas skalā starp ietērptajiem stāvokļiem $|s m_J = J\rangle$ un $|s m_J = -J\rangle$, lielākā AT mijiedarbības enerģija

$E_{AT \min}$ - attālums enerģijas skalā starp ietērptajiem stāvokļiem $|s m_J\rangle$ un $|s (m_J - 1)\rangle$, mazākā AT mijiedarbības enerģija

$E_{AT \text{med}}$ - mazākais attālums enerģijas skalā starp ietērptajiem stāvokļiem $|+ m_J\rangle$ un $|- (m_J)\rangle$, AT mijiedarbību raksturojoša enerģija

A_η - magnētiskā dipola konstante, supersīkstruktūras mijiedarbību raksturojošs lielums

B_η - elektriskā kvadrupola konstante, supersīkstruktūras mijiedarbību raksturojošs lielums

$\Delta E_{F,J,I}$ - supersīkstruktūras mijiedarbības enerģija

$\Delta E(\eta, I, F_\eta)$ - supersīkstruktūras mijiedarbības enerģija, kas aprēķināta, ņemot vērā vienīgi supersīkstruktūras mijiedarbības konstantes A_η, B_η

$E_{F \max}$ - attālums enerģijas skalā starp operatora \hat{F} īpašstāvokļiem $|\eta F_\eta = (I + J_\eta)\rangle$ un $|\eta F_\eta = |I - J_\eta|\rangle$, lielākā supersīkstruktūras mijiedarbības stiprumu raksturojošā enerģija

$E_{F \min}$ - attālums enerģijas skalā starp operatora \hat{F} īpašstāvokļiem $|\eta F_\eta\rangle$ un $|\eta (F_\eta - 1)\rangle$, mazākā supersīkstruktūras mijiedarbības stiprumu raksturojošā enerģija

\hat{H}_s - operators, kas ietērpto stāvokļu bāzē satur supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāņa diagonālos elementus

$\text{indent} H_s(s, m_J, m_I) \equiv \langle s m_J m_I | \hat{H}_s | s m_J m_I \rangle$ - operatora \hat{H}_s matricas elements

\hat{H}_d - operators, kas ietērpto stāvokļu bāzē satur tos supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāņa elementus, kas savā starpā saista deģenerētus ietērptos stāvokļus

\hat{H}_{n1} - operators, kas ietērpto stāvokļu bāzē satur tos supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāņa elementus, kas savā starpā saista nedeģenerētus ietērptos stāvokļus ar vienādiem kvantu skaitļiem s

\hat{H}_{n2} - operators, kas ietērpto stāvokļu bāzē satur tos supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāņa elementus, kas savā starpā saista nedeģenerētus ietērptos stāvokļus ar atšķirīgiem kvantu skaitļiem s

$E_{p1}(s, m_J, m_I, m'_J, m'_I)$ - ietērptā stāvokļa supersīkstruktūras komponentes enerģija

$E_{p1}(s, m_J, m_I)$ - ietērptā stāvokļa supersīkstruktūras komponentes enerģija, ja šo komponenti veido tikai viens ietērptais stāvoklis $|s, m_J, m_I\rangle$

DOKS - Dekarta ortogonālā koordinātu sistēma

RVT - Rotējoša viļņa tuvinājums

AT mijiedarbība - atoma mijiedarbība ar ārēju elektrisko lauku gadījumā, kad sistēmā novērojams Autlera - Taunsa efekts

IEVADS

Literatūras apskats

1913. gadā, neatkarīgi viens no otra, J. Štarks un A. Lo Surdo atklāja, ka gaismas avota spektrāllīnijas statistiska elektriskā lauka ietekmē sašķēlas vairākās komponentēs [1]. Vēlāk tika atklāts, ka arī laikā mainīgs elektriskais lauks izraisa spektrāllīniju nobīdes, savukārt, ja elektriskā lauka svārstību frekvence ir tuva kvantu sistēmas pārejas rezonanses frekvencei, spektrāllīnijas sašķēlas, veidojot t.s. Mollova tripletu [2]. 1955. gadā S. H. Autlers un C. H. Taunss šo sašķelšanos eksperimentāli novēroja mikroviļņu diapazonā, kā arī veidoja šī efekta matemātisko aprakstu [3]. Mūsdienās kvantu sistēmas spektrāllīniju nobīdi mainīga elektriskā lauka ietekmē sauc par dinamisko jeb AC Štarka efektu [2], savukārt dinamiskā Štarka robežgadījumā, kad spektrāllīnijas sašķēlas spēcīga ārējā lauka ietekmē, kas noskaņots tuvu kvantu sistēmas pārejas rezonanses frekvencei, pieņemts saukt par Autlera - Taunsa efektu [4], novērtējot abu zinātnieku ieguldījumu šī efekta izpētē.

Autlera - Taunsa efekts mūsdienās tiek izmantots, pētot apdzīvotību koherentas pārslēgšanas iespējas kvantu sistēmās [5]. Latvijas Universitātes Lāzeru centra Molekulāro kūļu laboratorijā sārnu metālu atomu virsskaņas kūļos tiek veikti pētījumi atomu spontānās emisijas raksturlielumu noteikšanai, kā arī tiek pētīts, kā ar Autlera - Taunsa efekta palīdzību iespējams panākt pilnīgu kvantu sistēmas īpašstāvokļu apdzīvotību kontroli. Tā kā eksperimentālie novērojumi tiek veikti nātrija atomos, kura kodola spina kvantu skaitlis $I = \frac{3}{2}$, ir nepieciešams novērtēt, kādu iespaidu uz eksperimentu rezultātiem atstāj supersikstruktūras mijiedarbība.

Šī darba 4.4. nodaļā tiek definēta ietērpto stāvokļu aina, un ar tās palīdzību ir izskaidrots, kādos gadījumos atoma stacionāro stāvokļu izmaiņas mijiedarbībā ar ārēju lauku dēvē par dinamisko jeb AC Štarka efektu, un kādos gadījumos novērojams Autlera - Taunsa efekts.

J. Martin 1995. gada rakstā [6] un A. Kuhn 1998. gada rakstā [7] aplūko problēmas, kādas var rasties koherentas apdzīvotības pārneses eksperimentālos novērojumos supersikstruktūras mijiedarbības dēļ. Tiek minēts, ka supersikstruktūras mijiedarbības dēļ atomu un molekulu sistēmās būtu iespējams novērot tādu atomu līmeņu interferences efektus, kādi vienkāršākās sistēmās nav novērojami. Šajos un turpmākajos rakstos ir aplūkotas dažādas daudzlīmeņu sistēmas ar supersikstruktūras mijiedarbību, kā arī veikti skaitliski aprēķini [8], tomēr analītiskas izteiksmes ar spēcīgu elektromagnētisko lauku ietērpto stāvokļu supersikstruktūras sašķelšanās aprēķināšanai nav uzrādītas.

Darba mērķi un uzdevumi

Ņemot vērā, ka pasaules zinātnē nav atrodamas liecības par iepriekš izstrādātu ietērpto stāvokļu supersikstruktūras veidošanās teorijas bāzi, uzsākot šo darbu, tika izvirzīti šādi mērķi:

1. apgūt nepieciešamās zināšanas, lai veiksmīgi pielietotu teorētiskās spektroskopijas metodes sarežģītas kvantu sistēmas matemātiskā apraksta veidošanā;

2. izveidot kvantu sistēmas supersīkstruktūras veidošanās matemātisko aprakstu ar ārējo lauku ietērpto stāvokļu bāzē.

Lai veiksmīgi saniegtu izvirzītos mērķus, tika formulēti šādi darba uzdevumi:

1. iepazīties ar atomu supersīkstruktūras teorijas principiem;
2. iepazīties ar atoma un ārēja laikā mainīga elektromagnētiskā lauka mijiedarbības elektriskā dipola tuvinājumā teoriju;
3. iepazīties ar kvantu sistēmu matemātisko aprakstu ietērpto stāvokļu ainā;
4. iepazīties ar Autlera - Taunsa efekta teorētisko izklāstu un eksperimentālas novērošanas pamatprincipiem;
5. iegūt un analizēt supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāņa precīzu izteiksmi ietērpto stāvokļu bāzē gadījumā, kad atoms ievietots lineāri polarizētā ārējā elektromagnētiskajā laukā;
6. iegūt viegli pielietojamu analītisku izteiksmi ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras līmeņu enerģiju aprēķināšanai gadījumā, kad atoma mijiedarbība ar ārējo lauku ir ievērojami spēcīgāka par supersīkstruktūras mijiedarbību;
7. salīdzināt analītiskās izteiksmes rezultātus ar precīzajām enerģiju vērtībām, kas iegūtas ar skaitlisku metožu palīdzību, un novērtēt rezultāta precizitāti;
8. novērtēt ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras veidošanās eksperimentālas novērošanas iespējas sārnu metālu atomu kūļos.

Darba struktūra

Ar spēcīgu ārējo elektromagnētisko lauku ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras veidošanās analīzei nepieciešams ievērojams zināšanu daudzums teorētiskajā spektroskopijā, tādēļ darba pirmā daļa "Fizikālie modeļi un matemātiskais aparāts" piedāvā ieskatu atomos notiekošo procesu un elektromagnētiskā lauka matemātiskajā aprakstā. Otrajā darba daļā "Ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras teorija" tiek aplūkota atoma mijiedarbība ar elektromagnētisko lauku elektriskā dipola tuvinājumā, tiek aplūkota supersīkstruktūras mijiedarbības ietekme uz ietērpto stāvokļu enerģijām, kā arī tiek noskaidrots, kā ar perturbāciju teorijas metožu palīdzību iespējams iegūt tuvinātas analītiskas izteiksmes. Nobeiguma daļā "Rezultāti" tiek apspriesti darba rezultāti, kā arī ieskicēti turpmākie pētījumu virzieni.

FIZIKĀLIE MODEĻI UN MATEMĀTISKAIS APARĀTS

1 DARBĀ IZMANTOTIE MATEMĀTISKIE UN FIZIKĀLIE PRINCIPI

1.1 Sfēriskā bāze

Kovariance un kontravariance norāda, kā mainās fizikāla vai ģeometriska objekta matemātiskais apraksts, veicot koordinātu transformāciju. Tā kā vektoriāli lielumi ir invarianti pret koordinātu sistēmas transformācijām, tad vektora komponentēm jāmainās pretēji koordinātu sistēmas bāzei. Bāzes vektoru komplektu, kas mainās atbilstoši bāzes transformācijai, sauc par kovariantiem bāzes vektoriem, savukārt vektora koordinātes, kas mainās pretēji bāzes maiņai, ir kontravariantas. Kovariantas vektora komponentes apzīmē, kā indeksu apakšā norādot atbilstošā bāzes vektora simbolu, savukārt kontravariantiem lielumiem atbilstošā bāzes vektora simbolu norāda kā indeksu augšā.

Dekarta ortogonālajā koordinātu sistēmā (DOKS) jebkurai bāzes vektoru transformācijai atbilst reāla transformācijas matrica, līdz ar to DOKS kontravariantās vektoru komponentes sakrīt ar kovariantajām,

$$\mathbf{v} = v^x \check{\mathbf{x}} + v^y \check{\mathbf{y}} + v^z \check{\mathbf{z}} = v_x \check{\mathbf{x}} + v_y \check{\mathbf{y}} + v_z \check{\mathbf{z}} \quad (1.1.1)$$

Ņemot vērā atoma sfērisko simetriju, atoma - gaismas mijiedarbību ir ērti aplūkot tādā telpiskā koordinātu sistēmā, kuras bāzes vektori atbilst gaismas σ^+ , π , σ^- polarizācijām. Saskaņā ar [9], šādi izvēlētos bāzes vektorus saukšu par sfērisko bāzi, un atbilstošo koordinātu sistēmu - par sfērisko vektoru koordinātu sistēmu.

Kovarianto sfērisko bāzes vektoru saistība ar DOKS bāzes vektoriem [9, 3.8 a-c]:

$$\check{\mathbf{e}}_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\check{\mathbf{x}} + i\check{\mathbf{y}}) \quad (1.1.2)$$

$$\check{\mathbf{e}}_0 = \check{\mathbf{z}} \quad (1.1.3)$$

$$\check{\mathbf{e}}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{\mathbf{x}} - i\check{\mathbf{y}}) \quad (1.1.4)$$

Vektora komponentes kovariantā sfēriskajā bāzē ir kontravariantas [9, eq 3.16 a-c]:

$$v^{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(v_x - iv_y) \quad (1.1.5)$$

$$v^0 = v_z \quad (1.1.6)$$

$$v^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(v_x + iv_y) \quad (1.1.7)$$

Atbilstoši kompleksa vektora izvirzījums sfēriskās komponentēs ir:

$$\mathbf{v} = \sum_{q=-1}^1 v^q \check{\epsilon}_q \quad (1.1.8)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^* &= \sum_{q=-1}^1 v^{*q} \check{\epsilon}_q^* = \sum_{q=-1}^1 v^{*q} (-1)^q \check{\epsilon}_{-q} = \\ &= \sum_{q=-1}^1 v^{*-q} (-1)^q \check{\epsilon}_q = \sum_{q=-1}^1 v_q^* \check{\epsilon}_q \end{aligned} \quad (1.1.9)$$

Kompleksu vektoru gadījumā būs noderīga saistība starp vektora kovariantajām un kontravariantajām komponentēm:

$$v^q = (-1)^q v_{-q} \quad (1.1.10)$$

Savukārt reāla vektora komponentēm var sastādīt sakarību:

$$v_{real}^q = (-1)^q v_{real}^{*-q} \quad (1.1.11)$$

Ņemot vērā, ka vienības vektoru koordinātes DOKS vienmēr ir reāli skaitļi, var sastādīt sakarību starp sfēriskajiem bāzes vektoriem:

$$\check{\epsilon}_q^* = (-1)^q \check{\epsilon}_{-q} \quad (1.1.12)$$

Vektoru skalārajam reizinājumam atbilst izvirzījums sfēriskajās komponentēs:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{q=-1}^1 a_q b^q \quad (1.1.13)$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* = \sum_{q=-1}^1 a_q b_q^* \quad (1.1.14)$$

1.2 Klebša - Gordāna koeficients un Vignera 3j simbols

Mikropasaules fizkā galīgās daudzdaļiņu sistēmās fizikālie lielumi var pieņemt tikai noteiktas diskrētas vērtības. Viens no šādiem lielumiem atomā ir leņķiskā momenta vektor-operatori $\hat{\mathbf{J}}$, kura vidējo vērtību raksturo atbilstošais kvantu skaitlis J ,

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |J, m_J\rangle = J(J+1) |J, m_J\rangle, \quad (1.2.1)$$

un leņķiskā momenta projekcijas operators $\hat{\mathbf{J}}_z$, ko raksturo projekcijas kvantu skaitlis m_J ,

$$\hat{\mathbf{J}}_z |J, m_J\rangle = m_J |J, m_J\rangle \quad (1.2.2)$$

Pie tam \hat{J}_z vienmēr komutē ar \hat{J} . Tā kā noslēgtas sistēmas pilnais leņķiskais moments vienmēr saglabājas, un tas ir visu sistēmas atsevišķo leņķisko momentu vektorāla summa, ir nepieciešams definēt speciālas funkcijas, ar kuru palīdzību noteikt, kā pilnā leņķiskā momenta un tā projekcijas īpašvektori ir saistīti ar atsevišķu summas locekļu - leņķisko momentu - īpašfunkcijām.

Klebša-Gordāna koeficients nosaka operatoru komplekta $\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}, \hat{J}_z$ īpašfunkciju izvirzījumu pēc operatoru komplekta $\hat{J}_1, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_2, \hat{J}_{2z}$ īpašfunkcijām, ja $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$ [10]:

$$|\Psi_{J_1, J_2, J, m_J}\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle J_1 m_1 J_2 m_2 | J_1 J_2 J m_J \rangle |\Psi_{J_1, m_1, J_2, m_2}\rangle \quad (1.2.3)$$

$$|\Psi_{J_1, m_1, J_2, m_2}\rangle = \sum_{J, m_J} \langle J_1 J_2 J m_J | J_1 m_1 J_2 m_2 \rangle |\Psi_{J_1, J_2, J, m_J}\rangle \quad (1.2.4)$$

Šeit $\langle J_1 m_1 J_2 m_2 | J_1 J_2 J m_J \rangle$ - tiešais Klebša-Gordāna koeficients, bet $\langle J_1 J_2 J m_J | J_1 m_1 J_2 m_2 \rangle$ - apgrieztais Klebša-Gordāna koeficients. Šajā darbā Klebša-Gordāna koeficienti tiks pierakstīti formā,

$$\langle J_1 m_1 J_2 m_2 | J m_J \rangle \quad (1.2.5)$$

Standartgadījumos Klebša-Gordāna koeficienti pieņem tikai reālas vērtības [9], līdz ar to apgrieztais Klebša-Gordāna koeficients ir vienāds ar tiešo Klebša-Gordāna koeficientu:

$$\langle J_1 m_1 J_2 m_2 | J m_J \rangle = \langle J m_J | J_1 m_1 J_2 m_2 \rangle \quad (1.2.6)$$

Klebša-Gordāna koeficients nav vienāds ar nulli gadījumos, ja izpildās šādi nosacījumi:

$$m_1 + m_2 = m \quad (1.2.7)$$

$$J = J_1 + J_2, J_1 + J_2 - 1, \dots, |J_1 - J_2| \quad (1.2.8)$$

Literatūrā bieži Klebša-Gordāna koeficientu vietā tiek izmantots Vignera 3j simbols, kuram ir vairāk noderīgu simetrijas īpašību, nekā Klebša-Gordāna koeficientam [9]. Vignera 3j simbols parasti tiek pierakstīts kā

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \quad (1.2.9)$$

Vignera 3j simbols ir saistīts ar Klebša-Gordāna koeficientiem šādā veidā [9, eq. 3.86]:

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = (-1)^{J_1 - J_2 - m} \frac{1}{\sqrt{2J + 1}} \langle J_1 m_1 J_2 m_2 | J - m \rangle \quad (1.2.10)$$

Tā pat kā Klebša-Gordāna koeficients, arī Vignera 3j simbols nav vienāds ar nulli gadījumos, ja izpildās nosacījumi (1.2.7) un (1.2.8). Tos pārveidojot atbilstoši sakarībai (1.2.10), iegūst

$$m_1 + m_2 = -m \quad (1.2.11)$$

$$J = J_1 + J_2, J_1 + J_2 - 1, \dots, |J_1 - J_2| \quad (1.2.12)$$

Vignera 3j simbola simetrijas īpašības

Lai vienkāršotu aprēķinus, darbā tiks izmantotas vairākas Vignera 3j simbola simetrijas īpašības.

Vignera 3j simbola vērtība nemainās, veicot pāra permutācijas kolonnām (t.i. elementu mainīšana vietām tiek veikta pāra skaitu reižu):

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J & J_1 & J_2 \\ m & m_1 & m_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_2 & J & J_1 \\ m_2 & m & m_1 \end{pmatrix} \quad (1.2.13)$$

Kolonnu nepāra permutācijām ir spēkā sakarība:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} &= (-1)^{J_1+J_2+J} \begin{pmatrix} J_2 & J_1 & J \\ m_2 & m_1 & m \end{pmatrix} = \\ &= (-1)^{J_1+J_2+J} \begin{pmatrix} J_1 & J & J_2 \\ m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} = \dots \end{aligned} \quad (1.2.14)$$

Noderīga simetrijas sakarība:

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = (-1)^{J_1+J_2+J} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ -m_1 & -m_2 & -m \end{pmatrix} \quad (1.2.15)$$

1.3 Vignera-Ekarta teorēma

Vignera-Ekarta teorēma ir noderīgs matemātisks instruments, kura šajā darbā tiks izmantota, lai aprēķinātu matricielementus Hamiltoniānim, kas apraksta atoma mijiedarbību ar ārējo elektromagnētisko lauku. Šī teorēma apgalvo, ka nereducējama tenzor-operatora kovarianto komponentu T_q^k matricielementi elektrona pilnā leņķiskā momenta \mathbf{J} bāzē ir izsakāmi kā atbilstošā Klebša-Gordāna koeficienta un no leņķiskā momenta projekcijas kvantu skaitļiem m neatkarīgas konstantes reizinājums [9, eq 3.117]:

$$\langle \xi' J' m' | T_q^k | \xi J m \rangle = \frac{\langle \xi' J' || T^k || \xi J \rangle}{\sqrt{2J'+1}} \langle J m k q | J' m' \rangle \quad (1.3.1)$$

Šeit $\langle \xi' J' || T^k || \xi J \rangle$ ir tā sauktais reducētais matricas elements, kas nav atkarīgs no leņķiskā momenta projekcijām. Šajā darbā Vignera-Ekarta teorēma tiks pielietota, lai aprēķinātu matricielementus Hamiltoniānim, kas raksturo atoma un ārēja elektriskā lauka mijiedarbību. Tādā gadījumā T_q^k ir atoma elektriskā dipola momenta vektoroperatora (pirmā ranga tenzora) $\hat{\mathbf{d}}$ kovariantās komponentes d_q .

Izmantojot Klebša-Gordāna koeficientu un Vignera 3j simbolu savstarpējo saistību, var

iegūt vieglāk praktiski pielietojamu Vignera-Ekarta teorēmas formu:

$$\langle \xi' J' m' | T_q^k | \xi J m \rangle = (-1)^{J'-m'} \begin{pmatrix} J' & k & J \\ -m' & q & m \end{pmatrix} \langle \xi' J' || T^k || \xi J \rangle \quad (1.3.2)$$

2 ATOMA MODELIS

2.1 Atoma kā kvantu sistēmas vispārīgs apraksts

Atomu veido pozitīvi lādēts kodols un elektroni, kas kodola radītajā laukā ieņēmuši zemākos pieejamos stabilos enerģijas stāvokļus. Lai noteiktu sistēmas enerģijas īpašvērtības un stāvokļa īpašvektorus, nepieciešams atrisināt Šrēdingera vienādojumu. Diemžēl daudzo atomā notiekošo mijiedarbību dēļ precīzi atrisināt kvantu mehānikas uzdevumu ir ārkārtīgi sarežģīti. Parasti, aplūkojot reāla atoma enerģijas īpašstāvokļus, izmanto reālā atoma līdzību ar ūdeņraža atomu, kuram kvantu mehānikas uzdevumu iespējams atrisināt precīzi.

No standarta kvantu mehānikas kursa ir zināms, ka, lai noteiktu mikrodaļiņas stāvokli, jānosaka visu pilnu fizikālo lielumu operatoru komplektu veidojošo operatoru īpašvērtības. Aplūkojot sarežģītas kvantu sistēmas, piemēram atomus, parasti interesējamies par sistēmas īpašstāvokļiem, kuri atbilst fizikālo lielumu operatoru īpašvērtību spektra diskrētajai daļai. Operatoru diskrētās īpašvērtības pieņemts identificēt ar bezdimensionāla parametra - kvantu skaitļa palīdzību. Visi pilna fizikālo lielumu operatoru komplekta operatori komutē savā starpā, un līdz ar to tiem atbilstošie fizikālie lielumi vienlaikus var pieņemt noteiktas vērtības. Lai sistēmas fizikālais apraksts būtu pielietojams, tam ir jābūt spēkā laika intervālā $\Delta t > 0$, līdz ar to ir loģiski sistēmas stāvokļa raksturošanai izvēlēties tādus fizikālus lielumus, kuriem ir spēkā saglabāšanās likumi. No fizikālo sistēmu simetrijas īpašībām izriet enerģijas, impulsa, impulsa momenta un citi saglabāšanās likumi. Aplūkojot atomāras sistēmas, ir pieņemts pilnu fizikālo lielumu operatoru komplektu sastādīt no sistēmas pilnās enerģijas operatora, ko sauc arī par Hamiltona operatoru, un ar to komutējošiem leņķiskā momenta operatoriem. Veidojot atomāras sistēmas matemātisko aprakstu ir noderīgi atcerēties, ka sistēmas Hamiltona operators vienmēr komutē ar sistēmas pilnā leņķiskā momenta operatoru.

Atomāras sistēmas enerģijas īpašstāvokļus pieņemts saukt par enerģijas līmeņiem, bet, ja vienam enerģijas īpašstāvoklim atbilst vairāki deģenerēti citu fizikālo lielumu operatoru īpašstāvokļi, tad šos īpašstāvokļus sauc par atbilstošā enerģijas līmeņa apakšlīmeņiem. Sistēmas īpašstāvokļiem atbilstošās īpašfunkcijas parasti sauc par stāvokļa īpašvektoriem, un *bra-ket* formālismā pieraksta, norādot fizikālo lielumu operatoru īpašvērtībām atbilstošos kvantu skaitļus.

