26.04.09

2.05.09

9.05.09

Заметки для работы по двухфотонному переходу в Ba

26.04.09 – двухфотонный переход в магнитном поле

02.05.09 – сверхтонкое смешивание верхнего уровня $^3D_1(5d6d)$

09.05.09 – замечание по поводу кулоновского смешивания уровней $^3D_J(5d6d)$ и $^3D_J(6s7d)$

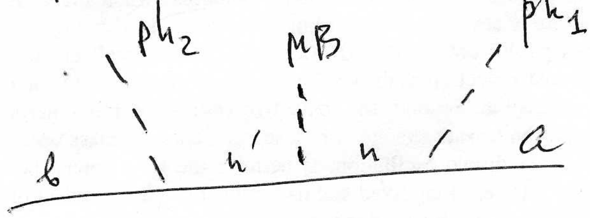
26.04.09-1

Двухфотонный переход в магнитном поле

Имеем в виду, что Зеемановское расщепление промежуточного уровня снимает запрет на двухфотонный переход $0 \to 1$.

Как это увидеть?

Кажется, тут не стоит использовать неприводимые амплитуды т.к. теперь у нас ~~взаимодействие~~ процесс включает 3 фотона и $\Rightarrow$ тогда надо говорить о трехфотонной амплитуде, что, наверное, перебор.



— Видно, что фотоны 1 и 2 разделены и связать их в неприводимую амплитуду — нельзя не включив μB.

Поэтому, будем использовать приводимую амплитуду

$$A_{qq'} = \sum_{M_n} \frac{\langle b|r_q|n\rangle\langle n|r_{q'}|a\rangle + \langle b|r_{q'}|n\rangle\langle n|r_q|a\rangle}{\frac{E_b+E_a}{2} - (E_n + \mu_0 g_n B_0 M_n)} \qquad (1)$$

(здесь $\mu_0 = \frac{\alpha}{2} > 0$)

Разложим знаменатель:

$$\frac{E_b+E_a}{2} - E_n - \mu_0 g_n B_0 M_n \equiv \Delta_n \left(1 - \frac{\mu_0 g_n B_0}{\Delta_n} M_n\right) \qquad (2)$$

Т.о.

$$A_{qq'} = A^{(0)}_{qq'} + A^{(1)}_{qq'} \qquad (3)$$

$$A^{(0)}_{qq'} = \sum_{M_n} \frac{\langle b|r_q|n\rangle\langle n|r_{q'}|a\rangle + \langle b|r_{q'}|n\rangle\langle n|r_q|a\rangle}{\Delta_n} \qquad (4)$$

$$= \frac{\langle n\|r\|b\rangle\langle n\|r\|a\rangle}{\Delta_n} \sum_{M_n} (-1)^{2J_n-M_b-M_n} \left[\begin{pmatrix} b & 1 & n \\ -M_b & q & M_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} n & 1 & a \\ -M_n & q' & M_a \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b & 1 & n \\ -M_b & q' & M_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} n & 1 & a \\ -M_n & q & M_a \end{pmatrix}\right]$$

Аналогично,

$$A^{(1)}_{qq'} = \frac{\mu_0 g_n B_0 \langle n\|r\|b\rangle\langle n\|r\|a\rangle}{\Delta_n^2} \qquad (5)$$

$$\sum_{M_n} (-1)^{2J_n-M_b-M_n} M_n \left[\begin{pmatrix} b & 1 & n \\ -M_b & q & M_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} n & 1 & a \\ -M_n & q' & M_a \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b & 1 & n \\ -M_b & q' & M_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} n & 1 & a \\ -M_n & q & M_a \end{pmatrix}\right]$$

У нас частный случай $J_a = 0$, $J_n = J_b = 1$

Т.о. есть всего несколько комбинаций q и q'