Aplūkojot ūdeņraža atomu pirmajā tuvinājumā var ņemt vērā tikai divu lādētu daļiņu - pozitīvā kodola un negatīvi lādētā elektrona - mijiedarbību. Atrisinot stacionāro Šrēdingera vienādojumu

$$\hat{H}|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle \quad (2.1.1)$$

šādai sistēmai, tiek iegūts diskrēts Hamiltoniāna \hat{H} īpašvērtību spektrs, un katrai īpašvērtībai atbilst unikāla kvantu skaitļa n vērtība. Ņemot vērā, ka šīs īpašvērtības tiek iegūtas, ņemot vērā tikai pašu spēcīgāko mijiedarbību atomā starp kodolu un elektronu, tad kvantu skaitli n nosauc

par galveno kvantu skaitli, un tas var pieņemt vērtības:

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.1.2)$$

Ja starp divām pretēji lādētām daļiņām pastāv tikai Kulona mijiedarbība, tad ir loģiski sagaidīt, ka daļiņu savstarpējais attālums samazināsies līdz sadursmei, kurā notiks lādiņa pārdalīšanās, tomēr zinām, ka atoma iekšienē elektrons nekad neietricas kodolā. Šāda situācija iespējama, ja iedomājamies, ka elektrons riņķo ap pozitīvi lādēto kodolu (Bora atoma modelis) [11]. Elektrona orbitālo kustību raksturo leņķiskais moments L . Mūsdienās zinām, ka atoma planetārais modelis nav korekts, un elektrona koordinātas varbūtību atomā matemātiski apraksta specifiskas funkcijas, tomēr arī šādu varbūtības sadalījumu var raksturot ar efektīvo leņķiskā momenta vērtību. Leņķiskā momenta operatora \hat{L} īpašvērtībām atbilstošo kvantu skaitli pieņemts apzīmēt ar l viena elektrona gadījumā un ar L , ja tiek aplūkots vairāku ap kodolu izvietotu lektroņu leņķisko momentu summa. Tā kā šādā vienkāršotā atoma modelī elektrona leņķiskais moments ir vienāds ar sistēmas pilno leņķisko momentu, tad operatori \hat{H} , \hat{L} komutē, un tiem ir kopīgas īpašfunkcijas. Izrādās, ka katrai Hamiltoniāņa īpašfunkcijai ar raksturīgo kvantu skaitli n atbilst $(n + 1)$ deģenerētas operatora \hat{L} īpašvērtības ar kvantu skaitļa l vērtībām:

$$l = 0, 1, \dots, n - 1, n \quad (2.1.3)$$

Atomu veidojošām daļiņām - elektroniem, protoniem un neitroniem piemīt ar iekšēju brīvības pakāpi saistīts kvantu mehāniskas dabas leņķiskais moments, ko sauc par spinu \hat{S} . Elektrona spinam atbilstošo kvantu skaitli apzīmē ar s (vai S vairāku elektronu gadījumā), un tas pieņem vērtību $s = \frac{1}{2}$. Savukārt kodolā nukloni sakārtojas tā, ka kopējais kodola spins pieņem minimālo vērtību. Pilno kodola spinu \hat{I} raksturo ar kvantu skaitļa I palīdzību. Ņemot vērā, ka vienkāršotajā ūdeņraža atoma modelī nepastāv mijiedarbība starp \hat{L} , \hat{S} un \hat{I} , tiem visiem ir spēkā leņķiskā momenta saglabāšanās likums, un tie komutē ar sistēmas pilno Hamiltona operatoru \hat{H} .

Tāpat ir loģiski apgalvot, ka saglabāšanās likumi ir spēkā leņķisko momentu vektoriālajām summām:

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \quad (2.1.4)$$

$$\hat{F} = \hat{J} + \hat{I} \quad (2.1.5)$$

Šos vektorus sauc par pilno elektrona leņķisko momentu \hat{J} un pilno atoma leņķisko momentu \hat{F} . Operatoru īpašvērtībām atbilstošos kvantu skaitļus apzīmē attiecīgi J un F , un tie var pieņemt vērtības:

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S| \quad (2.1.6)$$

$$F = J + I, J + I - 1, \dots, |J - I| \quad (2.1.7)$$

(2.1.8)

Ir zināms, ka ikviens vektors telpā definē noteiktu virzienu, un to var pierakstīt, izmantojot vektora projekcijas uz koordinātu sistēmas asīm. Kvantu mehānikā izrādās, ka leņķiskā momenta operators vienlaikus komutē tikai ar vienu no atbilstošā leņķiskā momenta projekcijas operatriem. Veidojot sistemātisku kvantu sistēmas aprakstu, ir pieņemts aplūkot visu leņķisko momentu projekcijas uz vienu un to pašu koordinātu sistēmas asi z . Tā kā projekcijas operatori komutē ar leņķiskā momenta operatoriem, tad tie komutē arī ar sistēmas Hamiltona operatoru, un tiem ir kopējs īpašfunkciju spektrs. Leņķiskā momenta operatoram atbilstošo projekcijas operatoru apzīmē, atbilstošā leņķiskā momenta operatora apzīmējumam pievienojot indeksu z , savukārt projekcijas operatora īpašvērtībai atbilstošo kvantu skaitli apzīmē ar m , kā indeksu pievienojot leņķiskā momenta operatora apzīmējumam. Piemēram, elektrona pilnā leņķiskā momenta \hat{J} projekcijas operators ir \hat{J}_z , bet tiem atbilstošie kvantu skaitļi ir J un m_J , pie tam:

$$m_J = -J, -J + 1, \dots, J \quad (2.1.9)$$

Aplūkotās sistēmas stāvokļa vektoru *bra-ket* formālismā pieraksta, norādot visus atbilstošos kvantu skaitļus:

$$|\Psi\rangle = |n l s I J F m_l m_s m_I m_J m_F\rangle \quad (2.1.10)$$

2.2 Atoma iekšējās mijiedarbības un papildus korekcijas

Ņemot vērā elektrona kinētiskās enerģijas relativistisko korekciju, izrādās, ka elektrona enerģija ir atkarīga arī no kvantu skaitļa l vērtības.

Tā kā elektrons ir lādēta daļiņa, tad tā orbitālā kustība rada magnētisko lauku, kura stiprumu nosaka elektrona orbitālās kustības kvantu skaitlis l . Savukārt elektrona spins ir saistīts ar pašam elektronam piemītošu magnētisko momentu. Ņemot to vērā, ir saprotams, ka atomā notiek šo magnētisko lauku savstarpēja mijiedarbība, ko sauc par spin-orbitālo mijiedarbību. Tā kā jebkura papildus mijiedarbība ir saistīta ar mijiedarbības Hamiltona operatoru, kas izmaina pilnā sistēmas Hamiltoniāņa īpašvērtību spektru, tad spin-orbitālās mijiedarbības gadījumā pilnais sistēmas Hamiltoniānis vairs nekomutē ar operatoriem \hat{L} , \hat{S} un atbilstošajiem projekcijas operatoriem. Spin-orbitālā mijiedarbība neievieš papildus leņķisko momentu, tādēļ Hamiltoniānis joprojām komutē ar operatoriem \hat{J} , \hat{I} un \hat{F} , un atbilstošajiem projekcijas operatoriem. Līdz ar to sistēmas īpašstāvokli raksturo *ket*-vektors:

$$|\Psi\rangle = |n I J F m_I m_J m_F\rangle \quad (2.2.1)$$

Ņemot vērā, ka ar kvantu skaitļiem l un m_s atomā ir saistīti stingri elektronisko pāreju izvēles likumi, reālu atomu aprakstā bieži vien enerģijas līmeņiem tiek uzrādītas arī šo kvantu skaitļu aptuvenās vērtības.

Vēl precīzāks sistēmas apraksts tiek panākts, izmantojot relativistisko viļņu vienādojumu (Dīraka vienādojumu), kura ieviesto korekciju sauc par Darvina korekciju [11]. Aplūkojot vakuuma lauka fluktuāciju ietekmi uz elektrona enerģiju, iegūst vēl vienu enerģijas korekciju, ko sauc par Lemba nobīdi [11].

Apvienojot elektrona enerģijas korekcijas un spin-orbitālo mijiedarbību, iegūst, ka atoma pilnā Hamiltoniāņa īpašenerģijas ir atkarīgas ne vien no n , bet arī no kvantu skaitļiem l un J . Līdz ar to tiek iegūta atoma enerģijas līmeņu sašķelšanās sīkstrukturā. Atoma enerģijas līmeņi joprojām ir deģenerēti pēc kvantu skaitļiem m_J, I, m_I un F, m_F .

Iepriekš apgalvoju, ka arī atoma kodolam var piemist nenulles spins. Spina magnētiskās dabas dēļ notiek mijiedarbība starp elektrona pilno leņķisko momentu \hat{J} un kodola spinu \hat{I} . Mijiedarbības rezultātā pilnais sistēmas Hamiltoniānis vairs nekomutē ar atbilstošajiem operatoriem $\hat{J}, \hat{I}, \hat{J}_z$ un \hat{I}_z , bet joprojām komutē ar atoma pilnā leņķiskā momenta operatoru \hat{F} un tā projekciju \hat{F}_z . Elektrona un kodola spina mijiedarbības rezultātā sīkstrukturācijas līmeņa komponentes ar atšķirīgām kvantu skaitļa F vērtībām iegūst atšķirīgas enerģijas. Sīkstrukturācijas līmeņu sašķelšanos kodola spina iedarbības dēļ sauc par supersīkstrukturācijas mijiedarbību.

Līdzīgi kā ar l un m_s , arī ar kvantu skaitļiem J un I ir saistīti elektronisko pāreju izvēles likumi, tādēļ, ja arī reālā atomā pastāv supersīkstrukturācijas mijiedarbība, enerģijas īpašstāvokļiem tiek norādītas aptuvenās kvantu skaitļu J un I vērtības.

2.3 Daudzelektronu atomi

Daudzelektronu atomus veido daudzi nukloni un daudzi elektroni, un daudzo iekšējo mijiedarbību dēļ šāda atoma enerģijas īpašstāvokļus vairs nevar raksturot ar precīziem kvantu skaitļiem n, l, s , tomēr to aptuvenās vērtības ir noderīgas, lai raksturotu atoma elektronu konfigurāciju, kā arī, lai novērtētu elektronisko pāreju izvēles likumu pielietojamību [12]. Daudzelektronu atoma stāvokli joprojām raksturo labi kvantu skaitļi J, I un atbilstošie projekcijas kvantu skaitļi, vai kvantu skaitļi F, m_F gadījumā, ja tiek ievērota supersīkstrukturācijas mijiedarbība.

Ņemot vērā šos apsvērumus, atoma enerģijas īpašstāvokli *bra-ket* formālismā var raksturot ar šādiem lielumiem:

- η - satur visus kvantu skaitļus, kas nosaka sīkstrukturācijas stāvokļa enerģiju;
- m_J - norāda sīkstrukturācijas līmeņa η apakšlīmeni ar pilnā leņķiskā momenta projekciju m_J ;
- m_I - norāda enerģijas īpašstāvoklim atbilstošo kodola spina projekciju m_I .

Ieviešot apzīmējumu η , nav nepieciešams papildus norādīt kvantu skaitli J_η , savukārt kodola spinu I nav nepieciešams norādīt, jo tas ir vienāds visiem atoma enerģijas īpašstāvokļiem. Līdz ar to *bra-ket* formālismā atoma īpašstāvokli var pierakstīt formā:

$$|\Psi\rangle = |\eta m_J m_I\rangle \quad (2.3.1)$$

Tā kā pilno viļņu funkciju veido elektronus un kodolu raksturojošā daļa,

$$|\Psi\rangle = |\Psi_e\rangle \otimes |\Psi_k\rangle, \quad (2.3.2)$$

tad gadījumos, kad nav nepieciešams aplūkot kodola stāvokli, ir pilnīgi pietiekami izmantot tikai viļņu funkcijas elektronu daļu $|\Psi_e\rangle$,

$$|\Psi\rangle = |\Psi_e\rangle \quad (2.3.3)$$

$$|\Psi_e\rangle = |\eta m_J\rangle \quad (2.3.4)$$

$$(2.3.5)$$

Gadījumos, kad tiek ievērota supersīkstruktūras mijiedarbība, ievērojot iepriekšējos apzīmējumus, enerģijas īpašstāvokli apzīmē:

$$|\Psi\rangle = |\eta F_\eta m_F\rangle \quad (2.3.6)$$

Kvantu skaitli F_η nevar iekļaut apzīmējumā η , jo vienam sīkstruktūras līmenim var būt vairāki supersīkstruktūras apakšlīmeņi ar atšķirīgiem F .

2.4 Atoma pilnais Hamiltona operators

Ikvienas fizikālas sistēmas enerģijas īpašstāvokļus var uzdot, norādot sistēmas pilno Hamiltona operatoru \hat{H} . Pilno Hamiltona operatoru veido elektronu enerģijas operators \hat{H}_{B0} , kodola enerģijas operators \hat{H}_N , elektronu un kodola spina mijiedarbības (supersīkstruktūras) enerģijas operators \hat{H}_F un operators, kas apraksta ārēja laikā mainīga elektromagnētiskā lauka mijiedarbību ar atoma elektroniem \hat{H}_{ext} :

$$\hat{H} = \hat{H}_{B0} + \hat{H}_N + \hat{H}_F + \hat{H}_{ext} \quad (2.4.1)$$

Operators $\hat{H}_{B,0}$ ietver visas atoma iekšējās mijiedarbības līdz sīkstruktūras mijiedarbībai, un tā īpašvektori ir atoma sīkstruktūras līmeņu viļņu funkcijām atbilstošie vektori. Detalizētāk šis operators tiks aplūkots nodaļā 2.5. Ņemot vērā, ka šī darba ietvaros netiek aplūkota ārēja magnētiskā lauka ietekme uz atomu, tad kodola enerģiju raksturojošais operators \hat{H}_N ir proporcionāls vienības operatoram, un aprēķinos to var neņemt vērā. Supersīkstruktūras mijiedarbības operators \hat{H}_F sīkāk tiks aplūkots nodaļā 2.6. Atoma un ārēja elektromagnētiskā lauka mijiedarbību var aplūkot atoma lauka lektrisko un magnētisko multipolu izvirzījumā. Tā kā darba ietvaros tiks aplūkota tikai atoma elektriskā dipola mijiedarbība ar ārējo lauku, tad šādā tuvinājumā atoma un ārēja lauka mijiedarbības operatoru apzīmē: \hat{V} ,

$$\hat{H}_{ext} = \hat{V} + \dots \approx \hat{V} \quad (2.4.2)$$

Detalizēti atoma un mainīga elektriskā lauka mijiedarbība aplūkota nodaļā 4.

2.5 Izolēta atoma Hamiltona operators bez supersīkstruktūras mijiedarbības

Analizējot sistēmu, kurā pastāv iekšējās un ārējās mijiedarbības, ir lietderīgi vispirms sistēmas aprakstā iekļaut spēcīgākās, un tikai tad vājākās mijiedarbības. Tā kā šī darba ietvaros interesējos par diviem efektiem - atoma mijiedarbību ar ārējo lauku un supersīkstruktūras sašķelšanos, veicot analīzi, nepieciešams salīdzināt abu mijiedarbību enerģijas. Ja supersīkstruktūras mijiedarbība ir spēcīgāka, nekā mijiedarbība ar ārējo lauku, tad jāuzskata, ka ārējā mijiedarbība perturbē supersīkstruktūras līmeņus, bet, ja mijiedarbība ar ārējo lauku ir spēcīgāka, tad jāaplūko, kā supersīkstruktūras mijiedarbība izmaina ārējā lauka perturbētos sīkstruktūras līmeņus. Tā kā mijiedarbību enerģiju salīdzināšanai nepieciešams veikt daudzus aprēķinus, vispirms aplūkošu elektronu enerģijas operatoru \hat{H}_{B0} , kas iekļauj visas atoma iekšējās mijiedarbības līdz sīkstruktūras mijiedarbībai.

Šajā darbā tiks aplūkoti tādi atomi, kurus labā tuvinājumā var uzskatīt par divu līmeņu sistēmām, tādēļ sīkstruktūras līmeņa identifikatoram var piešķirt iespējamās vērtības, $\eta = g, e$. Stāvoklim $\eta = g$ ir zemākā enerģija E_g , un to sauc par sistēmas pamatstāvokli. Stāvokļa $\eta = e$ enerģija E_e ir par $\Delta E = \hbar\omega_0$ lielāka, nekā pamata stāvokļa enerģija. Šo stāvokli sauc par ierosināto stāvokli. Ja sistēmā ir nepieciešams iekļaut vēl trešo stāvokli, tad tam $\eta = f$, bet šī stāvokļa enerģijas vērtība E_f tiks norādīta atsevišķi. Veicot turpmākus aprēķinus, būs noderīgi atcerēties, ka enerģijas skalas nulles līmeni var izvēlēties patvaļīgi.

Ņemot vērā, ka šajā darbā tiek aplūkoti atoma līmeņi, starp kuriem var notikt elektroniskās pārejas elektriskā dipola tuvinājumā, tad pēc noklusējuma tiek uzskatīts, ka vienmēr $\eta = g$ un $\eta = e$ atbilstošie kvantu skaitļi ir izvēlēti tā, ka starp līmeņiem $|g\rangle$ un $|e\rangle$ šādas pārejas ir atļautas.

Lai atrastu izolēta atoma enerģijas īpašstāvokļus, nepieciešams atrisināt no laika neatkarīgo Šrēdingera vienādojumu

$$\hat{H}_{B0}|\eta m_J m_I\rangle = E_\eta|\eta m_J m_I\rangle \quad (2.5.1)$$

Ņemot vērā, ka sīkstruktūras līmeņi ir deģenerēti pēc m_J, m_I , var lietot arī īsāku pierakstu,

$$\hat{H}_{B0}|\eta\rangle = E_\eta|\eta\rangle \quad (2.5.2)$$

Parametra η definētajā bāzē izolēta atoma Hamiltona operators ir diagonāls

$$\hat{H}_{B0} = \sum_{\eta} |\eta\rangle E_\eta \langle \eta| \quad (2.5.3)$$

2.6 Supersīkstruktūras mijiedarbība

Spektrālīniju supersīkstruktūras rašanos saista ar diviem neatkarīgiem efektiem - izotopisko efektu un kodola spina ietekmi.

Izotopiskais efekts. Daudziem elementiem dabā ir sastopami vairāki izotopi - atomi ar vienādu protonu skaitu, bet atšķirīgu neitronu skaitu kodolā. Tādēļ atšķirīgu izotopu atomos elektronu īpašstāvokļu enerģijas nedaudz atšķiras, ko var novērot kā elektroniskajām pārejām atbilstošo spektrālīniju sašķelšanos dažās komponentēs.

Kodola spina ietekme. Spektrālīniju sašķelšanās supersīkstruktūrā tiek novērota arī, ja tiek uzņemts spektrs elementam, kuram vērā ņemamā daudzumā dabā sastopams tikai viens izotops [13]. Šo efektu iespējams izskaidrot, ja tiek ņemta vērā kodola spina un elektrona savstarpējā mijiedarbība. Šajā darbā tiks aplūkots tikai šis supersīkstruktūras veidošanās efekts.

No atoma kodola kvantu mehāniskās dabas izriet, ka tam var piemist nenulles elektriskā multipola momenti ar kārtu $k = 0, 2, 4, \dots$ un magnētiskā multipola momenti ar kārtu $k = 1, 3, 5, \dots$ [14]. Parasti supersīkstruktūras mijiedarbības raksturošanai ir pilnīgi pietiekami ņemt vērā tikai pirmo nenulles locekli multipolu izvirzījumā, jo supersīkstruktūras mijiedarbību enerģija strauji samazinās, palielinoties multipola momenta kārtai [14].

Atbilstoši iepriekš ieviestajiem atoma enerģijas līmeņu apzīmējumiem, sistēmas īpašvektorus operatoru $\hat{\mathbf{F}}, \hat{\mathbf{F}}_z$ definētajā bāzē apzīmē:

$$|\Psi\rangle = |\eta F_\eta m_F\rangle \quad (2.6.1)$$

Pāreju no $\hat{\mathbf{J}}_z, \hat{\mathbf{I}}_z$ īpašstāvokļu bāzes uz $\hat{\mathbf{F}}, \hat{\mathbf{F}}_z$ īpašstāvokļu bāzi var veikt šādi:

$$|\Psi\rangle = |\eta F_\eta m_F\rangle = \sum_{m_I, m_J} \langle J_\eta m_J I m_I | F_\eta m_F \rangle |\eta m_J m_I\rangle \quad (2.6.2)$$

$$\langle \Psi | = \langle \eta F_\eta m_F | = \sum_{m_I, m_J} \langle F_\eta m_F | J_\eta m_J I m_I \rangle \langle \eta m_J m_I | \quad (2.6.3)$$

Šeit $\langle J_\eta m_J, I m_I | F_\eta m_F \rangle$ un $\langle F_\eta m_F | J_\eta m_J, I m_I \rangle$ ir Klebša - Gordāna koeficienti.

Supersīkstruktūras mijiedarbības enerģiju $\hat{\mathbf{F}}$ īpašstāvokļiem var aprēķināt, izmantojot formulu [14, eq. 22.29]. Tā kā šajā darbā pieņemtajos apzīmējumos parametrs η viennozīmīgi nosaka līmeņa kvantu skaitli J , bet kodola spina kvantu skaitlis ir raksturīgs aplūkotajam elementa izotopam, supersīkstruktūras mijiedarbības enerģiju labā tuvinājumā var pierakstīt kā divu argumentu funkciju::

$$\Delta E(\eta, I, F_\eta) \approx \frac{A_\eta}{2} K - B_\eta \left[\frac{(I+1)(J_\eta+1)}{2(2I-1)(2J_\eta-1)} - \frac{2K(K+1)}{8I(2I-1)(2J_\eta-1)} \right] \quad (2.6.4)$$

Šeit $K = F_\eta(F_\eta+1) - I(I+1) - J_\eta(J_\eta+1)$, bet konstantes A_η, B_η raksturo kodola un elektrona mijiedarbību. Konstanti A_η sauc par magnētiskā dipola konstanti, bet B_η - par elektriskā kvadrupola konstanti. Šos lielumus var noteikt eksperimentāli, un biežāk aplūkotajām atomu pārejām tas ir labi zināms lielums [15]. Pie tam gadījumos, kad $I = \frac{1}{2}$ vai $J_\eta = \frac{1}{2}$ elektriskā kvadrupola konstante B_η ir vienāda ar nulli.

Kā jau sagaidāms, $\hat{\mathbf{F}}$ īpašstāvokļu bāzē supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltona

operators ir diagonāls,

$$\hat{H}_F = \sum_{\eta, F_\eta, m_{F_\eta}} |\eta F_\eta m_{F_\eta}\rangle \Delta E_{F, J_\eta, I} \langle \eta F_\eta m_{F_\eta}| \quad (2.6.5)$$

Izteiksmē (2.6.5) supersīkstruktūras mijiedarbības enerģiju $\Delta E_{F, J, I}$ var aprēķināt pēc patikas precīzi. Šajā darbā mijiedarbības enerģijas skaitlisko vērtību iegūšanai tiks izmantota aptuvenā izteiksme (2.6.4). Līdz ar to:

$$\Delta E_{F, J_\eta, I} \approx \Delta E(\eta, I, F_\eta) \quad (2.6.6)$$

$$\hat{H}_F \approx \sum_{\eta, F_\eta, m_{F_\eta}} |\eta F_\eta m_{F_\eta}\rangle \Delta E(\eta, I, F_\eta) \langle \eta F_\eta m_{F_\eta}| \quad (2.6.7)$$

Lai salīdzinātu supersīkstruktūras mijiedarbību un atoma mijiedarbību ar ārēju lauku, ir nepieciešams iegūt dažas supersīkstruktūras mijiedarbību raksturojošas enerģijas vērtības. Vispirms jānovērtē, cik liela ir lielākā supersīkstruktūras mijiedarbības izraisītā sašķelšanās starp \hat{F} īpašstāvokļiem. Izmantojot izteiksmi (2.6.4), iegūst, ka

$$\begin{aligned} E_{F \max} &= \Delta E(\eta, I, I + J_\eta) - \Delta E(\eta, I, |I - J_\eta|) = \\ &= \begin{cases} A_\eta I(2J_\eta + 1) - B_\eta \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2J_\eta - 1} \right) & , \text{ ja } J_\eta > I \\ A_\eta \frac{(I+J_\eta)(I+J_\eta+1)}{2} - B_\eta \frac{(I+J_\eta)(I+J_\eta+1)(I+J_\eta-1)}{4I(2I-1)(2J_\eta-1)} & , \text{ ja } J_\eta = I \\ A_\eta J_\eta(2I + 1) + B_\eta \frac{J_\eta(2I+1)}{2I(2I-1)} & , \text{ ja } J_\eta < I \end{cases} \end{aligned} \quad (2.6.8)$$

Otra supersīkstruktūras mijiedarbību raksturojošā enerģija ir mazākais attālums starp \hat{F} īpašstāvokļiem - attālums enerģijas skalā starp līmeņiem F un $F - 1$:

$$\begin{aligned} E_{F \min} &= \Delta E(\eta, I, F_\eta) - \Delta E(\eta, I, F_\eta - 1) = \\ &= A_\eta F_\eta + B_\eta \frac{F_\eta(2F_\eta^2 + 1 - 2I(I + 1) - 2J_\eta(J_\eta + 1))}{2I(2I - 1)(2J_\eta - 1)} \end{aligned} \quad (2.6.9)$$

3 ELEKTROMAGNĒTISKAIS STAROJUMS

Labi zināms, ka jebkuru dabā sastopamo atomu veido pozitīvi lādēts kodols un tā radītajā laukā stabilus enerģijas stāvokļus ieņēmuši negatīvi lādēti elektroni. Lādētu daļiņu kustību visefektīvāk var ietekmēt, izmantojot elektromagnētisko mijiedarbību. Šajā darbā tiks aplūkots gadījums, kad uz atomu iedarbojas elektromagnētiskais starojums.

3.1 Elektromagnētiskā viļņa matemātiskais apraksts

No elektromagnētisma kursa ir zināms, ka laikā mainīgs elektriskais lauks telpā ap sevi rada magnētisko lauku, kas perpendikulārs elektriskā lauka izmaiņas virzienam, un otrādi. Atrisinot Maksvela vienādojumus ceļojošam harmoniskam un monohromatiskam elektromagnētiskajam vilnim, kas izplatās vektora \mathbf{k} virzienā, iegūst, ka šādā vilnī elektriskā lauka intensitātes vektors telpas punktā \mathbf{r} mainās pēc likuma [16, eq 4.11]:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \text{Re} [\check{\epsilon} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}], \quad (3.1.1)$$

savukārt magnētiskais lauks \mathcal{B} mainās vienā fāzē ar elektrisko lauku. Viļņa svārstību leņķisko frekvenci apzīmē ar ω , elektriskā lauka amplitūdu - ar \mathcal{E}_0 , bet elektriskā lauka vektora virzienu norāda vienības vektors $\check{\epsilon}$, ko sauc par elektriskā lauka polarizācijas vektoru. Viļņa vektora absolūtā vērtība ir saistīta ar viļņa garumu, $|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$. Elektriskais un magnētiskais lauks ir savstarpēji perpendikulāri, bet to vektoriālais reizinājums $\mathcal{E} \times \mathcal{B}$ ir paralēls viļņa vektoram \mathbf{k} un norāda viļņa izplatīšanās virzienu.

Tā kā ārējā lauka un atoma elektriskā dipola mijiedarbības ir ievērojami spēcīgākas par magnētiskā dipola un pārējo multipolu mijiedarbībām [17, ch. 4.4], tad labā tuvinājumā var uzskatīt, ka atoms mijiedarbojas tikai ar viļņa elektriskā lauka komponenti. Mūsdienās spektroskopiskajos novērojumos plaši tiek pielietotas lāzeru tehnoloģijas. Ar cietvielu lāzeriem iespējams iegūt ļoti kolimētu lāzera staru ar jaudu robežās 1 – 100W nepārtraukta starojuma režīmā [18], savukārt ar krāsvielu lāzeriem ir iespējams iegūt starojuma jaudas ar kārtu 1W. Veicot novērojumus sārnu metālu atomu virsskaņas kūļos Latvijas Universitātes Lāzeru centra Molekulāro kūļu laboratorijā, tipiskais atoma kūļa un atbilstoši arī fokusēta ierosinātā lāzera stara rādiuss ir aptuveni 3mm. Ja lāzera starojuma kopējā jauda ir $P = 1W$, tad šādā gadījumā elektriskā lauka amplitūda sasniedz $\mathcal{E}_0 \approx 5 \cdot 10^3 \frac{V}{m}$, tāpēc ar lāzera lauku ierosinātie fizikālie efekti šādos gadījumos uzskatāmi par spēcīga elektriskā lauka efektiem.

3.2 Elektromagnētiskā viļņa polarizācija

Monohromatiskam elektromagnētiskajam vilnim piemīt īpašība, ko sauc par polarizāciju - ir iespējams noteikt viļņa elektriskā lauka vektora orientāciju jebkurā laika momentā. Spektroskopijā ir pieņemts par elektromagnētiskā viļņa polarizācijas virzienu izvēlēties elektriskā lauka virzienu. Plakni, kuru nosaka elektriskais lauks un viļņa izplatīšanās virziens, sauc par elektromagnētiskā viļņa polarizācijas plakni. Tā kā viļņa polarizācijas plakne laikā var

mainīties, t.i. rotēt ap viļņa izplatīšanās virzienu attiecībā pret nekustīgu laboratorijas atskaites sistēmu, tad vispārīgā gadījumā monohromatisku vilni sauc par eliptiski polarizētu, jo elektriskā lauka vektora gals plaknē, ko nosaka elektriskā un magnētiskā lauka vektori, apraksta eliptisku trajektoriju. Jebkuras polarizācijas elektromagnētisko vilni var sadalīt trīs komponentēs - lineāri, pa labi un pa kreisi cirkulāri polarizētā daļā [9].

Lineāri polarizēta viļņa polarizācijas plakne ir nekustīga attiecībā pret nekustīgo laboratorijas atskaites sistēmu, savukārt cirkulāras polarizācijas gadījumā elektriskā lauka vektora modulis laikā nemainās, bet polarizācijas plakne viena svārstību perioda laikā veic vienu pilnu apgriezīgu ap viļņa izplatīšanās virzienu. Diemžēl fizikā nav vienotas pārlicības, kā definēt cirkulāri polarizēta viļņa polarizācijas plaknes rotācijas virzienu, tādēļ šajā darbā šo jēdzienu definīcijas tiks saskaņotas ar literatūras avotu [9]. Elektromagnētiskā viļņa polarizācijas plakni aplūko nekustīgā un no viļņa izplatīšanās virziena neatkarīgā laboratorijas koordinātu sistēmā. Ja nekustīgo koordinātu sistēmu var pagriezt tā, ka vilnis izplatās xy plaknē, bet elektriskā lauka vektors vienmēr paralēls z asij, tad vilni saukšu par lineāri jeb π polarizētu. Ja nekustīgo koordinātu sistēmu var pagriezt tā, ka vilnis izplatās z ass pozitīvajā virzienā, bet elektriskā lauka vektors rotē xy plaknē, tad vilni sauc par cirkulāri jeb σ polarizētu. Ja raugoties no pozitīvā z ass virziena elektriskā lauka vektors rotē pulksteņa rādītāju kustības virzienā, tad vilni sauc par σ^- polarizētu, bet, ja elektriskā lauka vektors rotē pretēji pulksteņa rādītāju kustības virzienam, tad vilni sauc par σ^+ polarizētu. Ar cirkulāru elektromagnētiskā lauka polarizāciju var saistīt elektromagnētiskā lauka fotonu pārnesto leņķisko momentu [9, ch 6.3]. Ievērojot, ka lineāri polarizētu elektromagnētisko vilni var uzskatīt par vienādas intensitātes pretēji cirkulāri polarizētu viļņu superpozīciju, arī šāda lauka fotoniem jāpiemīt leņķiskajam momentam. Viena elektromagnētiskā lauka fotona pārnesto leņķisko momentu raksturo kvantu skaitlis $J = 1$, savukārt katrai lauka polarizācijai atbilst atšķirīga leņķiskā momenta projekcijas uz z asi kvantu skaitļa m_J vērtība. σ^+ polarizētiem fotoniem tā ir $m_J = +1$, σ^- polarizētiem fotoniem $m_J = -1$, bet π polarizētiem fotoniem $m_J = 0$.

Ņemot vērā, ka cirkulāri polarizētas gaismas gadījumā polarizācijas vektors $\check{\epsilon}$ apraksta rotējošu elektrisko lauku, tad dekartā ortogonālajā koordinātu sistēmā polarizācijas vektora komponentes ir kompleksi skaitļi, un līdz ar to arī pats polarizācijas vektors ir komplekss. Šādā gadījumā patvaļīgas (eliptiskas) polarizācijas elektromagnētisko vilni var pierakstīt:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \operatorname{Re} [\check{\epsilon} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}] = \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 (\check{\epsilon} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \check{\epsilon}^* e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}) \quad (3.2.1)$$

Nodaļā 1.1. tika definēta sfēriskā bāze. Sfēriskā bāze veido specifisku koordinātu sistēmu, kurā triju pamata polarizāciju - π, σ^\pm - viļņu polarizācijas vektora komponentes ir reāli skaitļi. Jebkurš vektors ir pierakstāms, uzdodot tā koordinātes atbilstošajā bāzē,

$$\mathbf{v} = (v^{+1}, v^0, v^{-1}) \quad (3.2.2)$$

Tad trim pamata polarizācijām atbilstošie polarizācijas vektori pierakstāmi šādi:

$$\tilde{\varepsilon}_{\sigma^+}^{\zeta} = (1,0,0) \quad (3.2.3)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{\pi}^{\zeta} = (0,1,0) \quad (3.2.4)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{\sigma^-}^{\zeta} = (0,0,1) \quad (3.2.5)$$

IETĒRPTO STĀVOKĻU SUPERSĪKSTRUKTŪRAS TEORIJA

4 ATOMA UN ELEKTROMAGNĒTISKĀ STAROJUMA MIJIEDARBĪBAS TUVINĀTS APRAKSTS

4.1 Laikā mainīgā elektriskajā laukā ievietota atoma pilnā enerģija

Aplūkojot elektrona pārejas starp dažādiem stacionārajiem stāvokļiem atomā, izrādās, ka ikvienai šādai pārejai piemīt noteikti elektrisko un magnētisko multipolu momenti, savukārt jebkura stacionārā stāvokļa visi multipolu momenti ir vienādi ar nulli stāvokļu simetrijas īpašību dēļ [19]. Līdz ar to, lai precīzi aprēķinātu noteiktas pārejas varbūtību ārējā laikā mainīga elektromagnētiskā lauka ietekmē, jāņem vērā visu šo multipolu un ārējā lauka mijiedarbības enerģijas. Ja elektrona pāreju starp diviem stacionārajiem stāvokļiem atļauj izvēles likumi elektriskā dipola pārejām, tad elektriskā dipola un ārējā elektriskā lauka mijiedarbības enerģija ir daudz lielāka par magnētisko un augstāku kārtu elektrisko multipolu mijiedarbības enerģijām [17, ch. 4.4], līdz ar to labā tuvinājumā atļautajām elektriskā dipola pārejām var ņemt vērā tikai atoma pārejas elektriskā dipola momenta un ārējā elektriskā lauka (3.2.1) mijiedarbības enerģiju.

Aplūkojot atoma un ārējā elektriskā lauka mijiedarbību, izrādās, ka elektromagnētiskā lauka matemātiskajā aprakstā (3.2.1), kas uzdots ar atoma masas centru saistītajā koordinātu sistēmā, locekļa $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ izvirzījuma pakāpju rindā locekļi atbilst dažādu kārtu elektrisko multipolu mijiedarbībām, un elektriskā dipola mijiedarbībai atbilst tikai izvirzījuma pirmais loceklis [20]. Līdz ar to, atomā aplūkojot tikai elektriskā dipola pārejas šajā izvirzījumā atmet augstāku kārtu locekļus,

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 1 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + \dots \approx 1 \quad (4.1.1)$$

Tuvinājumu, kurā tiek uzskatīts, ka atoms uz ārējā elektriskā lauka iedarbību reaģē kā elektriskais dipols, sauc par elektriskā dipola tuvinājumu [20]. Elektriskā dipola tuvinājumā elektriskā lauka izteiksmi (3.2.1) var vienkāršot:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}\mathcal{E}_0(\check{\epsilon}e^{-i\omega t} + \check{\epsilon}^*e^{i\omega t}) \quad (4.1.2)$$

Šis tuvinājums ir pielietojams gadījumos, kad atoma raksturīgais izmērs $a \propto 10^{-10}m$ ir daudz mazāks par atoma ierosināšanai izmantotā elektriskā lauka viļņa garumu (redzamajai gaismai $\lambda \propto 10^{-7}m$) un ārējā elektriskā lauka intensitāte ir mazāka, nekā atoma iekšējā elektriskā lauka intensitāte ($\propto 10^{10}V/m$) [20].

Enerģiju, ko atoms - elektriskais dipols - iegūst, to ievietojot ārējā elektriskajā laukā,

klasiskajā fizkā var aprēķināt šādi:

$$E = \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} \quad (4.1.3)$$

Šeit $\mathbf{d} = -|e|\mathbf{r}$ - elektriskā dipola moments, $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ - elektriskā lauka vektors. Tā kā atoms ir kvantu mehānisks objekts, tā matemātiskajā aprakstā fizikālajiem lielumiem atbilst operatori. Elektronā pārejas elektriskā dipola moments ir vektoroperators, un tā matricas elementus formāli pieraksta:

$$d_{ij} = \langle \Psi_i | \hat{\mathbf{d}} | \Psi_j \rangle \quad (4.1.4)$$

Savukārt atoma un elektriskā lauka mijiedarbības enerģiju raksturo mijiedarbības Hamiltona operators \hat{V} , kura matricas elementus aprēķina šādi [9, sec. 7.3.2]:

$$\langle \Psi_i | \hat{V} | \Psi_j \rangle = \langle \Psi_i | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} | \Psi_j \rangle = \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 \left[\langle \Psi_i | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} | \Psi_j \rangle e^{-i\omega t} + \langle \Psi_i | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}^* | \Psi_j \rangle e^{+i\omega t} \right] \quad (4.1.5)$$

Izrakstot vektoru skalāros reizinājumus sfēriskajās komponentēs, atbilstoši (1.1.13) un (1.1.14), iegūst:

$$\hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} = \sum_{q=-1}^1 d_q \varepsilon^q \quad (4.1.6)$$

$$\hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}^* = \sum_{q=-1}^1 d_q \varepsilon_q^* \quad (4.1.7)$$

Izmantojot šīs sakarības, Hamiltoniāna matricas elementa aprēķināšanas izteiksmē (4.1.5) integrāļus var pārveidot:

$$\langle \Psi_i | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} | \Psi_j \rangle = \sum_q \varepsilon^q \langle \Psi_i | d_q | \Psi_j \rangle \quad (4.1.8)$$

$$\langle \Psi_i | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}^* | \Psi_j \rangle = \sum_q \varepsilon_q^* \langle \Psi_i | d_q | \Psi_j \rangle \quad (4.1.9)$$

Izmantojot Vignera - Ekarta teorēmu (1.3.2), iegūst [9, eq. 7.45]:

$$\langle \eta' m'_J | d_q | \eta m_J \rangle = (-1)^{J'-m'_J} \begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ -m'_J & q & m_J \end{pmatrix} \langle \eta' || d || \eta \rangle \quad (4.1.10)$$

Līdz ar to mijiedarbības Hamiltoniāna matricielementus var aprēķināt šādi:

$$\begin{aligned} \langle \eta_i m_{J,i} | \hat{V} | \eta_j m_{J,j} \rangle &= V(\eta_i, m_{J,i}, \eta_j, m_{J,j}) = \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 \sum_{q=-1}^1 [\varepsilon^q e^{-i\omega t} + \varepsilon_q^* e^{+i\omega t}] (-1)^{J_i - m_{J,i}} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ -m_{J,i} & q & m_{J,j} \end{pmatrix} \langle \eta_i || d || \eta_j \rangle \end{aligned} \quad (4.1.11)$$

No standarta kursa kvantu mehānikā ir zināms, ka operatoram var atbilst kāds fizikāls

lielums tikai tad, ja operatora īpašvērtības ir reāli skaitļi. Tādēļ visi fizikālo lielumu operatori, arī atoma un ārējā lauka mijiedarbības enerģiju aprakstošais Hamiltona operators \hat{V} , ir Ermita operatori. Līdz ar to mijiedarbības Hamiltoniānim \hat{V} jābūt spēkā sakarībai:

$$\langle \eta_j m_{J,j} | \hat{V} | \eta_i m_{J,i} \rangle = \left(\langle \eta_i m_{J,i} | \hat{V} | \eta_j m_{J,j} \rangle \right)^* \quad (4.1.12)$$

Par to, ka vienādība (4.1.12) ir spēkā, var pārliecināties, izmantojot Vignera 3j simbola un reducēto matricas elementu īpašības.

$$\begin{aligned} \langle \eta_j m_{J,j} | \hat{V} | \eta_i m_{J,i} \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 \sum_{q=-1}^1 [\varepsilon^q e^{-i\omega t} + \varepsilon_q^* e^{+i\omega t}] (-1)^{J_j - m_{J,j}} \begin{pmatrix} J_j & 1 & J_i \\ -m_{J,j} & q & m_{J,i} \end{pmatrix} \langle \eta_j || d || \eta_i \rangle \end{aligned} \quad (4.1.13)$$

Lai varētu salīdzināt izteiksmes (4.1.11) un (4.1.13), vispirms jāpārveido Vignera 3-j simbolu atbilstoši tā simetrijas īpašībām (1.2.13), (1.2.14) un (1.2.15):

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} J_j & 1 & J_i \\ -m_{J,j} & q & m_{J,i} \end{pmatrix} &= (-1)^{J_j + 1 + J_i} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ m_{J,i} & q & -m_{J,j} \end{pmatrix} = \\ &= (-1)^{2(J_j + 1 + J_i)} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ -m_{J,i} & -q & m_{J,j} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ -m_{J,i} & -q & m_{J,j} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.1.14)$$

Savukārt reducēto matricas elementu var pārveidot, izmantojot to īpašību [9, eq. 3.120]:

$$\langle \eta_j || d || \eta_i \rangle = (-1)^{J_j - J_i} \langle \eta_i || d || \eta_j \rangle^* \quad (4.1.15)$$

Šo pārveidojumu rezultātā izteiksme (4.1.13) kļūst:

$$\begin{aligned} \langle \eta_j m_{J,j} | \hat{V} | \eta_i m_{J,i} \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 \sum_{q=-1}^1 [\varepsilon^q e^{-i\omega t} + \varepsilon_q^* e^{+i\omega t}] (-1)^{J_j - m_{J,j} + J_j - J_i} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ -m_{J,i} & -q & m_{J,j} \end{pmatrix} \langle \eta_i || d || \eta_j \rangle^* = \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 \sum_{q=-1}^1 [\varepsilon^{-q} e^{-i\omega t} + \varepsilon_{-q}^* e^{+i\omega t}] (-1)^{J_j - m_{J,j} + J_j - J_i} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ -m_{J,i} & q & m_{J,j} \end{pmatrix} \langle \eta_i || d || \eta_j \rangle^* \end{aligned} \quad (4.1.16)$$

Izmantojot kompleksu vektoru sfērisko komponentu īpašību (1.1.10):

$$\varepsilon^{-q} = (-1)^{-q} \varepsilon_q \quad (4.1.17)$$

$$\varepsilon_{-q}^* = (-1)^{-q} \varepsilon_q^* \quad (4.1.18)$$

izteiksmē (4.1.16), iegūst:

$$\begin{aligned} \langle \eta_j m_{J,j} | \hat{V} | \eta_i m_{J,i} \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 \sum_{q=-1}^1 [\varepsilon_q e^{-i\omega t} + \varepsilon^{*q} e^{+i\omega t}] (-1)^{J_j - m_{J,j} + J_j - J_i - q} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ -m_{J,i} & q & m_{J,j} \end{pmatrix} \langle \eta_i || d || \eta_j \rangle^* \end{aligned} \quad (4.1.19)$$

Tālākos pārveidojumos noderīgi atcerēties, ka Vignera 3-j simbola vērtība vienmēr ir nulle, ja nav spēkā sakarība

$$m_{J,j} + q - m_{J,i} = 0 \quad (4.1.20)$$

Līdz ar to šai sakarībai jābūt spēkā visiem Hamiltoniāņa matricas elementiem, kas nav nulles. Pie tam ir zināms, ka atļautajām elektriskā dipola pārejām ir spēkā izvēles likums:

$$J_i - J_j = \Delta J = 0, \pm 1 \quad (4.1.21)$$

Izmantojot (4.1.20) un (4.1.21), izteiksmē (4.1.19) var veikt šādus pārveidojumus:

$$\begin{aligned} (-1)^{J_j - m_{J,j} + J_j - J_i - q} &= (-1)^{J_j - m_{J,i} + J_j - J_i} = (-1)^{J_j - m_{J,i} - \Delta J} = \\ &= (-1)^{J_i - \Delta J - m_{J,i} - \Delta J} = (-1)^{J_i - m_{J,i} - 2\Delta J} = (-1)^{J_i - m_{J,i}} \end{aligned} \quad (4.1.22)$$

Tam atbilstoši pārveidojot (4.1.19), iegūst

$$\begin{aligned} \langle \eta_j m_{J,j} | \hat{V} | \eta_i m_{J,i} \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 \sum_{q=-1}^1 [\varepsilon_q e^{-i\omega t} + \varepsilon^{*q} e^{+i\omega t}] (-1)^{J_i - m_{J,i}} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ -m_{J,i} & q & m_{J,j} \end{pmatrix} \langle \eta_i || d || \eta_j \rangle^* \end{aligned} \quad (4.1.23)$$

Ievērojot, ka

$$[\varepsilon_q e^{-i\omega t} + \varepsilon^{*q} e^{+i\omega t}] = [\varepsilon^{*q} e^{+i\omega t} + \varepsilon_q e^{-i\omega t}] = [\varepsilon^q e^{-i\omega t} + \varepsilon_q^* e^{+i\omega t}]^* \quad (4.1.24)$$

viegli redzēt, ka patiešām izteiksme (4.1.12) ir spēkā.

Aplūkojot iegūto pilno sistēmas Hamiltoniāni

$$\hat{H}_B = \hat{H}_{B0} + \hat{V} \quad (4.1.25)$$

redzams, ka tas laikā mainās, un, lai uzzinātu sistēmas stāvokli laika momentā t , nepieciešams atrisināt nestacionāro Šrēdingera vienādojumu:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}_B |\Psi\rangle \quad (4.1.26)$$

Ņemot vērā faktu, ka ārējais elektromagnētiskais lauks neierosina pārejas starp viena

enerģijas līmeņa apakšlīmeņiem, un ir spēkā sakarība (4.1.12), operatoru ārējā elektromagnētiskā lauka iedarbībai uz atomu var rakstīt formā:

$$\hat{V} = \sum_{m_{J,g}, m_{J,e}} (|g m_{J,g}\rangle V(g, m_{J,g}, e, m_{J,e}) \langle e m_{J,e}| + |e m_{J,e}\rangle V^*(g, m_{J,g}, e, m_{J,e}) \langle g m_{J,g}|) \quad (4.1.27)$$

Acīmredzot atoma un ārējā elektriskā lauka mijiedarbības Hamiltoniāni veido divas savā starpā Ermita saistītas daļas,

$$\hat{V} = \hat{V}_{ge} + \hat{V}_{ge}^\dagger \quad (4.1.28)$$

$$\hat{V}_{ge} = \sum_{m_{J,g}, m_{J,e}} |g m_{J,g}\rangle V(g, m_{J,g}, e, m_{J,e}) \langle e m_{J,e}|, \quad (4.1.29)$$

un atoma un ārējā elektriskā lauka mijiedarbības aprakstam ir pilnīgi pietiekami aprēķināt tikai operatora \hat{V}_{ge} elementus.

4.2 Atoma un lineāri polarizēta ārējā lauka mijiedarbības Hamiltoniānis

Nodaļā 4.1. tika noskaidrots, kā aprēķināmi atoma mijiedarbības ar ārēju lauku Hamiltoniāņa matricas elementi vispārīgas ārējā lauka polarizācijas gadījumā. Darba ietvaros tiks aplūkota atoma mijiedarbība tikai ar lineāri polarizētu elektromagnētisko starojumu, tāpēc šajā nodaļā un turpmāk darbā tiks aplūkots atoma un ārējā lauka mijiedarbības Hamiltoniānis \hat{V} tikai šim speciālgadījumam.