(A) $q = q' = 0 \Rightarrow M_b = M_n = M_a = 0$. Тогда в (4) и (5) есть кleбши $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow$

$$\boxed{A^{(0)}_{00} = A^{(1)}_{00} = 0} \qquad (6)$$

26.04.09 – 3

(B) $q=0 \quad q'=\lambda$

тогда имеем два члена $M_u=0$ и $M_u=\lambda$; $M_a=0$, $M_b=\lambda$

Сумма в (4) имеет вид:

$$(-1)^{2-\lambda-\lambda}\begin{pmatrix}1&1&1\\ -\lambda&0&\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1&0\\ -\lambda&\lambda&0\end{pmatrix}+(-1)^{2-\lambda-0}\begin{pmatrix}1&1&1\\ -\lambda&\lambda&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1&0\\ 0&0&0\end{pmatrix}$$

$$=\frac{\lambda}{\sqrt6}\frac{1}{\sqrt3}+(-1)\frac{-\lambda}{\sqrt6}\frac{-1}{\sqrt3}=0$$

Сумма в (5) имеет вид:

$$(-1)^{2-2\lambda}\lambda\frac{\lambda}{\sqrt6}\frac{\lambda}{\sqrt3}+0=\frac{1}{3\sqrt2}$$

(C) $q=-q'=\lambda \Rightarrow M_a=M_b=0$, $M_u=\pm\lambda$

Ур-ние (4):

$$(-1)\begin{pmatrix}1&1&1\\ 0&\lambda&-\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1&0\\ \lambda&-\lambda&0\end{pmatrix}+(-1)\begin{pmatrix}1&1&1\\ 0&-\lambda&\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1&0\\ -\lambda&\lambda&0\end{pmatrix}=(-1)\frac{(-1)^{1-\lambda}\lambda}{\sqrt6}\frac{(-1)^{1-1}}{\sqrt3}+(-1)\frac{(-1)^{1+\lambda}(-\lambda)}{\sqrt6}\frac{(-1)^{1-\lambda}}{\sqrt3}$$

$$=\frac{-\lambda}{3\sqrt2}+\frac{\lambda}{3\sqrt2}=0$$

Ур-ние (5):

$$+\frac{\lambda^2}{3\sqrt2}+\frac{\lambda^2}{3\sqrt2}=\frac{\sqrt2}{3}$$

Итак мы видим, что из трех возможностей, Ур-ние (4) обращается в нуль всегда, а Ур-ние (5) обращается в нуль только для $q=q'=0$ т.е. когда оба фотона поляризованы вдоль B

II механизм открывания двухфотонного 26.04.09 – 4

перехода $0 \to 1$ – это смешивание уровня $J_b = 1$ с $J_c \neq 1$.

$$|b\rangle \Rightarrow |b\rangle + \frac{\langle c|\mu_0 B_0 (J+S)|b\rangle}{\Delta_{bc}} |c\rangle$$

$$= |b\rangle + (-1)^{J_c - M_c} \begin{pmatrix} J_c & 1 & J_b \\ -M_c & 0 & M_b \end{pmatrix} \frac{\mu_0 B_0 \langle c\|S\|b\rangle}{\Delta_{bc}} |c\rangle \qquad (7)$$

С учетом этого смешивания получаем еще одну амплитуду первого порядка по B_0:

$$\tilde{A}^{(1)}_{qq'} = \frac{\mu_0 B_0 \langle c\|S\|b\rangle \langle n\|r\|c\rangle \langle n\|r\|a\rangle}{\Delta_n \Delta_{bc}} \sum_{M_n} (-1)^{2J_n - M_c - M_n + J_c - M_c} \begin{pmatrix} J_c & 1 & J_b \\ -M_c & 0 & M_b \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} b & 1 & n \\ -M_b & q & M_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n & 1 & a \\ -M_n & q' & M_a \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b & 1 & n \\ -M_b & q' & M_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n & 1 & a \\ -M_n & q & M_a \end{pmatrix} \right]$$

$$= \frac{\mu_0 B_0 \langle c\|S\|b\rangle \langle n\|r\|c\rangle \langle n\|r\|a\rangle}{\Delta_n \Delta_{bc}} \sum_{M_n} (-1)^{J_c - M_n} \begin{pmatrix} J_c & 1 & J_b \\ -M_c & 0 & M_b \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} b & 1 & n \\ -M_b & q & M_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n & 1 & a \\ -M_n & q' & M_a \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b & 1 & n \\ -M_b & q' & M_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n & 1 & a \\ -M_n & q & M_a \end{pmatrix} \right] \qquad (8)$$