Lineāri polarizēta viļņa polarizācijas vektora komponentes sfēriskajā bāzē ir

$$\check{\epsilon}_\pi = (0, 1, 0), \quad (4.2.1)$$

tādēļ mijiedarbības Hamiltoniāņa \hat{V} matricas elementi ir:

$$\begin{aligned} V(\eta_i, m_{J,i}, \eta_j, m_{J,j}) &= \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 [\varepsilon^0 e^{-i\omega t} + \varepsilon_0^* e^{+i\omega t}] (-1)^{J_i - m_{J,i}} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ -m_{J,i} & 0 & m_{J,j} \end{pmatrix} \langle \eta_i \| d \| \eta_j \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 [e^{-i\omega t} + e^{+i\omega t}] (-1)^{J_i - m_{J,i}} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ -m_{J,i} & 0 & m_{J,j} \end{pmatrix} \langle \eta_i \| d \| \eta_j \rangle \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

Šeit ieviests apzīmējums $V(\eta_i, m_{J,i}, \eta_j, m_{J,j}) \equiv \langle \eta_i m_{J,i} | \hat{V} | \eta_j m_{J,j} \rangle$. Atbilstoši (4.1.28) un (4.1.29), ir pilnīgi pietiekami aplūkot tikai mijiedarbības operatora daļu:

$$\begin{aligned} V(g, m_{J,g}, e, m_{J,e}) &= \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 [e^{-i\omega t} + e^{+i\omega t}] (-1)^{J_g - m_{J,g}} \begin{pmatrix} J_g & 1 & J_e \\ -m_{J,g} & 0 & m_{J,e} \end{pmatrix} \langle g \| d \| e \rangle \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

Izmantojot Vignera 3j simbola īpašību (1.2.11),

$$\begin{aligned} -m_{J,g} + 0 &= -m_{J,e} \\ m_{J,g} &= m_{J,e} \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

Iegūst, ka lineāri polarizēts ārējais lauks izraisa pārejas tikai starp $\eta = g$ un $\eta = e$ stāvokļiem ar vienādiem kvantu skaitļiem m_J , un izteiskmi (4.2.3) var vienkāršot, ņemot vērā, ka vienīgie Hamiltoniāņa \hat{V} elementi, kas nav nulles, ir:

$$V_{ge}(m_J) \equiv V(g, m_J, e, m_J) = \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 [e^{-i\omega t} + e^{+i\omega t}] (-1)^{J_g - m_J} \begin{pmatrix} J_g & 1 & J_e \\ -m_J & 0 & m_J \end{pmatrix} \langle g \| d \| e \rangle \quad (4.2.5)$$

Ņemot vērā, ka elektriskā dipola pārejām ir spēkā izvēles likums

$$\Delta J = J_e - J_g = 0, \pm 1, \quad (4.2.6)$$

var aprēķināt funkcijas $V_{ge}(m_J)$ vērtības atsevišķi katram no šiem gadījumiem. Lai izteiksmes padarītu vienkāršākas, pamatstāvokļa un ierosinātā stāvokļa leņķiskos momentus apzīmē šādi:

$$J_g \equiv J \quad (4.2.7)$$

$$J_e = J + \Delta J \quad (4.2.8)$$

Savukārt aprēķinātās funkcijas $V_{ge}(m_J)$ vērtības pie dažādiem ΔJ tiks apzīmētas šādi:

$$V_{ge}(m_J) \equiv \mathcal{T}_{\Delta J}(m_J, t) \quad (4.2.9)$$

Šeit funkcijas arguments t atgādina, ka funkcija $\mathcal{T}_{\Delta J}$ laikā mainās. Aprēķinot šīs funkcijas vērtības, iegūst:

$$\mathcal{T}_0(m_J, t) = \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 [e^{-i\omega t} + e^{+i\omega t}] \frac{m_J}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \langle g \| d \| e \rangle \quad (4.2.10)$$

$$\mathcal{T}_{-1}(m_J, t) = \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 [e^{-i\omega t} + e^{+i\omega t}] \sqrt{\frac{(J-m_J)(J+m_J)}{J(2J-1)(2J+1)}} \langle g \| d \| e \rangle \quad (4.2.11)$$

$$\mathcal{T}_1(m_J, t) = -\frac{1}{2} \mathcal{E}_0 [e^{-i\omega t} + e^{+i\omega t}] \sqrt{\frac{(J-m_J+1)(J+m_J+1)}{(J+1)(2J+1)(2J+3)}} \langle g \| d \| e \rangle \quad (4.2.12)$$

Pie tam visām šīm izteiksmēm ir spēkā nosacījums:

$$m_J \leq J \quad (4.2.13)$$

Svarīgi atcerēties, ka reducētie matricas elementi visos trijos gadījumos ir atšķirīgi!

No laika atkarīgo atoma un ārējā lauka mijiedarbības Hamiltoniāni var pierakstīt formā:

$$\hat{V} = \sum_{m_J} (|g m_J\rangle \mathcal{T}_{\Delta J}(m_J, t) \langle e m_J| + |e m_J\rangle \mathcal{T}_{\Delta J}^*(m_J, t) \langle g m_J|) \quad (4.2.14)$$

4.3 Rotējoša viļņa tuvinājums

Ja nav nepieciešams aplūkot sistēmas evolūciju uzreiz pēc ārējā lauka ieslēgšanas vai izslēgšanas, bet tikai par gadījumu, kad ārējais lauks iedarbojas uz atomu samērā ilgi ($t_{mijied} \gg 1/\omega_{lauks}$), ar rotējoša viļņa tuvinājuma (RVT) palīdzību ir iespējams atbrīvoties no laika atkarības sistēmas Hamiltoniānī.

Nodaļā 4.2. tika noskaidrots, ka lineāri polarizēts elektromagnētiskais starojums savā starpā saista tikai atoma īpaštāvokļu pārus ar vienādiem kvantu skaitļiem m_J , un, tā kā sistēmas atoms - elektromagnētiskais starojums aprakstā netiek iekļauta spontānā emisija, šos stāvokļu pārus var aplūkot kā neatkarīgas divlīmeņu kvantu sistēmas. Tādēļ RVT vispārīgam gadījumam ir parocīgi aplūkot divu līmeņu kvantu sistēmā, kuras īpaštāvokļiem atbilst bāzes vektori $|g\rangle$ un $|e\rangle$ un tiem abiem ir vienāds kvantu skaitlis m_J ,

$$m_{J,g} = m_{J,e} = m_J, \quad (4.3.1)$$

pie tam kvantu skaitļi J_g , J_e , m_J šai sistēmai ir zināmi. Šādas sistēmas pilnais Hamiltona operators ir:

$$\hat{H}_B = \hat{H}_{B0} + \hat{V} = |g\rangle E_g \langle g| + |e\rangle E_e \langle e| + |g\rangle \mathcal{T}_{\Delta J}(m_J, t) \langle e| + |e\rangle \mathcal{T}_{\Delta J}^*(m_J, t) \langle g| \quad (4.3.2)$$

Tā kā sistēmas fizikālā daba nav atkarīga no bāzes vektoru izvēles, vienmēr var izvēlēties tādus bāzes vektorus, kurus ar sākotnēji izvēlētajiem sasaita tāda unitāra transformācija \hat{U} , ka:

$$\hat{U}|g\rangle = |\tilde{g}\rangle \quad (4.3.3)$$

$$\hat{U}|e\rangle = |\tilde{e}\rangle \quad (4.3.4)$$

Sākotnējā koordinātu sistēmā sistēmas stāvokli jebkurā laika momentā apraksta viļņu funkcija

$$|\Psi(t)\rangle = c_g(t)|g\rangle + c_e(t)|e\rangle \quad (4.3.5)$$

$$c_g(t) = \langle g|\Psi(t)\rangle \quad (4.3.6)$$

$$c_e(t) = \langle e|\Psi(t)\rangle \quad (4.3.7)$$

un tās evolūciju laikā nosaka Šrēdingera vienādojums (4.1.26):

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}_B |\Psi\rangle \quad (4.3.8)$$

Tā kā, izvēloties jaunus bāzes vektorus, sistēmas fizikālais apraksts nemainās, tad arī sistēmas

pilnā viļņu funkcija nav mainījusies:

$$|\Psi(t)\rangle = \tilde{c}_g(t)|\tilde{g}\rangle + \tilde{c}_e(t)|\tilde{e}\rangle \quad (4.3.9)$$

$$|\tilde{i}\rangle = \hat{U}|i\rangle, i = g; e \quad (4.3.10)$$

$$\tilde{c}_i(t) = \langle \tilde{i} | \Psi(t) \rangle, i = g; e \quad (4.3.11)$$

Koeficientu $\tilde{c}_i(t)$ aprēķināšanas izteiksmi var pārveidot:

$$\tilde{c}_i(t) = \langle \tilde{i} | \Psi(t) \rangle = \langle \hat{U}i | \Psi(t) \rangle = \langle i | \hat{U}^\dagger | \Psi(t) \rangle = \langle i | \tilde{\Psi}(t) \rangle \quad (4.3.12)$$

Šeit ieviests apzīmējums: $|\tilde{\Psi}\rangle = \hat{U}^\dagger |\Psi\rangle$.

Uz sākotnējo viļņu funkciju $|\Psi(t)\rangle$ iedarbojoties ar vienības operatoru, viļņu funkcija nemainās, tādēļ var izmantot unitāra operatora īpašību $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}$, lai iegūtu Šrēdingera vienādojumu jaunajai viļņu funkcijai $|\tilde{\Psi}\rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{U}\hat{U}^\dagger |\Psi\rangle) = \hat{H}_B \hat{U}\hat{U}^\dagger |\Psi\rangle \quad (4.3.13)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{U}|\tilde{\Psi}\rangle) = \hat{H}_B \hat{U}|\tilde{\Psi}\rangle \quad (4.3.14)$$

$$i\hbar \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} |\tilde{\Psi}\rangle + \hat{U} \frac{\partial |\tilde{\Psi}\rangle}{\partial t} \right) = \hat{H}_B \hat{U}|\tilde{\Psi}\rangle \quad (4.3.15)$$

$$i\hbar \left(\hat{U}^{-1} \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} |\tilde{\Psi}\rangle + \hat{U}^{-1} \hat{U} \frac{\partial |\tilde{\Psi}\rangle}{\partial t} \right) = \hat{U}^{-1} \hat{H}_B \hat{U}|\tilde{\Psi}\rangle \quad (4.3.16)$$

Acīmredzot jaunajai viļņu funkcijai Šrēdingera vienādojums ir:

$$i\hbar \frac{\partial |\tilde{\Psi}\rangle}{\partial t} = \hat{H}_B |\tilde{\Psi}\rangle \quad (4.3.17)$$

Šeit ieviests apzīmējums:

$$\hat{H}_B = \hat{U}^{-1} \hat{H}_B \hat{U} - i\hbar \hat{U}^{-1} \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \quad (4.3.18)$$

Svarīgi atcerēties, ka šī formula ir spēkā jebkuram unitāram no laika atkarīgam operatoram \hat{U} .

Analizējot atoma un elektromagnētiskā starojuma mijiedarbību, tiks aplūkotas divu līmeņu sistēmas, kurās katru līmeni veido vairāki deģenerēti apakšlīmeņi. Atbilstoši nodaļā 2.3. ieviestajiem apzīmējumiem šos līmeņus identificē ar ket vektora $|\eta m_{J,\eta}\rangle$ palīdzību. Tādai divlīmeņu sistēmai ir izdevīgi izvēlēties transformāciju \hat{U} :

$$\hat{U} = \sum_{m_{J,g}} |g m_{J,g}\rangle e^{i\omega t} \langle g m_{J,g}| + \sum_{m_{J,e}} |e m_{J,e}\rangle \langle e m_{J,e}| \quad (4.3.19)$$

Šeit ω var izvēlēties vienādu ar ārējā elektromagnētiskā starojuma frekvenci. Pēc šāda likuma

transformētiem bāzes vektoriem atbilstošais sistēmas pilnais Hamiltona operators ir

$$\hat{H}_B = \hat{H}_{B0} + \hat{V} \quad (4.3.20)$$

$$\hat{H}_{B0} = \sum_{m_{J,g}} |g m_{J,g}\rangle (E_g + \hbar\omega) \langle g m_{J,g}| + \sum_{m_{J,e}} |e m_{J,e}\rangle E_e \langle e m_{J,e}| \quad (4.3.21)$$

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \\ &= \sum_{m_{J,g}, m_{J,e}} \left[e^{-i\omega t} |g m_{J,g}\rangle \mathcal{T}_{\Delta J}(m_J, t) \langle e m_{J,e}| + e^{i\omega t} (|g m_{J,g}\rangle \mathcal{T}_{\Delta J}(m_J, t) \langle e m_{J,e}|)^\dagger \right] \end{aligned} \quad (4.3.22)$$

Šeit \hat{H}_{B0} un \hat{V} ir attiecīgi transformētais izolēta atoma Hamiltona operators un transformētais mijiedarbības ar ārējo lauku Hamiltona operators.

Ņemot vērā, ka atbilstoši (4.2.14) aprēķināti mijiedarbības operatora \hat{V} matricas elementi

$$\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J, t) \quad (4.3.23)$$

satur reizinātāju

$$[e^{-i\omega t} + e^{+i\omega t}], \quad (4.3.24)$$

ir acīmredzami, ka operatora \hat{V} atbilstošie matricas elementi

$$\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J, t) e^{-i\omega t} \quad (4.3.25)$$

satur reizinātāju

$$e^{-i\omega t} [e^{-i\omega t} + e^{+i\omega t}] = e^{-2i\omega t} + 1, \quad (4.3.26)$$

savukārt pārējie operatora \hat{V} nenulles matricas elementi satur (4.3.26) kompleksi saistīto lielumu. Atmetot ātri oscilējošajam reizinātājam $e^{-2i\omega t}$ proporcionālo daļu, tiek veikts t. s. rotējoša viļņa tuvinājums (RVT). Tā rezultātā iegūts jauns, no laika tiešā veidā neatkarīgs mijiedarbības Hamiltoniānis \hat{V}_{RVT} , kura nenulles matricas elementi ir:

$$\langle g, m_J | \hat{V}_{RVT} | e, m_J \rangle = \mathcal{T}_{\Delta J}(m_J) \quad (4.3.27)$$

Šeit $\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J)$ ir no laika neatkarīgas funkcijas:

$$\mathcal{T}_0(m_J) = \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 \frac{m_J}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \langle g \| d \| e \rangle \quad (4.3.28)$$

$$\mathcal{T}_{-1}(m_J) = \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 \sqrt{\frac{(J-m_J)(J+m_J)}{J(2J-1)(2J+1)}} \langle g \| d \| e \rangle \quad (4.3.29)$$

$$\mathcal{T}_1(m_J) = -\frac{1}{2} \mathcal{E}_0 \sqrt{\frac{(J-m_J+1)(J+m_J+1)}{(J+1)(2J+1)(2J+3)}} \langle g \| d \| e \rangle \quad (4.3.30)$$

Visām šīm izteiksmēm ir spēkā nosacījums (4.2.13),

$$m_J \leq J$$

Savukārt pats operators \hat{V}_{RVT} pierakstāms šādā formā:

$$\hat{V}_{RVT} = \sum_{m_J} (|g m_J\rangle \mathcal{T}_{\Delta J}(m_J) \langle e m_J| + |e m_J\rangle \mathcal{T}_{\Delta J}^*(m_J) \langle g m_J|) \quad (4.3.31)$$

Atoma mijiedarbībā ar ārēju lauku, lai raksturotu mijiedarbības stiprumu, bieži tiek izmantots Rabi frekvences jēdziens. Rabi frekvence tiek definēta šādi [21, eq 2.7.22]:

$$\Omega(\eta_i, m_{J,i}, \eta_j, m_{J,j}) \equiv \Omega_{ij} = \frac{\langle i | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}_0 | j \rangle}{\hbar} \quad (4.3.32)$$

Salīdzinot Rabi frekvences definīciju ar mijiedarbības Hamiltoniāņa matricielementa aprēķināšanas izteiksmi (4.1.5), viegli redzēt, ka mijiedarbības Hamiltoniāņa matricielements atšķiras no Rabi frekvences galvenokārt ar no laika atkarīgo locekli. Veicot rotējoša viļņa tuvinājumu, Hamiltoniānī tiek iznīcināta atkarība no laika, un lineāri polarizēta ārējā lauka gadījumā:

$$\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J) \equiv \frac{\hbar \Omega(g, m_J, e, m_J)}{2} \quad (4.3.33)$$

No izteiksmēm (4.3.28), (4.3.29) un (4.3.30) redzams, ka Rabi frekvences absolūtā vērtība vienas sīkstruktūras pārejas robežās mainās atkarībā no elektrona pilnā leņķiskā momenta projekcijas kvantu skaitļa m_J , tādēļ ērtākam sistēmas aprakstam var definēt divu sīkstruktūras līmeņu mijiedarbības stiprumu raksturojošu lielumu:

$$\mathcal{Q}_{\Delta J} \equiv \frac{\mathcal{E}_0}{\hbar} \langle g || d || e \rangle \quad (4.3.34)$$

$$\mathcal{Q}_{\Delta J} \propto \mathcal{T}_{\Delta J}(m_J) \quad (4.3.35)$$

Šeit lielumam \mathcal{Q} , tā pat kā Rabi frekvencei, ir frekvences dimensija. Izmantojot $\mathcal{Q}_{\Delta J}$, $\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J)$ aprēķināšanas izteiksmes var uzrakstīt kompaktākā formā:

$$\mathcal{T}_0(m_J) = \frac{\hbar}{2} \frac{m_J}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \mathcal{Q}_0 \quad (4.3.36)$$

$$\mathcal{T}_{-1}(m_J) = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{(J-m_J)(J+m_J)}{J(2J-1)(2J+1)}} \mathcal{Q}_{-1} \quad (4.3.37)$$

$$\mathcal{T}_1(m_J) = -\frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{(J-m_J+1)(J+m_J+1)}{(J+1)(2J+1)(2J+3)}} \mathcal{Q}_{+1} \quad (4.3.38)$$

Arī šīm izteiksmēm ir spēkā nosacījums (4.2.13),

$$m_J \leq J$$

Pilno sistēmas Hamiltoniāni rotējoša viļņa tuvinājumā veido Hamiltoniāni \hat{H}_{B0} un \hat{V}_{RVT} :

$$\hat{H}_{RVT} = \hat{H}_{B0} + \hat{V}_{RVT} \quad (4.3.39)$$

Tā kā neviens no šiem operatoriem nesatur atkarību no laika, acīmredzot rotējoša viļņa tuvinājumā atomam laikā mainīgā ārējā elektriskajā laukā ir stacionāri enerģijas īpašstāvokļi, kurus var atrast, atrisinot no laika neatkarīgo Šrēdingera vienādojumu, kas ir vienkāršs īpašvērtību atrašanas uzdevums sistēmas Hamiltoniānim \hat{H}_{RVT} :

$$\hat{H}|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle \quad (4.3.40)$$

Turpmākos aprēķinos atoma un ārējā lauka mijiedarbības analīzi var vienkāršot, ieviešot specifisku elektrona enerģijas skalu. Tā kā enerģijas skalas nulles līmeni var brīvi izvēlēties, turpmāk tiks uzskatīts, ka izolēta atoma īpašstāvokļu enerģijas ir:

$$E_e = 0 \quad (4.3.41)$$

$$E_g = -\hbar\omega_0 \quad (4.3.42)$$

Šādas izolētas sistēmas Hamiltoniānis rotējoša viļņa tuvinājumā, atbilstoši vienādojumam (4.3.21), ir:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{B0} &= \sum_{m_{J,g}} |g m_{J,g}\rangle (E_g + \hbar\omega) \langle g m_{J,g}| + \sum_{m_{J,e}} |e m_{J,e}\rangle E_e \langle e m_{J,e}| \\ &= \sum_{m_{J,g}} |g m_{J,g}\rangle (\hbar\Delta) \langle g m_{J,g}| + \sum_{m_{J,e}} |e m_{J,e}\rangle 0 \langle e m_{J,e}| \end{aligned} \quad (4.3.43)$$

Šeit ieviests apzīmējums

$$\Delta \equiv \omega - \omega_0, \quad (4.3.44)$$

ko sauc par ārējā lauka izskaņojumu no elektroniskās pārejas rezonanses frekvences.

4.4 Ietērpto stāvokļu aina

Iepriekš tika noskaidrots, ka izolēta atoma Hamiltoniāņa \hat{H}_{B0} , \hat{H}_{B0} īpašvērtības atbilst noteiktiem atoma stāvokļa īpašvektoriem, kuri turpmāk tiks saukti par "neietērptajiem" stāvokļiem (angļu val. *bare states*). Ja atoms ir ievietots ārējā elektromagnētiskajā laukā, Hamiltoniānī parādās mijiedarbību raksturojošie nediagonālie elementi. Šāda Hamiltoniāņa īpašvektori atšķiras no izolēta atoma Hamiltoniāņa īpašvektoriem, tomēr, tā kā bieži vien

mijiedarbība ar ārējo lauku ir vāja, šīs izmaiņas var neņemt vērā. Šajā darbā, savukārt, tiek aplūkots gadījums, kad mijiedarbība ar ārējo lauku ir spēcīga, un tāpēc ir nepieciešams šāda Hamiltoniāna īpašvektorus atšķirt no neietērtajiem stāvokļiem. Atbilstoši [22] pieņemtajiem apzīmējumiem atoma, kas ievietots ārējā laukā, īpašstāvokļi tiks saukti par "ietērtajiem" stāvokļiem (angļu val. *dressed states*) un apzīmēti ar $|\Phi_s\rangle$, kur indekss s ir īpašstāvokļa identifikators.

Analizējot mijiedarbības Hamiltoniāni lineāri rotējoša viļņa tuvinājumā polarizēta ārējā lauka gadījumā (4.3.31), tika iegūts, ka lineāras polarizācijas gadījumā ārējais lauks sasaista tikai neietērtos stāvokļus pārus ar vienādiem kvantu skaitļiem m_J , un sistēmu, kurā pa pāriem saistīti divu sīkstruktūras līmeņu apakšlīmeņi m_J , var aplūkot kā sistēmu, kuru veido vairākas neatkarīgas divlīmeņu apakšsistēmas, pie tam katrai apakšsistēmai ir unikāla m_J vērtība. Tādēļ ietērtos stāvokļus veidošanos nav jēgas aplūkot sarežģītā daudzlīmeņu shēmā. Tā vietā, tā pat, kā aplūkojot RVT nodaļā 4.3., var analizēt vienkāršu divlīmeņu sistēmu $|g\rangle$ un $|e\rangle$, kuru raksturojošie kvantu skaitļi J_g , J_e un m_J ir zināmi:

$$|g m_J\rangle \rightarrow |g\rangle \quad (4.4.1)$$

$$|e m_J\rangle \rightarrow |e\rangle \quad (4.4.2)$$

Hamiltona operators šādai sistēmai, ja tā izolēta no mijiedarbībām ar ārējo lauku, ir:

$$\hat{H}_{B0} = |g\rangle E_g \langle g| + |e\rangle E_e \langle e| \quad (4.4.3)$$

Mijiedarbību ar ārējo lauku raksturo operators \hat{V}_{RVT} , kuru saskaņā ar vienādojumu (4.3.31) aplūkotajā divu līmeņu sistēmā aprēķina:

$$\hat{V}_{RVT} = |g\rangle \mathcal{T} \langle e| + |g\rangle \mathcal{T}^* \langle e| \quad (4.4.4)$$

Šeit $\mathcal{T} \equiv \mathcal{T}_{\Delta J}(m_J)$.