Для Ba $J_b = 1$ соотв уровню $^3D_1(5d6d)$. Рядом есть уровень $^3D_2(5d6d)$ ($\Delta_{bc} = -270$ см$^{-1}$). Предполагая чистую LS связь получаем:

$$\langle c\|S\|b\rangle = \langle ^3D_2\|S\|^3D_1\rangle = (-1)^{2+1+2+1} \sqrt{15} \begin{Bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{Bmatrix} \langle 1\|S\|1\rangle$$

$$= \frac{-\sqrt{15}}{\sqrt{20}} \sqrt{6} = \frac{-3}{\sqrt{2}}$$

Сверхтонкое смешивание уровня $^3D_1(5d6d)$ в Ba

2.05.09-1

Нас интересует примесь состояния $^3D_2(6s7d)$

В работе [KMB01] получено, что ВФ состояния $^3D_1(5d6d)$ имеет вид:

$$|b\rangle = \sqrt{.73}\,|^3D_1(5d6d)\rangle + \sqrt{.064}\,|^3D_1(6s7d)\rangle \qquad (1)$$

При этом состояние $^3D_2(6s7d)$ – можно считать чистым:

$$|c\rangle = |^3D_2(6s7d)\rangle \qquad (2)$$

Исходя из этого получаем, что

$$\langle c|H_{hf}|b\rangle = \sqrt{.064}\,\langle ^3D_2(6s7d)|H_{hf}|^3D_1(6s7d)\rangle \qquad (3)$$

$$= \sqrt{.064}\,(-1)^{1+I+F}\begin{Bmatrix} F & I & 2 \\ 1 & 1 & I \end{Bmatrix}\langle ^3D_2(6s7d)\|V\|^3D_1(6s7d)\rangle\langle I\|I\|I\rangle \qquad (3a)$$

(где мы записали $H_{hf} = \vec{I}\cdot\vec{V}$)

Попробуем выразить $\langle ^3D_2\|V\|^3D_1\rangle$ через константу A уровня $^3D_2(6s7d)$.

$$\langle c|H_{hf}|c\rangle = (-1)^{2+I+F}\begin{Bmatrix} F & I & 2 \\ 1 & 2 & I \end{Bmatrix}\langle ^3D_2\|V\|^3D_2\rangle\langle I\|I\|I\rangle \qquad (4)$$

подставляем:

$$=(-1)^{2+I+F+F+I+2+1}\frac{\cancel{2}[I(I+1)+6-F(F+1)]}{\sqrt{\cancel{2}I\cancel{(2I+1)}\cancel{2}\cancel{(I+1)}}\sqrt{4\cdot5\cdot6}}\langle ^3D_2\|V\|^3D_2\rangle\sqrt{I\cancel{(I+1)}\cancel{(2I+1)}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{30}}\,\frac{1}{2}\left[F(F+1)-I(I+1)-J(J+1)\right]_{J=2}\langle ^3D_2\|V\|^3D_2\rangle \qquad (4a)$$

Из (4а) => что

$$\boxed{A\left(^3D_2(6s7d)\right) = \frac{1}{\sqrt{30}} \langle ^3D_2 \| V \| ^3D_2 \rangle} \qquad (5)$$

Осталось связать $\langle ^3D_2 \| V \| ^3D_2 \rangle$ с $\langle ^3D_2 \| V \| ^3D_1 \rangle$

Сделаем это в предположении, что оба МЭ определяются вкладом от 6s электрона.