Ietērtos stāvokļu enerģijas E_{\pm} iegūst, atrisinot no laika neatkarīgo Šrēdingera vienādojumu,

$$\hat{H}_{RVT} |\Phi_{\pm}\rangle = E_{\pm} |\Phi_{\pm}\rangle \quad (4.4.5)$$

$$\hat{H}_{RVT} = |g\rangle E_g \langle g| + |e\rangle E_e \langle e| + |g\rangle \mathcal{T} \langle e| + |e\rangle \mathcal{T}^* \langle g| \quad (4.4.6)$$

Ievērojot, ka, atbilstoši nodaļā 4.3. ieviestajiem apzīmējumiem, $E_e = 0$, $E_g = \hbar\Delta$, iegūst:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left(\hbar\Delta \pm \sqrt{\hbar^2 \Delta^2 + 4 |\mathcal{T}|^2} \right) \quad (4.4.7)$$

Ietērtos stāvokļu īpašfunkcijas Φ_{\pm} var izteikt ar neietērtos stāvokļu īpašfunkciju $|g\rangle, |e\rangle$ palīdzību:

$$|\Phi_{\pm}\rangle = a_{\pm} |g\rangle + b_{\pm} |e\rangle \quad (4.4.8)$$

Koeficientus a_{\pm}, b_{\pm} iegūst, ievietojot (4.4.8) un (4.4.7) vienādojumā (4.4.5):

$$\begin{cases} \hbar\Delta a_{\pm} + \mathcal{T}b_{\pm} = E_{\pm}a_{\pm} \\ \mathcal{T}^*a_{\pm} = E_{\pm}b_{\pm} \end{cases} \quad (4.4.9)$$

$$\frac{a_{\pm}}{b_{\pm}} = \frac{E_{\pm}}{\mathcal{T}^*} \quad (4.4.10)$$

$$\frac{a_{\pm}}{b_{\pm}} = \frac{\mathcal{T}}{E_{\pm} - \hbar\Delta} \quad (4.4.11)$$

Lai vienkāršotu turpmākos aprēķinus, būs noderīga viegli iegūstama sakarība:

$$E_{\pm} = \hbar\Delta - E_{\mp} \quad (4.4.12)$$

Ar tās palīdzību var izslēgt no aprēķiniem E_{-} :

$$\frac{a_{+}}{b_{+}} = \frac{E_{+}}{\mathcal{T}^*} \quad (4.4.13)$$

$$\frac{a_{-}}{b_{-}} = \frac{\mathcal{T}}{E_{-} - \hbar\Delta} = -\frac{\mathcal{T}}{E_{+}} \quad (4.4.14)$$

Līdz ar to, ietērpto un neietērpto stāvokļu saistība izsakāma šādi:

$$|\Phi_{+}\rangle = \frac{E_{+}}{\mathcal{T}^*}b_{+}|g\rangle + b_{+}|e\rangle \quad (4.4.15)$$

$$|\Phi_{-}\rangle = -\frac{\mathcal{T}}{E_{+}}b_{-}|g\rangle + b_{-}|e\rangle \quad (4.4.16)$$

Koeficientu b_{\pm} vērtību var noteikt, izmantojot kvantu sistēmas īpašvektoru normēšanas nosacījumu:

$$\langle\Phi_{\pm}|\Phi_{\pm}\rangle = 1 \quad (4.4.17)$$

$$\left(\frac{E_{+}}{\mathcal{T}^*}b_{+}^*\langle g| + b_{+}^*\langle e|\right)\left(\frac{E_{+}}{\mathcal{T}^*}b_{+}|g\rangle + b_{+}|e\rangle\right) = 1 \quad (4.4.18)$$

$$\left(-\frac{\mathcal{T}^*}{E_{+}}b_{-}^*\langle g| + b_{-}^*\langle e|\right)\left(-\frac{\mathcal{T}}{E_{+}}b_{-}|g\rangle + b_{-}|e\rangle\right) = 1 \quad (4.4.19)$$

$$\left(\frac{E_{+}^2}{|\mathcal{T}|^2} + 1\right)|b_{+}|^2 = 1 \quad (4.4.20)$$

$$\left(\frac{|\mathcal{T}|^2}{E_{+}^2} + 1\right)|b_{-}|^2 = 1 \quad (4.4.21)$$

Ņemot vērā, ka b_{\pm} ir komplekss skaitlis,

$$b_{+} = \frac{|\mathcal{T}|e^{i\phi_{+}}}{\sqrt{E_{+}^2 + |\mathcal{T}|^2}} \quad (4.4.22)$$

$$b_- = \frac{E_+ e^{i\phi_-}}{\sqrt{E_+^2 + |\mathcal{T}|^2}} \quad (4.4.23)$$

Šo rezultātu ievietojot izteismēs (4.4.15) un (4.4.16), iegūst:

$$|\Phi_+\rangle = \frac{|\mathcal{T}|}{\mathcal{T}^*} \frac{E_+ e^{i\phi_+}}{\sqrt{E_+^2 + |\mathcal{T}|^2}} |g\rangle + \frac{|\mathcal{T}| e^{i\phi_+}}{\sqrt{E_+^2 + |\mathcal{T}|^2}} |e\rangle \quad (4.4.24)$$

$$|\Phi_-\rangle = -\frac{\mathcal{T} e^{i\phi_-}}{\sqrt{E_+^2 + |\mathcal{T}|^2}} |g\rangle + \frac{E_+ e^{i\phi_-}}{\sqrt{E_+^2 + |\mathcal{T}|^2}} |e\rangle \quad (4.4.25)$$

Šajās izteismēs nepieciešams atbrīvojties no nezināmajiem fāzu reizinātājiem. Var pieņemt, ka:

$$\mathcal{T} = |\mathcal{T}| e^{i\phi_{\mathcal{T}}} \quad (4.4.26)$$

$$\frac{|\mathcal{T}|}{\mathcal{T}^*} = e^{i\phi_{\mathcal{T}}} \quad (4.4.27)$$

Tā kā ir zināms, ka viļņu funkcijas normēšanas koeficientos a un b kompleks fāzes reizinātājs neietekmē varbūtību sadalījumu, tad reizinātāju $e^{i\phi_{\mathcal{T}}}$ viļņu funkcijās var atņemt,

$$|\Phi_+\rangle = e^{i\phi_+} \left(\frac{E_+}{\sqrt{E_+^2 + |\mathcal{T}|^2}} |g\rangle + \frac{|\mathcal{T}|}{\sqrt{E_+^2 + |\mathcal{T}|^2}} |e\rangle \right) \quad (4.4.28)$$

$$|\Phi_-\rangle = e^{i\phi_-} \left(-\frac{|\mathcal{T}|}{\sqrt{E_+^2 + |\mathcal{T}|^2}} |g\rangle + \frac{E_+}{\sqrt{E_+^2 + |\mathcal{T}|^2}} |e\rangle \right) \quad (4.4.29)$$

Nepieciešams atbrīvojties arī no fāzu reizinātāja $e^{i\phi_{\pm}}$. Aplūkotās sistēmas Hamiltona operators ir

$$\hat{H}_{RVT} = |\Phi_+\rangle E_+ \langle \Phi_+| + |\Phi_-\rangle E_- \langle \Phi_-| \quad (4.4.30)$$

Fāzu reizinātāja $e^{i\phi_{\pm}}$ atmešanai atbilst unitārs operators \hat{U}_e ,

$$\hat{U}_e = |\Phi_+\rangle e^{-i\phi_+} \langle \Phi_+| + |\Phi_-\rangle e^{-i\phi_-} \langle \Phi_-| \quad (4.4.31)$$

$$\hat{U}_e^{-1} = |\Phi_+\rangle e^{i\phi_+} \langle \Phi_+| + |\Phi_-\rangle e^{i\phi_-} \langle \Phi_-| \quad (4.4.32)$$

Jau apakšnodaļā 4.3. tika aplūkots, kā sistēmas Hamiltoniāni ietekmē unitāras transformācijas pielietošana viļņu funkcijām (4.3.18), vienīgi šajā gadījumā unitārās transformācijas operators nav laikā mainīgs:

$$\hat{H}_{RVT} = \hat{U}_e^{-1} \hat{H}_{RVT} \hat{U}_e - i\hbar \hat{U}_e^{-1} \frac{\partial \hat{U}_e}{\partial t} = \hat{U}_e^{-1} \hat{H}_{RVT} \hat{U}_e \quad (4.4.33)$$

Diagonāla sistēmas Hamiltoniāņa gadījumā:

$$\hat{H}_{RVT} = \hat{H}_{RVT} \quad (4.4.34)$$

Līdz ar to jāsecina, ka ir spēkā sakarība

$$\hat{H}_{RVT}|\Phi_{\pm}\rangle = E_{\pm}|\Phi_{\pm}\rangle \Leftrightarrow \hat{H}_{RVT}\hat{U}_e|\Phi_{\pm}\rangle = E_{\pm}\hat{U}_e|\Phi_{\pm}\rangle, \quad (4.4.35)$$

un ietērpto stāvokļu īpašvektorus var pierakstīt šādi:

$$|\Phi_{+}\rangle = \frac{E_{+}}{\sqrt{E_{+}^2 + |\mathcal{T}|^2}}|g\rangle + \frac{|\mathcal{T}|}{\sqrt{E_{+}^2 + |\mathcal{T}|^2}}|e\rangle \quad (4.4.36)$$

$$|\Phi_{-}\rangle = -\frac{|\mathcal{T}|}{\sqrt{E_{+}^2 + |\mathcal{T}|^2}}|g\rangle + \frac{E_{+}}{\sqrt{E_{+}^2 + |\mathcal{T}|^2}}|e\rangle \quad (4.4.37)$$

Analizējot spēcīgas mijiedarbības dēļ novērojamās parādības, nepieciešams aplūkot, kā ietērptie stāvokļi saistāmi ar konkrētiem neietērptajiem stāvokļiem dažādos robežgadījumos. Vispirms var aplūkot gadījumu, kad ārējā lauka svārstību frekvence ir tālu no elektriskā dipola pārejas rezonanses frekvences, $|\hbar\Delta| \gg ||\mathcal{T}||$. Loģiski sagaidīt, ka šādā ārējais lauks neietērptos stāvokļus savā starpā nesaista. Ietērpto stāvokļu enerģijas var aprēķināt, vienkāršojot (4.4.7):

$$E_{+} \approx \frac{1}{2}(\hbar\Delta + |\hbar\Delta|) \quad (4.4.38)$$

Šeit var izšķirt divus gadījumus: $\Delta > 0$ un $\Delta < 0$.

- $\Delta > 0$. Šajā gadījumā $E_{+} = \hbar\Delta$, un ietērptie stāvokļi patiešām atbilst "nesajauktiem" neietērptajiem stāvokļiem,

$$|\Phi_{+}\rangle = |g\rangle \quad (4.4.39)$$

$$|\Phi_{-}\rangle = |e\rangle \quad (4.4.40)$$

- $\Delta < 0$. Tad $E_{+} = 0$, un arī šajā gadījumā ietērptie stāvokļi atbilst "nesajauktiem" neietērptajiem stāvokļiem,

$$|\Phi_{+}\rangle = |e\rangle \quad (4.4.41)$$

$$|\Phi_{-}\rangle = -|g\rangle \quad (4.4.42)$$

Gadījumu, kad ārējais lauks ir izskaņots tālu no elektriskā dipola pārejas frekvences, pieņemts aplūkot neietērpto stāvokļu bāzē no perturbāciju teorijas viedokļa. Aplūkotajā situācijā, kad katrs ietērptais stāvoklis atbilst vienam neietērptajam stāvoklim, ietērpto stāvokļu enerģijām E_{\pm} jāatbilst perturbētām neietērpto stāvokļu enerģijām E'_{η} pēc bāzes vektoru unitārās

transformācijas \hat{U} , (4.3.19) veikšanas. Vājas mijiedarbības ar ārējo lauku gadījumā izteiksmi (4.4.7) var izvirzīt rindā,

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left(\hbar\Delta \pm |\hbar\Delta| \sqrt{1 + 4 \left| \frac{\mathcal{T}}{\hbar\Delta} \right|^2} \right) \approx \frac{1}{2} \left(\hbar\Delta \pm |\hbar\Delta| \left(1 + 2 \left| \frac{\mathcal{T}}{\hbar\Delta} \right|^2 \right) \right) \quad (4.4.43)$$

Ja $\Delta > 0$, tad iegūst, ka:

$$E_+ = \hbar\Delta + \frac{|\mathcal{T}|^2}{\hbar\Delta} \quad (4.4.44)$$

$$E_- = -\frac{\mathcal{T}^2}{\hbar\Delta} \quad (4.4.45)$$

Atbilstoši (4.4.39) un (4.4.40),

$$E'_g + \hbar\omega = \hbar\Delta + \frac{|\mathcal{T}|^2}{\hbar\Delta} \quad (4.4.46)$$

$$E'_e = -\frac{|\mathcal{T}|^2}{\hbar\Delta} \quad (4.4.47)$$

Tad sākotnējā Hamiltoniāņa \hat{H}_B bāzē iegūst perturbētas Hamiltoniāņa īpašvērtības,

$$E'_g = E_g + \frac{|\mathcal{T}|^2}{\hbar\Delta} \quad (4.4.48)$$

$$E'_e = E_e - \frac{|\mathcal{T}|^2}{\hbar\Delta} \quad (4.4.49)$$

Aplūkojot gadījumu, kad $\Delta < 0$ analogiskā ceļā iegūst:

$$E'_g = E_g - \frac{|\mathcal{T}|^2}{\hbar\Delta} \quad (4.4.50)$$

$$E'_e = E_e + \frac{|\mathcal{T}|^2}{\hbar\Delta} \quad (4.4.51)$$

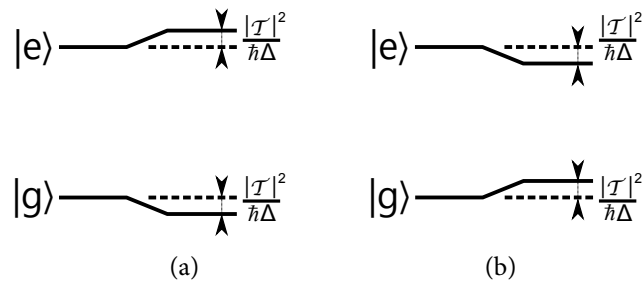
Vispārinot iegūto situāciju, var apgalvot, ka, ja uz atomu iedarbojas ārējs elektromagnētiskais lauks ar mazu intensitāti, kura izskaņojumu no atoma pārejas rezonanses frekvences raksturo ar $\Delta = \omega_{lauks} - \omega_0$, bet mijiedarbības stiprumu raksturo parametrs \mathcal{T} , tad divlīmeņu atoma īpašstāvokļu enerģijas nobīdās par lielumu ΔE_{η} ,

$$\Delta E_g = \frac{|\mathcal{T}|^2}{\hbar\Delta} \quad (4.4.52)$$

$$\Delta E_e = -\frac{|\mathcal{T}|^2}{\hbar\Delta} \quad (4.4.53)$$

Tā kā atoma enerģijas līmeņu nobīdi statiska elektriskā lauka iedarbībā sauc par Štarka efektu, tad šo efektu pieņemts saukt par dinamisko jeb AC Štarka efektu (4.1. att.). Kā redzams, iegūtais matemātiskais apraksts neiekļauj gadījumu, kad $\Delta \rightarrow 0$, un to jāaplūko atsevišķi.

Ņemot vērā, ka aplūkotajā speciālgadījumā katru ietērpto stāvokli veido tikai viens neietērptais stāvoklis, iepriekš neizpētītas ietērpto stāvokļu supersikstruktūras veidošanās nianse nav sagaidāmas, un šajā darbā detalizētāka dinamiskā Štarka efekta analīze netiks veikta.



4.1. att. Atoma stacionāro stāvokļu nobīdes laikā mainīgā ārējā elektriskajā laukā dinamiskā Štarka efekta dēļ. Ārējā lauka izskaņojums no pārejas rezonanses frekvences: (a) $\Delta < 0$; (b) $\Delta > 0$

Ja spēcīga ārējā lauka frekvence ω ir noskaņota tuvu izolēta atoma īpašstāvokļu pārejas rezonanses frekvencei, $|\hbar\Delta| \ll |\mathcal{T}|$, tad ietērpto stāvokļu enerģijas kļūst

$$E_{\pm} \approx \pm|\mathcal{T}|, \quad (4.4.54)$$

savukārt ietēptie stāvokļi maksimāli sajaucas:

$$|\Phi_{+}\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + |e\rangle) \quad (4.4.55)$$

$$|\Phi_{-}\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(-|g\rangle + |e\rangle) \quad (4.4.56)$$

Šajā gadījumā aplūkojot situāciju neietērpto stāvokļu bāzē, novēro pamata un ierosinātā stāvokļa sašķelšanos divās komponentēs [4, ch. 8.6]. Atoma emisijas spektrā tādējādi ir novērojamas trīs spektrālīnijas, ko sauc par Mollova tripletu [23, app. G]. Šo dinamiskā Štarka efekta speciālgadījumu pirmie novēroja un izpētīja S. H. Autlers un C. H. Taunss [3], tādēļ tas bieži tiek saukts par Autlera-Taunsa efektu. Viens no vienkāršākajiem Autlera-Taunsa efekta skaidrojumiem, ko piedāvā *Andreas F. Molisch* un *Bernhard P. Oehry* [23, App. G], ir šāds: spēcīga laikā mainīga elektriskā lauka ietekmē atoma elektriskā dipola moments sāk precesēt ap nulles lauka virzienu. Šīs precesijas rezultātā elektriskā dipola emisijas spektrā parādās divas blakusjoslas, kuru nobīde no centrālās frekvences ir atkarīga no ārējā lauka intensitātes. Gadījumā, kad sistēmā tiek novērots Autlera - Taunsa efekts, ietērptos stāvokļus veido neietērpto stāvokļu superpozīcija, un tādēļ šādu ietērpto stāvokļu sašķelšanās supersikstruktūrā var atšķirties no neietērpto stāvokļu supersikstruktūras. Ietērpto stāvokļu enerģiju nobīdes tuvāk aplūkošu nodaļā 4.5., bet ietērpto stāvokļu supersikstruktūras veidošanos analizēšu nodaļā 5.1.

Ietērpto stāvokļu pieraksts (4.4.36),(4.4.37) nav ērts, un tajā var veikt dažus pārveidojumus. Ņemot vērā iepriekš iegūtās koeficientu a_{\pm} un b_{\pm} vērtības dažādos

speciālgadījumos, kā arī ievērojot sistēmas īpašvektora normēšanas nosacījumu,

$$a_{\pm}^2 + b_{\pm}^2 = 1, \quad (4.4.57)$$

un ievērojot, ka

$$a_+ = b_- \quad (4.4.58)$$

$$b_+ = -a_- , \quad (4.4.59)$$

var definēt tādu funkciju $\theta = \theta(\Delta, \mathcal{T})$, ka

$$\theta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \quad (4.4.60)$$

$$\cos \theta = \frac{E_+}{\sqrt{E_+^2 + |\mathcal{T}|^2}} \quad (4.4.61)$$

$$\sin \theta = \frac{|\mathcal{T}|}{\sqrt{E_+^2 + |\mathcal{T}|^2}} \quad (4.4.62)$$

Atbilstoši literatūras avotam [22] parametrs θ tiek saukts par neietērpto stāvokļu sajaukšanās leņķi (angļu val. *mixing angle*). Ar tā palīdzību ietērptos stāvokļus pieraksta:

$$|\Phi_+\rangle = \cos \theta |g\rangle + \sin \theta |e\rangle \quad (4.4.63)$$

$$|\Phi_-\rangle = -\sin \theta |g\rangle + \cos \theta |e\rangle \quad (4.4.64)$$

Šāds pieraksts diemžēl nav ērts, ja sistēmas aprakstā jāiekļauj vairākus ietērpto stāvokļu pārus, tādēļ definē lielumu θ_{\pm} :

$$\theta_+ = \theta \quad (4.4.65)$$

$$\theta_- = \theta - \frac{\pi}{2} \quad (4.4.66)$$

$$|\Phi_{\pm}\rangle = \cos \theta_{\pm} |g\rangle + \sin \theta_{\pm} |e\rangle \quad (4.4.67)$$

Tā kā reālos atomos pamata un ierosinātie līmeņi sastāv no vairākiem apakšlīmeņiem, *bra-ket* apzīmējumos nepieciešams ieviest lielumus, ar kuru palīdzību identificēt katru ietērpto stāvokli. Ņemot vērā, ka lineāras polarizācijas gadījumā tiek sasaistīti neietērptie stāvokļi ar vienādiem m_J , šo kvantu skaitli iespējams izmantot ietērpto stāvokļu pāru identificēšanai, savukārt stāvokļus viena pāra ietvaros iespējams identificēt, izmantojot jau iepriekš ieviesto indeksu $s = +, -$:

$$|\Phi_s\rangle = |s m_J\rangle \quad (4.4.68)$$

Jāņem vērā, ka šādā sistēmā katram ietērpto stāvokļu pārim ir arī atšķirīgs sajaukšanās leņķis θ_s ,

tāpēc sajaukšanās leņķi raksturo ar diviem indeksiem, θ_{s,m_J} ,

$$\cos \theta_{+,m_J} \equiv \frac{E_{+,m_J}}{\sqrt{E_{+,m_J}^2 + |\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J)|^2}} \quad (4.4.69)$$

$$\cos \theta_{-,m_J} \equiv -\frac{|\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J)|}{\sqrt{E_{+,m_J}^2 + |\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J)|^2}} \quad (4.4.70)$$

Ja sistēmas aprakstā ir nepieciešams iekļaut arī kodola spinu, ietērpto stāvokļu pierakstu ir nedaudz jāpārveido:

$$|\Phi_s\rangle = |s m_J\rangle \implies |\Phi_s m_I\rangle = |s m_J m_I\rangle \quad (4.4.71)$$

un, ņemot vērā, ka elektriskā dipola tuvinājumā ārējais elektromagnētiskais lauks nevar izmainīt kodola spina stāvokli (elektroniskajās pārejās nemainās m_I), ietērptos stāvokļus var pierakstīt kā:

$$|s m_J m_I\rangle = \cos \theta_{s,m_J} |g m_J m_I\rangle + \sin \theta_{s,m_J} |e m_J m_I\rangle \quad (4.4.72)$$

Atbilstoši elektriskā dipola pāreju izvēles likumiem, ja šādas pārejas rezultātā mainās elektrona leņķiskais moments, tas var mainīties tikai tā, ka $J_e - J_g = \pm 1$. Tā kā lineāri polarizēts elektromagnētiskais starojums savā starpā saista tikai līmeņus ar $m_{J,g} = m_{J,e}$, tad acīmredzot divi līmeņi, $m_J = \pm \max(J_g, J_e)$, ar starojumu nemijiedarbojas, un tādēļ šo īpašstāvokļu enerģijas nav atkarīgas no ārējā lauka iedarbības. Tā kā pilnā sistēmas aprakstā nepieciešams iekļaut arī šos līmeņus, ietērpto stāvokļu ainā tiem nepieciešams piekārtot īpaši izvēlētus sajaukšanās leņķus θ_{s,m_J} un tiem atbilstošus ietērptos stāvokļus. Tā kā ar ārējo lauku nesaistītiem līmeņiem Autlera - Taunsa efektu nenovēro, katram šādam līmenim piekārtoti tikai vienu $|\Phi_s\rangle$ stāvokli.

Lai uzzinātu, kādus ietērpto stāvokļu parametrus jāpiešķir šiem stāvokļiem, var rīkoties līdzīgi kā dinamiskā Štarka efekta gadījumā, jo jebkurš ārējā lauka izskaņojums $\Delta \neq 0$ no rezonanses frekvences ir bezgalīgi daudz reižu lielāks par nesaistīto stāvokļu un ārējā lauka mijiedarbības enerģiju. Papildus jāaplūko arī gadījumu, kad $\Delta = 0$.

Ja $\Delta > 0$, tad, atbilstoši (4.4.39) un (4.4.40),

$$\begin{aligned} |\Phi_+\rangle &= |g\rangle \\ |\Phi_-\rangle &= |e\rangle, \end{aligned}$$

un, ja ar ārējo lauku nav saistīti stāvokļa $|g\rangle$ apakšlīmeņi, tad tiem piekārtoti ietērptos stāvokļus $|+, m_J\rangle$ un sajaukšanās leņķus $\theta_{+,m_J} = 0$, savukārt, ja ar ārējo lauku nav saistīti stāvokļa $|e\rangle$ apakšlīmeņi, tad tiem piekārtoti ietērptos stāvokļus $|-, m_J\rangle$ un sajaukšanās leņķus $\theta_{-,m_J} = \frac{\pi}{2}$.

Ja $\Delta < 0$, tad, atbilstoši (4.4.41) un (4.4.42),

$$\begin{aligned} |\Phi_+\rangle &= |e\rangle \\ |\Phi_-\rangle &= -|g\rangle \end{aligned}$$

un, ja ar ārējo lauku nav saistīti stāvokļa $|g\rangle$ apakšlīmeņi, tad tiem piekārto ietērptos stāvokļus $|-, m_J\rangle$ un sajaukšanās leņķus $\theta_{-, m_J} = \pi$, bet, ja ar ārējo lauku nav saistīti stāvokļa $|e\rangle$ apakšlīmeņi, tad tiem piekārto ietērptos stāvokļus $|+, m_J\rangle$ un sajaukšanās leņķus $\theta_{+, m_J} = \frac{\pi}{2}$.

Tā kā gadījumā, kad $\Delta = 0$, neietērptajam stāvoklim piekārtotā ietērptā stāvokļa parametra s izvēlei nav principiālas nozīmes, tad šajā darbā gadījumā $\Delta = 0$ piekārtošana tiek veikta tā pat, kā gadījumā $\Delta > 0$

Nemot vērā šos apsvērumus, divlīmeņu sistēmas pilno Hamiltoniāni ietērpto stāvokļu bāzē var pierakstīt šādi:

$$\hat{H}_{RVT} = \sum_s \sum_{m_J = -\min(J_g, J_e)}^{\min(J_g, J_e)} (|s m_J\rangle E_{s, m_J} \langle s m_J|) + \sum_{\substack{m_J = \pm \max(J_g, J_e) \\ J_g - J_e \neq 0}} (|s_u m_J\rangle E_{s_u, m_J} \langle s_u m_J|) \quad (4.4.73)$$

$$s_u = \begin{cases} +, \text{ ja } \begin{cases} J_g > J_e \text{ un } \Delta \geq 0, \\ J_g < J_e \text{ un } \Delta < 0; \end{cases} \\ -, \text{ ja } \begin{cases} J_g > J_e \text{ un } \Delta < 0, \\ J_g < J_e \text{ un } \Delta \geq 0 \end{cases} \end{cases} \quad (4.4.74)$$

Šeit līmeņu enerģiju vērtības iegūtas, vispārinot vienādojumu (4.4.7) sistēmai ar vairākiem m_J apakšlīmeņiem,

$$E_{s, m_J} = \frac{1}{2} \left(\hbar \Delta \pm \sqrt{\hbar^2 \Delta^2 + 4 |\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J)|^2} \right) \quad (4.4.75)$$

4.5 Autlera - Taunsa efekts

Nodaļā 4.4. tika noskaidrots, ka gadījumā, kad spēcīgs ārējais lauks ir noskaņots tuvu atoma elektroniskās pārejas rezonanses frekvencei, atoma stacionārie (neietērptie) stāvokļi sajaucas, veidojot ietērptos stāvokļus, kuru enerģijas ir atkarīgas no mijiedarbības ar ārējo lauku stipruma. Šajā nodaļā tiks tuvāk aplūkota ietērpto stāvokļu enerģiju atkarība no mijiedarbības ar ārējo lauku stipruma, kā arī tiks izklāstīti Autlera - Taunsa efekta novērošanas pamatprincipi.

Šajā darbā tiks aplūkots gadījums, kad uz atomu iedarbojas spēcīgs ārējais lauks, kura svārstību frekvence ir noskaņota tuvu aplūkojamās elektriskā dipola pārejas rezonanses frekvencei. Tas nozīmē, ka visās aplūkotajās sistēmās ir novērojams Autlera - Taunsa efekts, tādēļ turpmāk vienkāršības labad atoma un ārējā elektriskā lauka mijiedarbība tiks saukta par Autlera - Taunsa jeb AT mijiedarbību, savukārt šīs mijiedarbības enerģija tiks saukta par AT mijiedarbības enerģiju.

Tā kā ietērpto stāvokļu enerģijas izteiksme (4.4.75) satur funkcijas $\mathcal{T}_{\Delta J}(m_J)$ moduļa kvadrātu, tad, atbilstoši izteiksmēm (4.3.36), (4.3.37) un (4.3.38), ietērpto stāvokļu enerģijas nav atkarīgas no kvantu skaitļa m_J zīmes. Iekļaujot sistēmas aprakstā arī kodola spina stāvokli raksturojošo kvantu skaitli m_I , izrādās, ka, neiekļaujot aprakstā supersikstruktūras

mijiedarbību, ietērpto stāvokļu kopējā deģenerācijas kārtā ir:

$$n = 2 \cdot (2I + 1) \quad (4.5.1)$$

Lai uzskatāmi demonstrētu ietērpto stāvokļu enerģiju atkarību no AT mijiedarbības stipruma, var aplūkot tādu divu līmeņu sistēmu, kurā $J_g = J_e$. Šādas sistēmas Hamiltoniānis atbilstoši (4.4.73) ir:

$$\hat{H}_{RVT} = \sum_s \sum_{m_J = -\min(J_g, J_e)}^{\min(J_g, J_e)} (|s m_J\rangle E_{s, m_J} \langle s m_J|) \quad (4.5.2)$$

No vienādojumiem (4.4.75) un (4.3.36) zināms, ka:

$$E_{s, m_J} = \frac{1}{2} \left(\hbar\Delta \pm \sqrt{\hbar^2\Delta^2 + 4|\mathcal{T}_0(m_J)|^2} \right)$$

$$\mathcal{T}_0(m_J) = \frac{\hbar}{2} \frac{m_J}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} Q_0$$

Analizējot ietērpto stāvokļu enerģiju atkarību no AT mijiedarbības stiprumu raksturojošā parametra Q (4.2. att.), var iegūt Autlera-Taunsa efekta izraisīto enerģijas līmeņu sašķelšanos raksturojošus lielumus, kas būs noderīgi, salīdzinot atoma un ārējā lauka mijiedarbības un supersīkstruktūras mijiedarbības enerģiju.

Vispirms nepieciešams noskaidrot, cik liela ir maksimālā atoma un ārējā lauka mijiedarbības enerģija. Atbilstoši vienādojumam (4.3.36), sistēmās, kurās $J_g = J_e = J$ vislielākā AT mijiedarbības enerģija piemīt stāvokļiem $|+\pm J\rangle$ un $|-\pm J\rangle$, starp kuriem attālums enerģijas skalā ir:

$$E_{AT \max} = \hbar \sqrt{\Delta^2 + \frac{JQ_0^2}{(J+1)(2J+1)}} \quad (4.5.3)$$

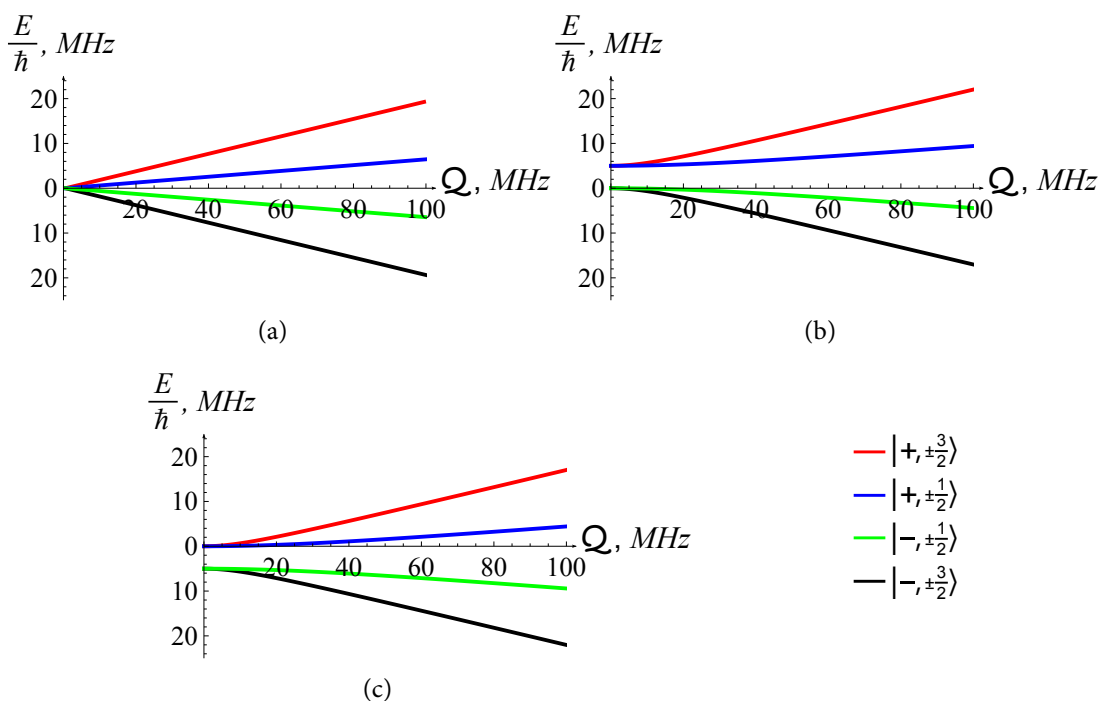
$$\lim_{Q_0 \gg \Delta} (E_{AT \max}) = \hbar Q_0 \frac{\sqrt{J}}{\sqrt{(J+1)(2J+1)}} \quad (4.5.4)$$

Mazākā AT mijiedarbību raksturojošā enerģija ir attālums enerģiju skalā starp līmeņiem $|+m_J\rangle$ un $|+(m_J-1)\rangle$ pie nosacījuma, ka $m_J \neq \frac{1}{2}$. Sistēmās $J_g = J_e = J$ tas ir:

$$E_{AT \min} = \frac{\hbar}{2} \left(\sqrt{\Delta^2 + \frac{m_J^2 Q_0^2}{J(J+1)(2J+1)}} - \sqrt{\Delta^2 + \frac{(m_J-1)^2 Q_0^2}{J(J+1)(2J+1)}} \right) \quad (4.5.5)$$

$$\lim_{Q_0 \gg \Delta} (E_{AT \min}) = \hbar Q_0 \frac{1}{2\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \quad (4.5.6)$$

Vēl viens šo mijiedarbību raksturojošs lielums ir mazākais attālums enerģiju skalā starp $s = +$ un $s = -$ stāvokļiem. Sistēmās, kurās $J_g = J_e = J$ un J ir vesels skaitlis, šis attālums ir vienāds ar nulli, jo $m_{J \min} = 0$. Savukārt sistēmās, kurās $J_g = J_e = J$ un J ir pusvesels skaitlis, šis



4.2. att. Ietērpto stāvokļu enerģiju (y ass) un mijiedarbības ar ārējo lauku stiprumu raksturojošā parametra Q (x ass) savstarpējā saistība divu līmeņu sistēmā $J_g = J_e = 3/2$ pie dažādām ārējā lauka frekvences nobīdēm no pārejas rezonances frekvences: (a) $\Delta = 0$ MHz, (b) $\Delta = 5$ MHz, (c) $\Delta = -5$ MHz

attālums atbilst stāvokļu $|+ \pm\frac{1}{2}\rangle$ un $|- \pm\frac{1}{2}\rangle$ enerģiju starpībai,

$$E_{AT\text{ med}} = \hbar \sqrt{\Delta^2 + \frac{Q_0^2}{4J(J+1)(2J+1)}} \quad (4.5.7)$$

$$\lim_{Q_0 \gg \Delta} (E_{AT\text{ med}}) = \hbar Q_0 \frac{1}{2\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \quad (4.5.8)$$

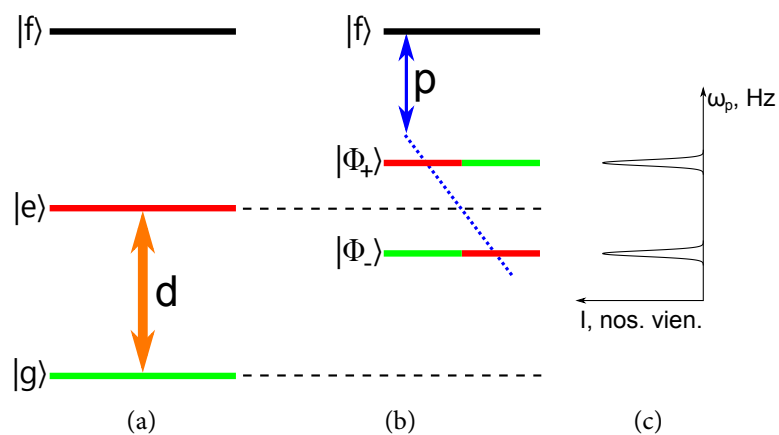
Jāatzīmē, ka sistēmās, kurās J ir pusvesels skaitlis, spēcīgas AT mijiedarbības gadījumā $E_{AT\text{ med}} = E_{AT\text{ min}}$.

Autlera - Taunsa efekta eksperimentālai novērošanai ir piemērota trīs līmeņu sistēma ($|g\rangle$, $|e\rangle$, $|f\rangle$) (4.3. att.), kurā atļautās dipola pārejas ir $|g\rangle \leftrightarrow |e\rangle$ un $|e\rangle \leftrightarrow |f\rangle$. Līmeņus $|g\rangle$ un $|e\rangle$ savā starpā saista spēcīgs ārējais lauks, kura frekvence ir fiksēta. Savukārt starp līmeņiem $|e\rangle$ un $|f\rangle$ ieslēgts vājš zondējošais lauks, kura frekvenci var mainīt. Skanējot zondējošā lauka frekvenci un novērojot fluorescences intensitāti no stāvokļa $|f\rangle$, tiek iegūti divi fluorescences intensitātes maksimumi, kad zondējošā lauka frekvence ir

$$\omega_p = \frac{E_f - E_e}{\hbar} + \frac{E_{\pm}}{\hbar}, \quad (4.5.9)$$

kas atbilst rezonances nosacījumam pārejām $|\Phi_{\pm}\rangle \leftrightarrow |f\rangle$.

Ja nepieciešams aplūkot, kā šādā sistēmā mainās līmeņu apdzīvotības, ir svarīgi atcerēties, ka pārejās $|\Phi_{\pm}\rangle \leftrightarrow |f\rangle$ piedalās tikai $|f\rangle$ līmenis un neietērptajam stāvoklim $|e\rangle$ atbilstošā ietērpto stāvokļu $|\Phi_{\pm}\rangle$ daļa.



4.3. att. Autlera-Taunsa efekta novērošanas shēma trīs līmeņu sistēmā. (a) Vispirms starp līmeņiem $|g\rangle$ un $|e\rangle$ tiek ieslēgts spēcīgs ierosinošais lauks d , kura ietekmē ietērpto stāvokļu enerģijas kļūst atšķirīgas no neietērpto stāvokļu enerģijām (b). Skanējot vāja zondējošā stara p frekvenci ap pārejas $|e\rangle \leftrightarrow |f\rangle$ rezonanses frekvenci, fluorescencē no līmeņa $|f\rangle$ novēro divus fluorescences intensitātes maksimumus (c).

5 IETĒRPTO STĀVOKĻU SUPERSĪKSTRUKTŪRA

5.1 Supersīkstruktūras Hamiltoniānis ietērpto stāvokļu bāzē

Lai noskaidrotu, kā veidojas ar spēcīgu ārējo lauku ietērpto stāvokļu supersīkstruktūra, nepieciešams salīdzināt supersīkstruktūras un AT mijiedarbības tipiskās enerģijas. Šeit iespējams izšķirt trīs galvenos speciālgadījumus:

1. supersīkstruktūras mijiedarbības mazākā enerģija ir ievērojami lielāka par lielāko AT mijiedarbības enerģiju,

$$E_{F \min} \gg E_{AT \max} \quad (5.1.1)$$

2. supersīkstruktūras mijiedarbības enerģija un AT mijiedarbības enerģija ir līdzīgas kārtas lielumi,

$$E_{F \max} \propto E_{AT \max} \quad (5.1.2)$$

3. supersīkstruktūras mijiedarbības lielākā enerģija ir ievērojami mazāka par mazāko AT mijiedarbības enerģiju,

$$E_{F \max} \ll E_{AT \min} \quad (5.1.3)$$

Pirmajā gadījumā atoma īpašstāvokļus nosaka supersīkstruktūras mijiedarbība, savukārt AT mijiedarbība uzskatāma par nelielu perturbāciju. Šādās sistēmās tiek novērots Aulera-Taunsa efekts atoma supersīkstruktūras līmeņos.

Otrajā gadījumā, kad mijiedarbību enerģijas ir ar līdzīgu kārtu, lai noskaidrotu sistēmas īpašstāvokļu enerģijas, nepieciešams atrisināt stacionāro Šrēdingera vienādojumu izvēlētajā īpašstāvokļu bāzē (\hat{F} īpašstāvokļu bāzē vai ietērpto stāvokļu bāzē). Šāds uzdevums pat samērā vienkāršām sistēmām ($J_g, J_e, I \geq \frac{3}{2}$) analītiskā veidā ir ļoti grūti atrisināms.

Trešajā gadījumā atoma īpašstāvokļus nosaka AT mijiedarbība, bet supersīkstruktūras mijiedarbība uzskatāma par nelielu perturbāciju. Nodaļā 5.2. tiks parādīts, ka šādā gadījumā labā tuvinājumā ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras sašķelšanos var aprakstīt ar analītiskas izteiksmes palīdzību.

Vispirms jānoskaidro, kā aprēķināmi supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāņa matricas elementi ietērpto stāvokļu bāzē. Nodaļā 2.6. jau tika noskaidrots, ka operatora \hat{F} īpašstāvokļu bāzē supersīkstruktūras mijiedarbību apraksta Hamiltoniānis (2.6.7):

$$\hat{H}_F = \sum_{\eta, F_\eta, m_{F_\eta}} |\eta F_\eta m_{F_\eta}\rangle \Delta E_{F, J_\eta, I} \langle \eta F_\eta m_{F_\eta} |$$

Ietērpto stāvokļu bāzē supersikstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāņa matricas elementus var aprēķināt šādi:

$$\langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s' m'_J m'_I \rangle = \sum_{\eta, F_\eta, m_{F_\eta}} \langle s m_J m_I | \eta F_\eta m_{F_\eta} \rangle \Delta E_{F, J, I} \langle \eta F_\eta m_{F_\eta} | s' m'_J m'_I \rangle \quad (5.1.4)$$

Šeit $\langle s m_J m_I | \eta F_\eta m_{F_\eta} \rangle$ un $\langle \eta F_\eta m_{F_\eta} | s' m'_J m'_I \rangle$ ir Klebša-Gordāna koeficienti. Lai atrastu to vērtības, izmanto ietērpto stāvokļu saistību ar kailajiem stāvokļiem (4.4.72),

$$\begin{aligned} |s m_J m_I\rangle &= \cos \theta_{s, m_J} |g m_J m_I\rangle + \sin \theta_{s, m_J} |e m_J m_I\rangle \\ \langle s m_J m_I | \eta F_\eta m_{F_\eta} \rangle &= \cos \theta_{s, m_J} \langle g m_J m_I | \eta F_\eta m_{F_\eta} \rangle + \sin \theta_{s, m_J} \langle e m_J m_I | \eta F_\eta m_{F_\eta} \rangle \end{aligned} \quad (5.1.5)$$

$$\langle \eta F_\eta m_{F_\eta} | s' m'_J m'_I \rangle = \cos \theta_{s', m'_J} \langle \eta F_\eta m_{F_\eta} | g' m'_J m'_I \rangle + \sin \theta_{s', m'_J} \langle \eta F_\eta m_{F_\eta} | e' m'_J m'_I \rangle \quad (5.1.6)$$

Ievietojot šīs izteiksmes vienādojumā (5.1.4), iegūst:

$$\begin{aligned} \langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s' m'_J m'_I \rangle &= \\ &\sum_{\eta, F_\eta, m_{F_\eta}} (\cos \theta_{s, m_J} \langle g m_J m_I | \eta F_\eta m_{F_\eta} \rangle + \sin \theta_{s, m_J} \langle e m_J m_I | \eta F_\eta m_{F_\eta} \rangle) \cdot \\ &\cdot \Delta E_{F, J, I} (\cos \theta_{s', m'_J} \langle \eta F_\eta m_{F_\eta} | g' m'_J m'_I \rangle + \sin \theta_{s', m'_J} \langle \eta F_\eta m_{F_\eta} | e' m'_J m'_I \rangle) \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

Šo izteiksmi var vienkāršot, ņemot vērā, ka supersikstruktūra savā starpā nesaista pamata un ierosināto stāvokli,

$$\langle g m_J m_I | e F_e m_{F_e} \rangle = 0 \quad (5.1.8)$$

$$\langle e m_J m_I | g F_g m_{F_g} \rangle = 0 \quad (5.1.9)$$

$$\begin{aligned} \langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s' m'_J m'_I \rangle &= \\ &\sum_{F_g, m_{F_g}} \cos \theta_{s, m_J} \cos \theta_{s', m'_J} \langle g m_J m_I | g F_g m_{F_g} \rangle \langle g F_g m_{F_g} | g m'_J m'_I \rangle \Delta E_{F, J, I} + \\ &+ \sum_{F_e, m_{F_e}} \sin \theta_{s, m_J} \sin \theta_{s', m'_J} \langle e m_J m_I | e F_e m_{F_e} \rangle \langle e F_e m_{F_e} | e m'_J m'_I \rangle \Delta E_{F, J, I} \end{aligned} \quad (5.1.10)$$

Tā kā precīzā supersikstruktūras Hamiltoniāņa izteiksme ir ārkārtīgi sarežģīta, un precīzu ietērpto stāvokļu supersikstruktūras līmeņu enerģiju atrašanai pat vienkāršās sistēmās nepieciešams atrast sarežģītas nediagonālas matricas īpašvērtības, jānovērtē, kādus analītiskus tuvinājumus ir iespējams veikt izteiksmē (5.1.10).

Lai analizētu ietērpto stāvokļu supersikstruktūras veidošanos, vispirms jānoskaidro, kāda ir ietērpto stāvokļu struktūra. Atbilstoši iepriekš ieviestajiem apzīmējumiem, katram ietērptajam stāvoklim atbilst unikāla kvantu skaitļu s , m_J un m_I kombinācija. Ņemot vērā nodaļā 4.5. iegūto secinājumu, ka ietērpto stāvokļu bāzē sistēmu veido gan deģenerēti, gan

nedeģenerēti stāvokļi, supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāni var sadalīt četrās daļās. \hat{H}_F ir Ermita operators, un līdz ar to supersīkstruktūras Hamiltoniāni ir izdevīgi uzrakstīt kā citu Ermita operatoru summu:

$$\hat{H}_F = \hat{H}_s + \hat{H}_d + \hat{H}_{n1} + \hat{H}_{n2} \quad (5.1.11)$$

Šeit operators \hat{H}_s satur tikai supersīkstruktūras Hamiltoniāņa diagonāles elementus, un tā iedarbības rezultātā ietērpto stāvokļu enerģijas tikai nobīdās:

$$\begin{aligned} \hat{H}_s &= \sum_{s,m_J,m_I} |s m_J m_I\rangle \langle s m_J m_I| \cdot \langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s m_J m_I \rangle = \\ &= \sum_{s,m_J,m_I} |s m_J m_I\rangle \langle s m_J m_I| \cdot \left(\sum_{F_g, m_{F_g}} \cos^2 \theta_{s,m_J} \langle g m_J m_I | g F_g m_{F_g} \rangle^2 \Delta E_{F,J,g,I} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{F_e, m_{F_e}} \sin^2 \theta_{s,m_J} \langle e m_J m_I | e F_e m_{F_e} \rangle^2 \Delta E_{F,J,e,I} \right) \end{aligned} \quad (5.1.12)$$

Operators \hat{H}_d satur visus tos supersīkstruktūras Hamiltoniāņa elementus, kas savā starpā saista deģenerētus ietērptos stāvokļus,

$$\begin{aligned} \hat{H}_d &= \sum_{s,m_J} \cdot \left(\sum_{\substack{m_I, m'_I \\ m_I \neq m'_I}} |s m_J m_I\rangle \langle s m_J m'_I| \cdot \langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s m_J m'_I \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m_I, m'_I} |s m_J m_I\rangle \langle s (-m_J) m'_I| \cdot \langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s (-m_J) m'_I \rangle \right) \end{aligned} \quad (5.1.13)$$

Operators \hat{H}_{n1} satur visas mijiedarbības starp nedeģenerētiem stāvokļiem ar vienādiem s :

$$\hat{H}_{n1} = \sum_s \sum_{\substack{m_J, m'_J \\ m_J \neq \pm m'_J}} \sum_{m_I, m'_I} |s m_J m_I\rangle \langle s m'_J m'_I| \cdot \langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s m'_J m'_I \rangle \quad (5.1.14)$$

Operators \hat{H}_{n2} satur visas mijiedarbības starp nedeģenerētiem stāvokļiem ar atšķirīgiem s :

$$\hat{H}_{n2} = \sum_{\substack{s, s' \\ s \neq s'}} \sum_{m_J, m'_J} \sum_{m_I, m'_I} |s m_J m_I\rangle \langle s' m'_J m'_I| \cdot \langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s' m'_J m'_I \rangle \quad (5.1.15)$$

Operatora \hat{H}_s vienādojumā (5.1.12) var atbrīvoties no summas pēc $m_{F,\eta}$, jo, ņemot vērā Klebša - Gordāna koeficientu īpašību (1.2.7),

$$m_J + m_I = m_F, \quad (5.1.16)$$

noteiktiem kvantu skaitļiem m_J un m_I šis nosacījums ir spēkā tikai vienai m_F vērtībai. Tādēļ operatora \hat{H}_s matricas elementu vērtības aprēķināmas šādi:

$$H_s(s, m_J, m_I) \equiv \langle s m_J m_I | \hat{H}_s | s m_J m_I \rangle = \left(\sum_{F_g} \cos^2 \theta_{s, m_J} \langle g m_J m_I | g F_g (m_J + m_I) \rangle^2 \Delta E_{F, J_g, I} + \sum_{F_e} \sin^2 \theta_{s, m_J} \langle e m_J m_I | e F_e (m_J + m_I) \rangle^2 \Delta E_{F, J_e, I} \right) \quad (5.1.17)$$

Ievietojot (5.1.10) operatora \hat{H}_d izteiksmē, izrādās, ka supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāna matricielementi

$$\langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s m_J m'_I \rangle = \sum_{F_g, m_{F_g}} \cos^2 \theta_{s, m_J} \langle g m_J m_I | g F_g m_{F_g} \rangle \langle g F_g m_{F_g} | g m_J m'_I \rangle \Delta E_{F, J_g, I} + \sum_{F_e, m_{F_e}} \sin^2 \theta_{s, m_J} \langle e m_J m_I | e F_e m_{F_e} \rangle \langle e F_e m_{F_e} | e m_J m'_I \rangle \Delta E_{F, J_e, I} \quad (5.1.18)$$

gadījumā, kad ir spēkā nosacījums $m_I \neq m'_I$, ir vienādi ar nulli, jo Klebša - Gordāna koeficientiem netiek izpildīts nosacījums (1.2.7),

$$m_J + m_I = m_F \quad (5.1.19)$$

$$m_J + m'_I = m_F \quad (5.1.20)$$

Atlikušajiem operatora \hat{H}_d nenulles matricas elementiem jāņem vērā, ka $m_J \neq 0$, jo šādā gadījumā no Klebša-Gordāna koeficientu īpašībām izriet, ka $m_I = m'_I$, kas atbilst operatora \hat{H}_F galvenās diagonāles elementiem. Savukārt, ņemot vērā, ka stāvokļi deģenerētajiem stāvokļiem ir vienādi sajaukšanās leņķi θ_{s, m_J} , operatora \hat{H}_d izteiksmē var veikt vēl vienu pārveidojumu:

$$\langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s (-m_J) m'_I \rangle = \sum_{F_g, m_{F_g}} \cos^2 \theta_{s, m_J} \langle g m_J m_I | g F_g m_{F_g} \rangle \langle g F_g m_{F_g} | g (-m_J) m'_I \rangle \Delta E_{F, J_g, I} + \sum_{F_e, m_{F_e}} \sin^2 \theta_{s, m_J} \langle e m_J m_I | e F_e m_{F_e} \rangle \langle e F_e m_{F_e} | e (-m_J) m'_I \rangle \Delta E_{F, J_e, I} \quad (5.1.21)$$

Līdz ar to operators \hat{H}_d izsakāms kā:

$$\hat{H}_d = \sum_{s, m_J \neq 0} \sum_{m_I, m'_I} \cdot \left(| s m_J m_I \rangle \langle s (-m_J) m'_I | \cdot \langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s (-m_J) m'_I \rangle \right) \quad (5.1.22)$$

Izteiksmei (5.1.21) papildu nosacījumus uzliek Klebša- Grodāna koeficientu nenulles nosacījums (1.2.7),

$$m_J + m_I = m_F \quad (5.1.23)$$

$$-m_J + m'_I = m_F \quad (5.1.24)$$

No šejienes izriet, ka

$$m'_I = 2m_J + m_I \quad (5.1.25)$$

Tā kā noteiktām m_I un m_J vērtībām atbilst tikai viena m'_I vērtība, kurai šis nosacījums ir spēkā, var secināt, ka mijiedarbības Hamiltoniānis \hat{H}_d savā starpā saista tikai noteiktus ietērpto stāvokļu pārus m_J, m'_I . Pie tam, ievērojot, ka $m_I, m'_I \leq I$, izrādās, ka pozitīvām m_J vērtībām:

$$I \geq 2m_J + m_I \quad (5.1.26)$$

$$I \geq 2m_J - m'_I \quad (5.1.27)$$

Ievērojot, ka arī $m_I, m'_I \geq -I$, iegūst, ka

$$\begin{cases} m_J \leq I \\ m_J > 0 \end{cases} \quad (5.1.28)$$

Savukārt, ievērojot, ka m_J mazākā pozitīvā vērtība min $|m_J|$ pusvesela J gadījumā ir $\frac{1}{2}$, bet vesela J gadījumā tā ir 1,

$$m_I \leq I - 2 \min |m_J| \quad (5.1.29)$$

$$m'_I \geq -I + 2 \min |m_J| \quad (5.1.30)$$

Apvienojot šos secinājumus, izrādās, ka operators \hat{H}_d savā starpā saista tikai tādus deģenerētus ietērpto stāvokļu pārus $|s m_J m_I\rangle, |s (-m_J) m'_I\rangle$, kuriem ir spēkā šādi nosacījumi:

1. $m'_I = m_I + 2m_J$

2. ja $m_J > 0$:

$$m_J \leq I$$

$$-I \leq m_I \leq I - 2 \min (|m_J|)$$

$$-I + 2 \min (|m_J|) \leq m'_I \leq I$$

3. ja $m_J < 0$:

$$m_J \geq -I$$

$$-I + 2 \min (|m_J|) \leq m_I \leq I$$

$$-I \leq m'_I \leq I - 2 \min (|m_J|)$$

Ņemot vērā, ka \hat{H}_d ir Ermita operators un tā matricas elementi ir reāli skaitļi, jāsecina, ka:

$$\langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s (-m_J) m'_I \rangle = \langle s (-m_J) m'_I | \hat{H}_F | s m_J m_I \rangle \quad (5.1.31)$$

5.2 Pilnā sistēmas Hamiltoniāņa īpašvērtības perturbāciju teorijas pirmajā tuvinājumā

Ja AT mijiedarbības enerģija ir ievērojami lielāka par supersīkstruktūras mijiedarbības enerģiju,

$$E_{F \max} \ll E_{AT \min} , \quad (5.2.1)$$

tad, izmantojot nodaļā 5.1. veikto supersīkstruktūras Hamiltoniāņa analīzi ietērpto stāvokļu bāzē, ir iespējams veikt analītisku tuvinājumu, izmantojot perturbāciju teorijas metodes. No nosacījuma (5.2.1) izriet, ka ietērpto stāvokļu bāzē sistēmas Hamiltoniāņa \hat{H}_{RVT} (4.4.73) diagonāles elementu moduļi ir daudz lielāki, nekā supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāņa \hat{H}_F nediagonālie matricas elementi. Perturbāciju teorijas nedeģenerētiem stāvokļiem pirmajā tuvinājumā nediagonālos pilnā sistēmas Hamiltoniāņa

$$\hat{H} = \hat{H}_{RVT} + \hat{H}_F \quad (5.2.2)$$

matricas elementus, kas savā starpā saista nedeģenerētus ietērptos stāvokļus, var neņemt vērā, kas atbilst pieņēmumam:

$$\hat{H}_{n1} \approx \hat{0} \quad (5.2.3)$$

$$\hat{H}_{n2} \approx \hat{0} \quad (5.2.4)$$

Šim tuvinājumam atbilstošais pilnais sistēmas Hamiltoniānis tiks apzīmēts ar indeksu $p1$:

$$\hat{H}_{p1} = \hat{H}_{RVT} + \hat{H}_s + \hat{H}_d \quad (5.2.5)$$

Atbilstoši (5.1.12), operators \hat{H}_s ietērpto stāvokļu bāzē ir diagonāls, līdz ar to šī operatora iedarbības rezultātā ietērpto stāvokļu enerģijas nobīdās. Operators \hat{H}_d savā starpā saista noteiktus deģenerētu ietērpto stāvokļu pārus. Lai noskaidrotu supersīkstruktūras mijiedarbības rezultātā radušās ietērpto stāvokļu enerģiju nobīdes, nepieciešams atrast \hat{H}_{p1} īpašvērtību spektru. Kā tika minēts iepriekš, precīzā sistēmas Hamiltoniāņa \hat{H} īpašvērtību analītiskā forma ir ārkārtīgi sarežģīta, un pat vienkāršām sistēmām Hamiltona matricas īpašvērtības nepieciešams meklēt ar skaitlisku metožu palīdzību. Hamiltoniāņa \hat{H}_{p1} īpašvērtību analītiskā forma ir daudz vienkāršāka, jo, ņemot vērā, ka nediagonālos elementus satur tikai \hat{H}_d un nediagonālie elementi saista tikai noteiktus ietērpto stāvokļu pārus, sarežģītākā matemātiskā

darbība ir 2×2 matricas īpašvērtību atrašana:

$$\begin{vmatrix} A - \lambda & C \\ C & B - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (5.2.6)$$

$$\lambda = \frac{1}{2} \left(A + B \pm \sqrt{(A - B)^2 + 4C^2} \right) \quad (5.2.7)$$

Spriežot analogiski kā nodaļā 4.4., definējot ietērpto stāvokļu bāzi, arī šajā gadījumā matricas īpašstāvokļi ir diagonālajiem elementiem atbilstošo ietērpto stāvokļu lineāras superpozīcijas. Tomēr, tā kā \hat{H}_d nediagonālie elementi saista tikai dažus ietērptos stāvokļus, nav nepieciešams situācijas aprakstu sarežģīt, definējot jaunus stāvokļus raksturojošos kvantu skaitļus. Neieslīgstot detaļās, ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras līmeņu enerģijas var pierakstīt kā funkcijas no kvantu skaitļa s un diviem katru ietērpto stāvokli identificējošiem kvantu skaitļu komplektiem m_J, m_I un m'_J, m'_I .

Ja sistēmā ietērptajam stāvoklim $|s, m_J, m_I\rangle$ eksistē atbilstošs $|s, -m_J, m'_I\rangle$ stāvoklis, kuram spēkā nosacījumi:

1. $m'_I = m_I + 2m_J$

2. ja $m_J > 0$:

$$m_J \leq I$$

$$-I \leq m_I \leq I - 2 \min(|m_J|)$$

$$-I + 2 \min(|m_J|) \leq m'_I \leq I$$

3. ja $m_J < 0$:

$$m_J \geq -I$$

$$-I + 2 \min(|m_J|) \leq m_I \leq I$$

$$-I \leq m'_I \leq I - 2 \min(|m_J|),$$

tad ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras līmeņa enerģija aprēķināma šādi:

$$\begin{aligned} E_{p1}(s, m_J, m_I, m'_J, m'_I) &= \\ &= E_{s, m_J} + \frac{H_s(s, m_J, m_I) + H_s(s, -m_J, m'_I)}{2} + \\ &\frac{m_J}{2|m_J|} \sqrt{(H_s(s, m_J, m_I) - H_s(s, -m_J, m'_I))^2 + 4 \left(\langle s m_J m_I | \hat{H}_d | s -m_J m'_I \rangle \right)^2} \end{aligned} \quad (5.2.8)$$

Šeit

$$H_s(s, m_J, m_I) \equiv \langle s m_J m_I | \hat{H}_s | s m_J m_I \rangle \quad (5.2.9)$$

Savukārt, ja šādu pāri izveidot nav iespējams, tad ietērtā stāvokļa supersikstruktūras komponentes enerģiju var aprēķināt šādi:

$$\begin{aligned}
E_{p1}(s, m_J, m_I) &= E_{s, m_J} + \langle s m_J m_I | \hat{H}_s | s m_J m_I \rangle = \\
&= E_{s, m_J} + \left(\sum_{F_g} \cos^2 \theta_{s, m_J} \langle g m_J m_I | g F_g (m_J + m_I) \rangle^2 \Delta E_{F, J_g, I} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{F_e} \sin^2 \theta_{s, m_J} \langle e m_J m_I | e F_e (m_J + m_I) \rangle^2 \Delta E_{F, J_e, I} \right) \quad (5.2.10)
\end{aligned}$$

5.3 Analītiskā tuvinājuma precizitātes novērtējums

Jebkura izteiksme, kas iegūta ar tuvinājumu palīdzību, ir izmantojama praktisku aprēķinu veikšanā tikai tad, ja zināms tās precizitātes novērtējums. Lai novērtētu nodaļā 5.2. iegūto izteiksmju (5.2.8) un (5.2.10) precizitāti, ar šīm formulām iegūtās līmeņu enerģijas jāsalīdzina ar precīzā sistēmas Hamiltoniāņa \hat{H} (5.2.2) īpašvērtībām. Tā kā precīzā Hamiltoniāņa īpašvērtību analītiskās izteiksmes ir sarežģītas, šajā nodaļā tiks salīdzinātas īpašvērtību skaitliskās vērtības, kas iegūtas, aplūkojot sistēmas ar specifiski izvēlētiem kvantu skaitļiem J_g , J_e un I gadījumā, kad ārējais lauks noskaņots tieši uz dipola pārejas rezonanses frekvences, $\Delta = 0$.

Vispirms tika aplūkota vienkāršākā iespējamā sistēmas konfigurācija, kuras precīzā Hamiltoniāņa īpašvērtības ir iespējams uzrakstīt analītiskā formā,

$$J_g = J_e = I = \frac{1}{2}$$

Šajā gadījumā sistēmu veido astoņi ietērtie stāvokļi. Ja supersikstruktūras mijiedarbība netiek ņemta vērā, tad stāvokļi ir deģenerēti pēc kvantu skaitļiem m_J un m_I (5.1. att.). Savukārt, ja supersikstruktūras mijiedarbība tiek ņemta vērā, tad šī deģenerācija daļēji izzūd (5.2. att.). Attēlā (5.4. att.) parādīts, kā mainās analītiskās izteiksmes rezultāta maksimālā relatīvā novirzes no precīzā Hamiltoniāņa īpašvērtības E_p atkarībā no supersikstruktūras mijiedarbības un AT mijiedarbības stiprumu raksturojošo parametru A_g un Q attiecības. Attēlā (5.5. att.) parādīta šo pašu lielumu savstarpējā saistība sistēmā:

$$J_g = J_e = \frac{1}{2}, I = \frac{3}{2}$$

Arī šādas sistēmas precīzā Hamiltoniāņa īpašvērtības ir iespējams iegūt analītiskā formā. Savukārt attēlā (5.6. att.) parādīta šo lielumu savstarpējā saistība sistēmā

$$J_g = J_e = \frac{3}{2}, I = \frac{1}{2}$$

Šādas un sarežģītāku sistēmu precīzā Hamiltoniāņa īpašvērtības analītiskā formā ir praktiski neiespējami uzrakstīt, tādēļ tās nepieciešams iegūt ar skaitlisku metožu palīdzību noteiktām

sistēmas parametru vērtībām.

Sarežģītākām sistēmām metodes analītiskās formulas rezultātu atbilstību precīzajiem atrisinājumiem vispārīgā gadījumā ir ļoti grūti attēlot grafiski, jo pie $I, J > \frac{1}{2}$ šajā aprakstā nepieciešams iekļaut arī elektriskā kvadrupola konstantes pamata un ierosinātajam līmenim. Tādēļ, aplūkojot sarežģītākas sistēmas, analītisko izteiksmju atbilstību patiesajām enerģijas vērtībām nepieciešams izvērtēt tieši izvēlētajai sistēmai ar noteiktiem koeficientiem A_η un B_η . Lai uzskatāmi demonstrētu, ka darbā iegūtā izteiksme ir piemērojama arī sarežģītākām sistēmām, attēlā 5.3. parādīts analītiskās izteiksmes un skaitlisko aprēķinu rezultātu salīdzinājums sistēmā:

$$J_g = J_e = I = \frac{3}{2}, \quad (5.3.1)$$

gadījumā, kad supersīkstruktūras mijiedarbību raksturojošās konstantes ir:

$$\begin{aligned} A_g &= 3MHz \\ B_g &= 1MHz \\ A_e &= 1MHz \\ B_e &= 1MHz \end{aligned} \quad (5.3.2)$$

Analizējot datus, kas iegūti, veicot aprēķinus vienkāršām sistēmām, jāsecina, ka maģistra darba ietvaros izstrādātā metode ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras sašķelšanās analītiskai aprēķināšanai ir pielietojama gadījumos, kad AT mijiedarbību raksturojošais lielums Q ir vismaz par kārtu lielāks, nekā lielākā magnētiskā dipola konstante A_η . Augstāku sakritību novēro gadījumos, kad konstantes A_g un A_e ir aptuveni vienādas. Diemžēl šāda situācija reālos atomos nav novērojama, jo, palielinoties sīkstruktūras līmeņa enerģijai, supersīkstruktūras mijiedarbību raksturojošās konstantes strauji dilst.

5.4 Eksperimentālas novērošanas iespēju novērtējums

Pētot sistēmas īpašstāvokļu enerģijas maiņu Autlera - Taunsa efekta dēļ sistēmās ar supersīkstruktūras mijiedarbību, ir svarīgi ievērot, ka iespējami vairāki speciālgadījumi. Zemākajiem sīkstruktūras līmeņiem atomos ir ievērojami lielāka supersīkstruktūras sašķelšanās, nekā ierosinātajiem stāvokļiem. Tā, piemēram, nātrija atoma pamatstāvokļa $3^2S_{1/2}$ supersīkstruktūras sašķelšanās starp līmeņiem $F = 1$ un $F = 2$ ir $1.77GHz$, ierosinātajā stāvoklī $4^2S_{1/2}$ tā ir $407.2MHz$, bet stāvoklī $5^2S_{1/2}$ vairs tikai $155.2MHz$ [24].

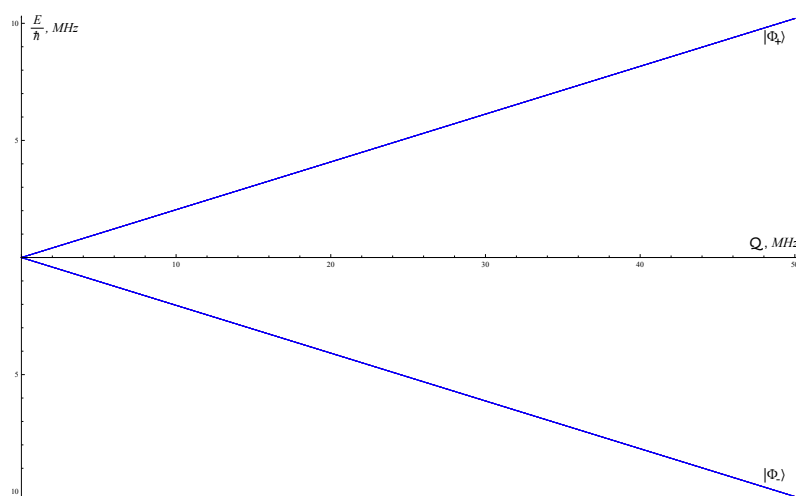
Lai novērtētu supersīkstruktūras mijiedarbības un ārējā lauka mijiedarbības enerģijas eksperimentā, kurā ar lāzera staru tiek ierosināta nātrija D_1 līnija ($3^2S_{1/2} \rightarrow 3^2P_{1/2}$), jāaprēķina, kādai jābūt lāzera starojuma intensitātei, lai mijiedarbības enerģijas būtu līdzīgas. No [15] zinām, ka šīs pārejas reducētais dipola matricas elements ir $\langle J_e = 1/2 || d || J_g = 1/2 \rangle \approx 2.11 \cdot 10^{-29} C \cdot m$. Šādā gadījumā iegūst, ka lāzera starā elektriskā

lauka amplitūdai jābūt $\mathcal{E}_0 \propto 10^5 V/m$. Tā kā šāda elektriskā lauka amplitūda ir ievērojami lielāka par nodaļā 3.1. minēto tipisko vērtību $\mathcal{E}_0 \propto 10^3 V/m$, jāsecina, ka tipiskos spektroskopijas novērojumos zemu ierosinātiem atomu stāvokļiem supersīkstruktūras mijiedarbība ir ievērojami spēcīgāka par mijiedarbību ar ārējo lauku, $\langle \hat{H}_F \rangle \gg \langle \hat{V} \rangle$.

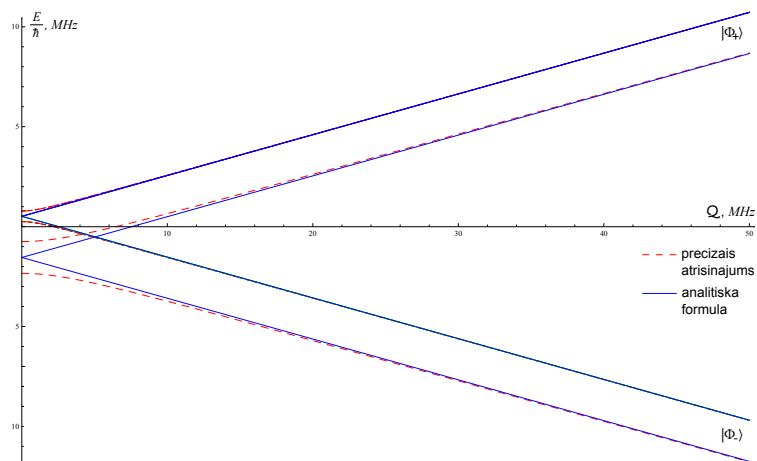
Izmantojot nodaļā 3.1. norādīto elektriskā lauka intensitātes vērtību un nātrija D_1 līnijas parametrus, var aprēķināt tipiski iegūstamo mijiedarbības ar ārējo lauku enerģiju,

$$\frac{\langle \hat{V} \rangle}{\hbar} \approx 150 MHz \quad (5.4.1)$$

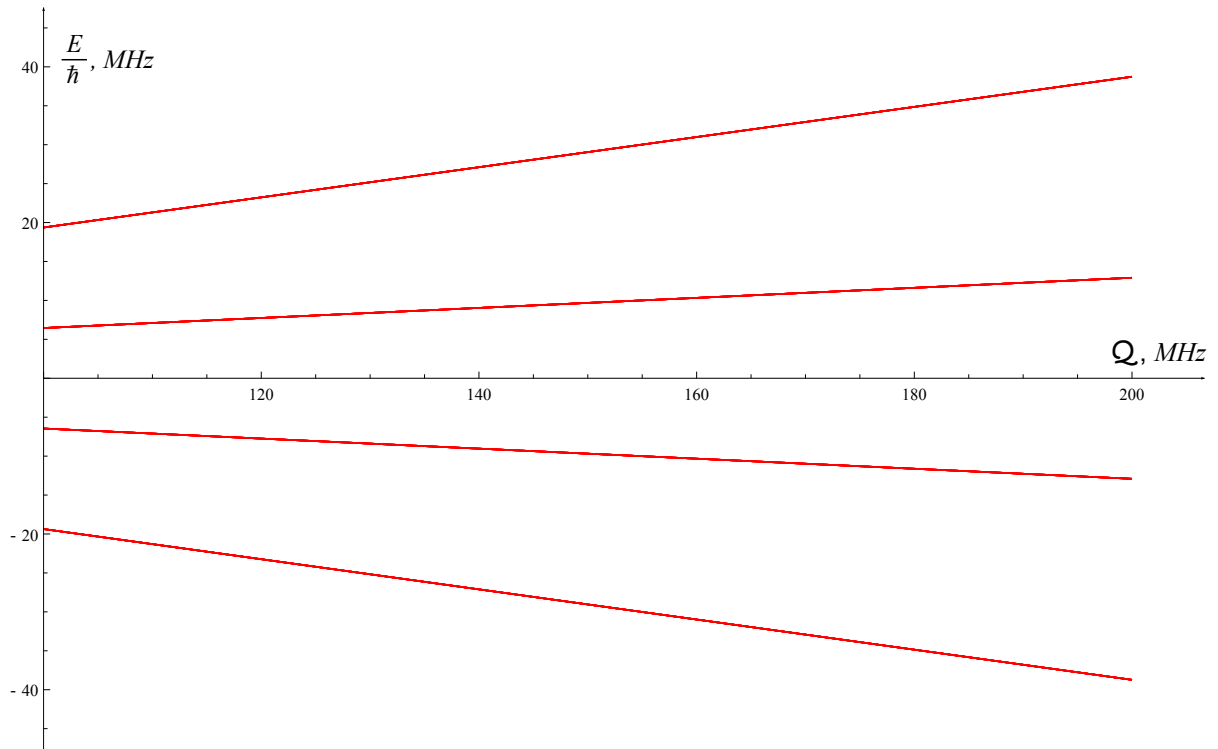
Līdz ar to jāsecina, ka situāciju, kad $E_{F \max} \ll E_{AT \min}$, var novērot tikai pārejās starp augsti ierosinātiem atomu līmeņiem. Savukārt samērā viegli būtu iegūstama situācija, kad pamatstāvoklī ir spēkā nosacījums $E_{F \min} \gg E_{AT \max}$, bet ierosinātajā stāvoklī $E_{F \max} \ll E_{AT \min}$. Tā kā darbā aplūkoti tuvinājumi šādā situācijā nav pielietojami, ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras teoriju nepieciešams vēl pilnveidot. Lai gūtu eksperimentālu apstiprinājumu darbā iegūtajiem teorētiskajiem rezultātiem, nepieciešams rūpīgi izvērtēt pieejamās aparatūras iespējas un jāizvēlas tādas konfigurācijas elektriskā dipola pārejas, kurām ir spēkā nepieciešamais nosacījums $E_{F \max} \ll E_{AT \min}$, un kuras ir iespējams ierosināt ar pieejamo aparatūru.



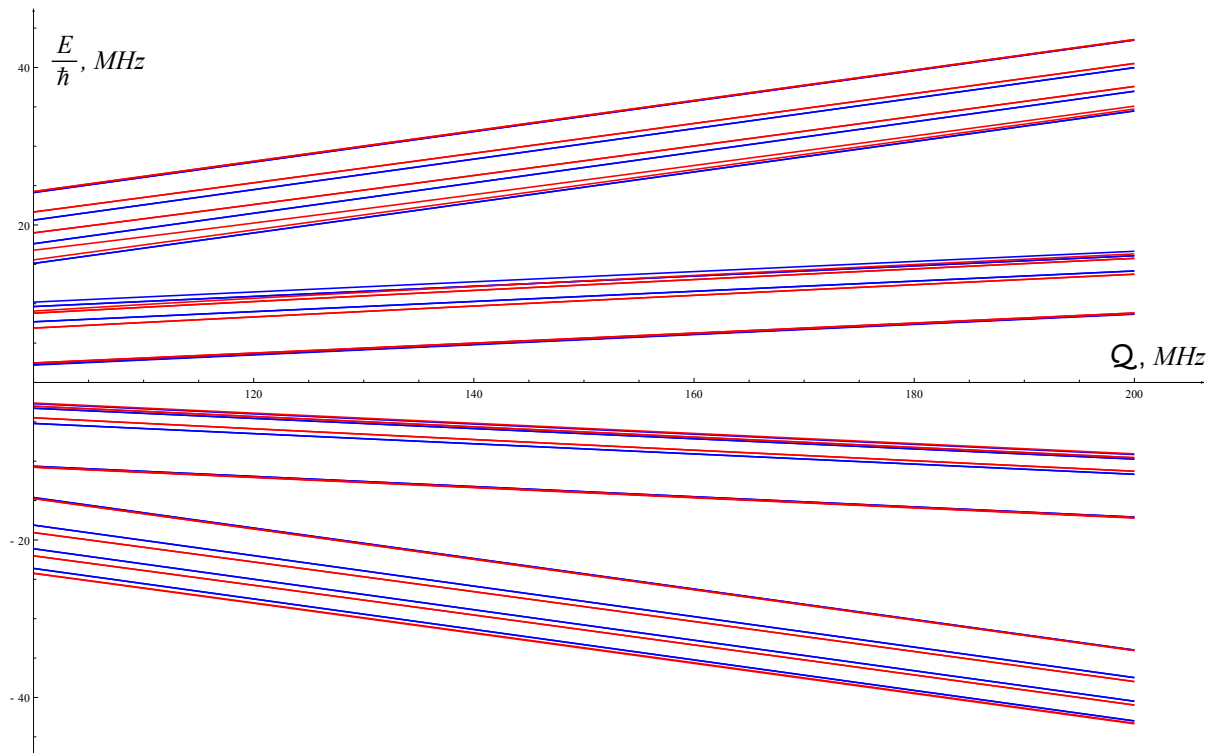
5.1. att. Ietērpto stāvokļu enerģiju atkarība no AT mijiedarbības stiprumu raksturojošā parametra Q . Sistēmas parametri: $J_g = J_e = I = \frac{1}{2}$. Supersīkstruktūras mijiedarbība nav ņemta vērā, tādēļ analītiskās formulas rezultāti un precīzā Hamiltoniāņa īpašvērtības sakrīt



5.2. att. Ietērpto stāvokļu enerģiju atkarība no AT mijiedarbības stiprumu raksturojošā parametra Q . Sistēmas parametri: $J_g = J_e = I = \frac{1}{2}$, $A_g = 4MHz$, $A_g = 1MHz$. Supersikstruktūras mijiedarbības dēļ ietērpto stāvokļu deģenerācija daļēji izzūd, pie maziem Q analītiskās formulas rezultāti un precīzā Hamiltoniāņa īpašvērtības ievērojami atšķiras, bet, pieaugot Q , precīzā Hamiltoniāņa īpašvērtības asimptotiski tiecas uz analītiskā atrisinājuma vērtībām

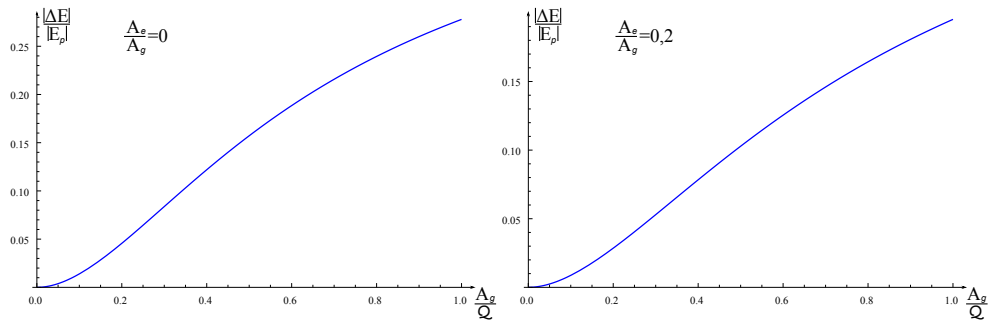


(a)



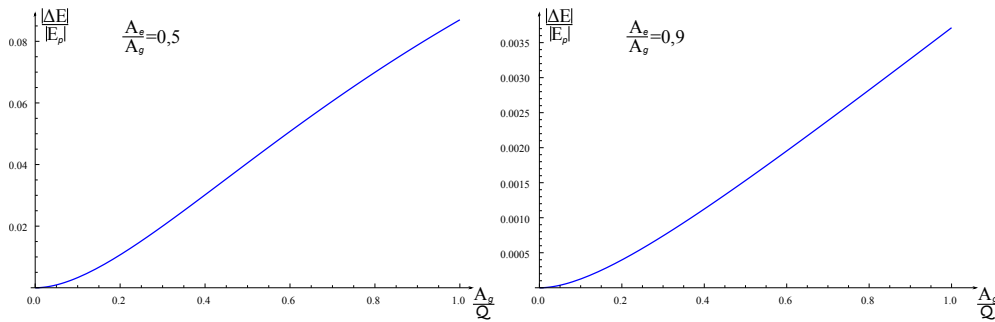
(b)

5.3. att. Ietērpto stāvokļu sašķelšanās supersikstruktūrā sistēmā $J_g = J_e = I = \frac{3}{2}$, pie $A_g = 3MHz$, $A_e = 1MHz$, $B_g = 1MHz$, $B_e = 1MHz$. (a) Ietērpto stāvokļu enerģijas, kas aprēķinātas, neņemot vērā supersikstruktūras mijiedarbību; (b) Ietērpto stāvokļu supersikstruktūra. Ar zilajām līnijām grafikā atzīmētas ar analītisko izteiksmi iegūtās enerģijas



(a)

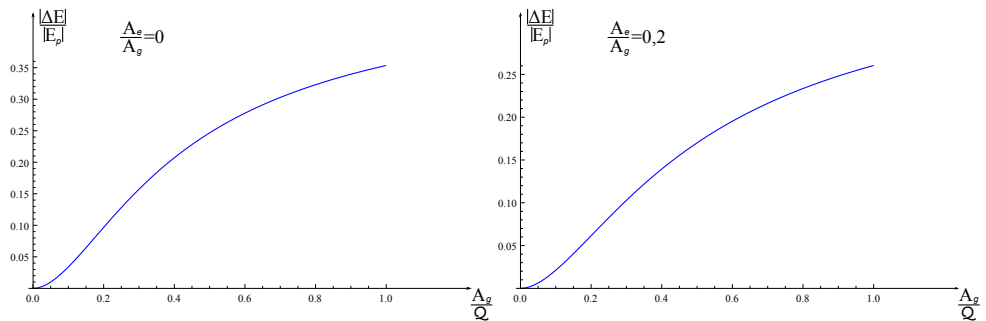
(b)



(c)

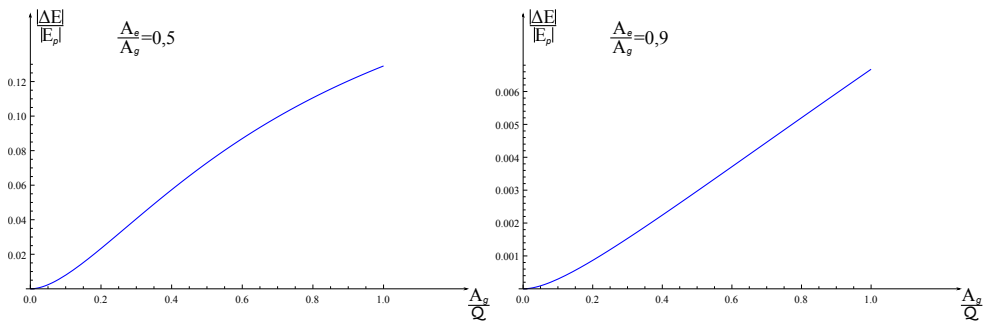
(d)

5.4. att. Analītiskās izteiksmes rezultātu precizitātes novērtējums sistēmā $J_g = J_e = I = \frac{1}{2}$. Analītiskās izteiksmes rezultāta maksimālās relatīvā novirzes no precīzā Hamiltoniāņa īpašvērtības E_p (y ass) atkarība no supersikstruktūras mijiedarbības un AT mijiedarbības stiprumu raksturojošo parametru A_g un Q attiecības (x ass)



(a)

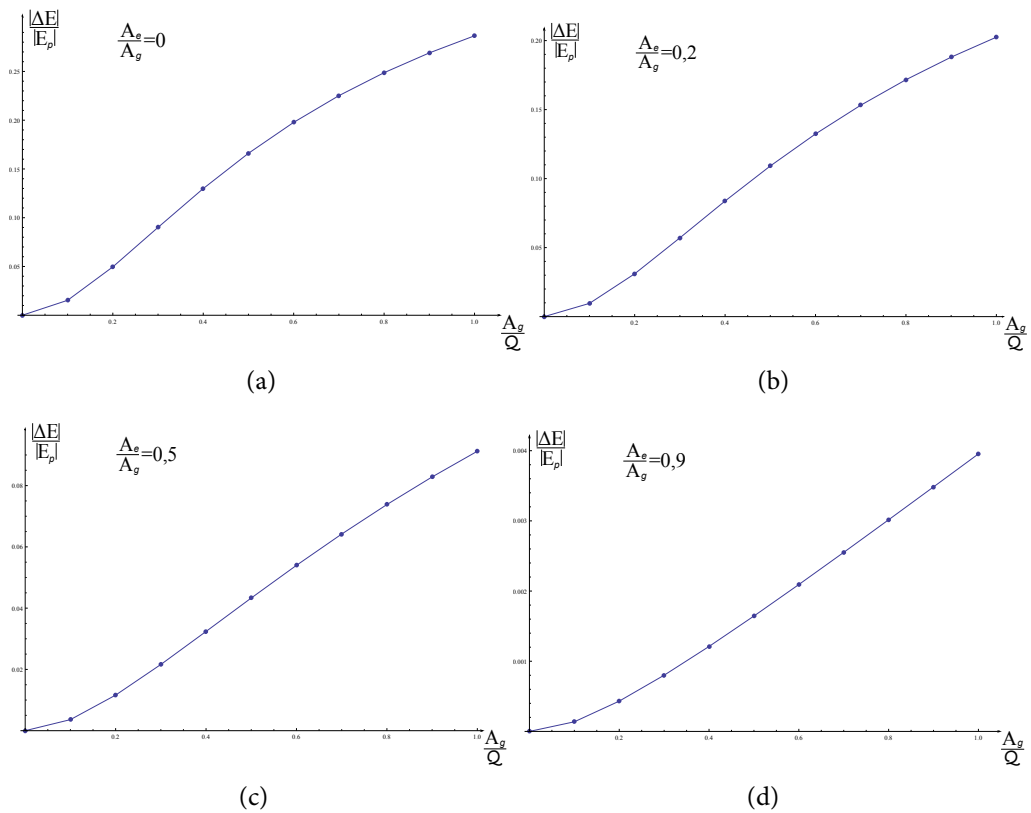
(b)



(c)

(d)

5.5. att. Analītiskās izteiksmes rezultātu precizitātes novērtējums sistēmā $J_g = J_e = \frac{1}{2}$, $I = \frac{3}{2}$. Analītiskās izteiksmes rezultāta maksimālās relatīvā novirzes no precīzā Hamiltoniāņa īpašvērtības E_p (y ass) atkarība no supersikstruktūras mijiedarbības un AT mijiedarbības stiprumu raksturojošo parametru A_g un Q attiecības (x ass)



5.6. att. Analītiskās izteiksmes rezultātu precizitātes novērtējums sistēmā $J_g = J_e = \frac{3}{2}$, $I = \frac{1}{2}$. Analītiskās izteiksmes rezultāta maksimālās relatīvā novirzes no precizā Hamiltoniāņa īpašvērtības E_p (y ass) atkarība no supersikstruktūras mijiedarbības un AT mijiedarbības stiprumu raksturojošo parametru A_g un Q attiecības (x ass)

REZULTĀTI

6 DARBA REZULTĀTI UN DISKUSIJA

Analizējot supersīkstruktūras mijiedarbības Hamiltoniāni ietērpto stāvokļu bāzē, tika iegūta precīzā izteiksme šīs mijiedarbības Hamiltoniāņa matricas atrašanai,

$$\begin{aligned} \langle s m_J m_I | \hat{H}_F | s' m'_J m'_I \rangle = & \\ & \sum_{F_g, m_{F_g}} \cos \theta_{s, m_J} \cos \theta_{s', m'_J} \langle g m_J m_I | g F_g m_{F_g} \rangle \langle g F_g m_{F_g} | g m'_J m'_I \rangle \Delta E_{F, J, I} + \\ & + \sum_{F_e, m_{F_e}} \sin \theta_{s, m_J} \sin \theta_{s', m'_J} \langle e m_J m_I | e F_e m_{F_e} \rangle \langle e F_e m_{F_e} | e m'_J m'_I \rangle \Delta E_{F, J, I} \end{aligned}$$

Šeit θ_{s, m_J} ir ar ārējo lauku ietērtā stāvokļa sajaukšanās leņķis, kurš definēts ar vienādojumiem (4.4.69) un (4.4.70); $\langle g m_J m_I | g F_g m_{F_g} \rangle$ ir Klebša - Gordāna koeficienti,

$$\langle g m_J m_I | g F_g m_{F_g} \rangle \equiv \langle J_g m_{J, g} I m_I | F_g m_{F_g} \rangle$$

Savukārt $\Delta E_{F, J, I}$ ir supersīkstruktūras mijiedarbības enerģija, kuras tuvinātai aprēķināšanai var izmantot izteiksmi (2.6.4).

Analizējot šo izteiksmi, ar perturbāciju teorijas metodēm nedeģenerētiem stāvokļiem, tika iegūtas analītiskas izteiksmes pilnā sistēmas Hamiltoniāņa \hat{H} īpašvērtību atrašanai gadījumā, kad AT mijiedarbība ir daudz spēcīgāka par supersīkstruktūras mijiedarbību: ja sistēmā ietērtajam stāvoklim $|s, m_J, m_I\rangle$ eksistē atbilstošs $|s, -m_J, m'_I\rangle$ stāvoklis, kuram spēkā šādi nosacījumi:

1. $m'_I = m_I + 2m_J$

2. ja $m_J > 0$:

$$m_J \leq I$$

$$-I \leq m_I \leq I - 2 \min(|m_J|)$$

$$-I + 2 \min(|m_J|) \leq m'_I \leq I$$

3. ja $m_J < 0$:

$$m_J \geq -I$$

$$-I + 2 \min(|m_J|) \leq m_I \leq I$$

$$-I \leq m'_I \leq I - 2 \min(|m_J|),$$

tad ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras līmeņa enerģija aprēķināma šādi:

$$\begin{aligned}
E_{p1}(s, m_J, m_I, m'_J, m'_I) &= \\
&= E_{s, m_J} + \frac{H_s(s, m_J, m_I) + H_s(s, -m_J, m'_I)}{2} + \\
&\frac{m_J}{2|m_J|} \sqrt{(H_s(s, m_J, m_I) - H_s(s, -m_J, m'_I))^2 + 4 \left(\langle s m_J m_I | \hat{H}_d | s - m_J m'_I \rangle \right)^2}
\end{aligned}$$

Šeit E_{s, m_J} ir ietērtā stāvokļa enerģija, kas aprēķināta atbilstoši izteiksmei (4.4.75); $H_s(s, m_J, m_I)$ ir supersīkstruktūras Hamiltoniāņa diagonāles elements, kas aprēķināts, izmantojot formulu (5.1.17); $\langle s m_J m_I | \hat{H}_d | s - m_J m'_I \rangle$ - operatora \hat{H}_d matricas elements, kura aprēķināšanai izmanto formulu (5.1.21).

Savukārt, ja šādu pāri izveidot nav iespējams, proti, neizpildās kaut viens no augstāk minētajiem nosacījumiem, tad ietērtā stāvokļa supersīkstruktūras komponentes enerģiju var aprēķināt šādi:

$$\begin{aligned}
E_{p1}(s, m_J, m_I) &= E_{s, m_J} + \langle s m_J m_I | \hat{H}_s | s m_J m_I \rangle = \\
&= E_{s, m_J} + \left(\sum_{F_g} \cos^2 \theta_{s, m_J} \langle g m_J m_I | g F_g (m_J + m_I) \rangle^2 \Delta E_{F, J_g, I} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{F_e} \sin^2 \theta_{s, m_J} \langle e m_J m_I | e F_e (m_J + m_I) \rangle^2 \Delta E_{F, J_e, I} \right)
\end{aligned}$$

Salīdzinot ar analītisko izteiksmi aprēķinātās ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras līmeņu enerģijas un īpašvērtības, kuras iegūtas no precīzās pilnā Hamiltoniāņa izteiksmes ar skaitlisku metožu palīdzību, tika konstatēts, ka analītiskā izteiksme labi apraksta precīzā Hamiltoniāņa īpašvērtību asimptotiku spēcīgas AT mijiedarbības gadījumā (skat. attēlus 5.2. - 5.6.).

Tā kā gadījumos, kad AT mijiedarbība ir ar līdzīgu kārtu kā supersīkstruktūras mijiedarbību raksturojošā magnētiskā dipola konstante A , analītiskās izteiksmes rezultāti atšķiras no precīzajām īpašstāvokļu enerģiju vērtībām (skat. attēlus 5.4. - 5.6.), gatavojoties veikt eksperimentālus novērojumus konkrētā sistēmā, lai pielietotu analītiskās izteiksmes, nepieciešams noskaidrot, vai tās ar apmierinošu precizitāti apraksta sagaidāmo situāciju. Ja kāda no sistēmu raksturojošām konstantēm, piemēram A_e , nav zināma, vispirms nepieciešams aptuveni novērtēt sagaidāmo konstantes vērtību, un tad veikt piedāvātās metodes piemērotības analīzi.

Atbilstoši literatūras apskatam, līdz šim pasaules zinātnē nav iegūta analītiska izteiksme ar ārēju lauku ietērpto atoma stāvokļu supersīkstruktūras komponentu enerģiju aprēķināšanai, bet ir veiktas vienīgi skaitliskas simulācijas specifiskās kvantu sistēmās. Tādēļ darbā aplūkots ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras veidošanās teorētiskais apskats un iegūtās analītiskās izteiksmes ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras komponentu enerģiju noteikšanai ir uzskatāmi par principiāli jaunu rezultātu pasaules zinātnē. Izmantojot darbā iegūto ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras sašķelšanās enerģijas analītisko formulu, ir iespējams prognozēt

supersīkstruktūras mijiedarbības ietekmi uz atomu stāvokļu interferences eksperimentu rezultātiem. Protams, ir nepieciešams pilnveidot ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras teoriju, paplašinot tās pielietojamību atomu un molekulu sistēmās.

7 SECINĀJUMI

Visi uzsākot darbu izvirzītie darba mērķi ir sasniegti un uzdevumi izpildīti. Ir izstrādāta teorētiskā bāze tālākas ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras pētniecībai. Pirmo reizi iegūta analītiska izteiksme, kas labi apraksta ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras līmeņu enerģiju asimptotiku spēcīgas AT mijiedarbības gadījumā. Darbā analizēta šīs izteiksmes pielietojamības robežas reālās sistēmās, kā arī norādīti turpmākas pētniecības virzieni. Iegūto rezultātu ir iespējams pielietot, analizējot supersīkstruktūras mijiedarbības ietekmi uz koherentas stāvokļu apdzīvotību pārslēgšanas eksperimentiem.

Tā kā darba rezultāti ir pielietojami paredzētajā sistēmas parametru apgabalā, jāuzskata, ka ir attaisnots perturbāciju teorijas nedeģenerētiem stāvokļiem pielietojums darba uzdevumu sasniegšanā.

Turpinot ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras izpēti, nepieciešams pilnveidot ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras teoriju. Tā kā tipiski atomiem pamatstāvoklī supersīkstruktūras sašķelšanās enerģija ir lielāka, nekā maksimālā sasniedzamā AT mijiedarbības enerģija, nepieciešams attīstīt ietērpto stāvokļu supersīkstruktūras teorētisko bāzi gadījumam, kad darbā aplūkotā speciālgadījuma nosacījums ir spēkā tikai vienam no sistēmas stāvokļiem, savukārt otrā stāvoklī supersīkstruktūras mijiedarbības enerģija salīdzināma vai ievērojami lielāka par AT mijiedarbības enerģiju.

PATEICĪBAS

Vēlos izteikt pateicību darba vadītājam Dr. Phys Vjačeslavam Kaščejevam par doto iespēju izstrādāt šo darbu, kā arī par ieguldītajām pūlēm un vērtīgajiem padomiem no teorētiskās fizikas viedokļa, kam bija liela nozīme darba tapšanā.

Pateicos Latvijas Universitātes Lāzeru centra Molekulāro kūļu laboratorijas kolektīvam par sniegtajām zināšanām Autlera - Taunsa efekta eksperimentālā novēršanā kā arī par sniegto palīdzību darba tehniskajā noformēšanā.

Vēlos pateikties savai sievai par sniegto atbalstu un iecietību visā darba tapšanas laikā.

IZMANTOTĀ LITERATŪRA UN AVOTI

- [1] **Stark J.**, *Structural and Spectral Changes of Chemical Atoms*, Nobel lectures. Physics 1901 - 1921, Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1967
- [2] **Fox A. M.**, *Quantum optics: an introduction*, Oxford University Press, 2006
- [3] **Autler S. H., Townes C. H.**, *Stark effect in rapidly varying fields*, Phys. rev. vol. 100. p.703-722, 1955
- [4] **Alam S.**, *Lasers without inversion and electromagnetically induced transparency*, SPIE Press, 1999
- [5] **Garcia-Fernandez R., Ekers A., Shore B. W. et al.**, *Investigation of Autler-Townes effect in sodium dimers*, M.V. Akulin et al. (ed.) Decoherence, Entanglement and Information Protection in Complex Quantum Systems, Springer, 2005
- [6] **Martin J., Shore B. W., Bergmann K.**, *Coherent population transfer in multilevel systems with magnetic sublevels. II. Algebraic analysis*, Phys. Rev. A 54, no2, 1995
- [7] **Kuhn A., Steuerwald S., Bergmann K.**, *Coherent population transfer in NO with pulsed lasers: the consequences of hyperfine structure, Doppler broadening and electromagnetically induced absorption*, Eur. Phys. J. D. 1, 57-70, 1998
- [8] **Kirova T., Ekers A., Bezuglov N. N. et al.**, *Conditions and limitations for resolution of hyperfine structure in the Autler-Townes spectra*, Proceedings of the MPLP Symposium (Novosibirsk, Russia, 2008,
- [9] **Auzinsh M., Budker D., Rochester S. M.**, *Optically polarized atoms. Understanding light-atom interactions*, Oxford University Press, 2010
- [10] **Sobleman I. I.**, *Atomic Spectra and Radiative Transitions*, Springer-Verlag, 1979
- [11] **Demtröder W.**, *Atoms, Molecules and Photons: An Introduction to Atomic- Molecular- and Quantum Physics*, Springer, 2010
- [12] **Drake G. W. F.**, *Springer handbook of atomic, molecular, and optical physics. Vol.1*, Springer, 2006
- [13] **Herzberg G.**, *Atomic spectra and atomic structure*, Dover Publications, 1944
- [14] **Rudzikas Z.**, *Theoretical atomic spectroscopy*, Cambridge University Press 1997
- [15] **Steck D. A.**, *Sodium D line data*, Available online at <http://steck.us/alkalidata/sodiumnumbers.pdf>, dec. 2010
- [16] **Hecht E.**, *Optics*, Addison-Wesley, 2002

- [17] **Hill W. T., Lee C. H.**, *Light-matter interaction: atoms and molecules in external fields and nonlinear optics*, Wiley-VCH, 2007
- [18] **Siegman A. E.**, *Lasers*, University Science Books, 1986
- [19] **Mandel L., Wolf E.**, *Optical coherence and quantum optics*, Cambridge University Press, 1995
- [20] **Vogel W., Welsch D.-G.**, *Quantum optics*, Wiley-VCH, 2006
- [21] **Loudon R.**, *Quantum theory of light, 3rd ed.*, Oxford University Press 2000
- [22] **Bezuglov N. N. et al.**, *Consequences of optical pumping and interference for excitation spectra in a coherently driven molecular ladder system*, Phys. rev. A, Vol. 78, 2008
- [23] **Molisch A. F., Oehry B. P.**, *Radiation trapping in atomic vapours*, Oxford University Press, 1998
- [24] **Sansonetti J. E.**, *Wavelengths, transition probabilities, and energy levels for the spectra of sodium*, J. Phys. Chem. Ref. Data Vol 37 no4, 2008

Maģistra darbs „Ar lāzeru lauku ietērpito stāvokļu supersīkstruktūra: teorētiskais apraksts un eksperimentālās izpētes iespējas sārnu metālu atomu kūļos” izstrādāts LU Fizikas un matemātikas fakultātē.

Ar savu parakstu apliecinu, ka pētījums veikts patstāvīgi, izmantoti tikai tajā norādītie informācijas avoti un iesniegtā darba elektroniskā kopija atbilst izdrukai.

Autors: Artūrs Ciniņš _____

/paraksts/

Rekomendēju darbu aizstāvēšanai

Darba vadītājs: Dr. phys Vjačeslavs Kaščejevs _____

/paraksts/

Recenzents: Dr. habil phys Uldis Rogulis

Darbs iesniegts Fizikas nodaļā _____ . _____ . 2011.

Izglītības metodiķe: Ārija Deme _____

/paraksts/

Darbs aizstāvēts maģistra gala pārbaudījumu komisijas sēdē

_____ . _____ . 2011. protokols Nr. ____, vērtējums _____

Komisijas sekretārs: Docents Vladimirs Ivins _____

/paraksts/