Рассмотрим следующие МЭ:

$$\langle ^3D_{21} | V_0 | ^3D_{21} \rangle = (-1)^{2-1} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \langle ^3D_2 \| V \| ^3D_2 \rangle \qquad (6а)$$

$$\langle ^3D_{21} | V_0 | ^3D_{11} \rangle = (-1)^{2-1} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \langle ^3D_2 \| V \| ^3D_1 \rangle \qquad (6в)$$

Из (5) и (6) =>

$$\boxed{\langle ^3D_2 \| V \| ^3D_1 \rangle = \frac{\langle ^3D_{21} | V_0 | ^3D_{11} \rangle}{\langle ^3D_{21} | V_0 | ^3D_{21} \rangle} \frac{\begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}} \sqrt{30}\, A(^3D_2)} \qquad (7)$$

Запишем явный вид ВФ $^3D_{J1}(6s7d)$:

$$^3D_{J1} = C^{J1}_{2m1\sigma} |s_0\rangle |d_m\rangle |1\sigma\rangle$$

$$|^3D_{21}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |s_\downarrow\rangle|d_{2\downarrow}\rangle + \frac{1}{2\sqrt{3}} |s_\uparrow\rangle|d_{1\downarrow}\rangle + \frac{1}{2\sqrt{3}} |s_\downarrow\rangle|d_{1\uparrow}\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |s_\uparrow\rangle|d_{0\uparrow}\rangle \quad (8)$$

$$|^3D_{11}\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}} |s_\downarrow\rangle|d_{2\downarrow}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{5}} |s_\uparrow\rangle|d_{1\downarrow}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{5}} |s_\downarrow\rangle|d_{1\uparrow}\rangle + \frac{1}{\sqrt{10}} |s_\uparrow\rangle|d_{0\uparrow}\rangle \quad (9)$$

2.05.09 – 3

$$\langle {}^3D_{21}|V_0|{}^3D_{21}\rangle = \left(\frac{1}{3}+\frac{1}{12}\right)\langle S_\downarrow|V_0|S_\downarrow\rangle + \left(\frac{1}{2}+\frac{1}{12}\right)\langle S_\uparrow|V_0|S_\uparrow\rangle$$

$$= \frac{1}{6}\langle S_\uparrow|V_0|S_\uparrow\rangle \tag{10}$$

$$\langle {}^3D_{21}|V_0|{}^3D_{11}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt5}-\frac{1}{4\sqrt5}\right)\langle S_\downarrow|V_0|S_\downarrow\rangle + \left(-\frac{1}{4\sqrt5}-\frac{1}{2\sqrt5}\right)\langle S_\uparrow|V_0|S_\uparrow\rangle$$

$$= \frac{-1-2-4+1}{4\sqrt5} = -\frac{3}{2\sqrt5}\langle S_\uparrow|V_0|S_\uparrow\rangle \tag{11}$$

Итак, получим отношение:

$$\frac{\langle {}^3D_{21}|V_0|{}^3D_{11}\rangle}{\langle {}^3D_{21}|V_0|{}^3D_{21}\rangle} = -\frac{3\cdot 6}{2\sqrt5} = -\frac{9}{\sqrt5} \tag{12}$$

Окончательно:

$$\langle {}^3D_2\|V\|{}^3D_1\rangle = -\frac{9}{\sqrt5}\frac{(-1)\sqrt{10}}{\cancel{\sqrt{30}}(-1)}\cancel{\sqrt{30}}\,A({}^3D_2)$$

$$= -9\sqrt2\,A({}^3D_2) \tag{13}$$

Из (3a) получим:

$$\langle c|H_{hf}|b\rangle = \sqrt{.064}\,(-1)^{I+F}\begin{Bmatrix} F & I & 2\\ 1 & 1 & I\end{Bmatrix} 9\sqrt2\,A({}^3D_2)\sqrt{I(I+1)(2I+1)} \tag{14}$$

$$\boxed{\langle c|H_{hf}|b\rangle = 3.2\,(-1)^{I+F}\begin{Bmatrix} F & I & 2\\ 1 & 1 & I\end{Bmatrix}\sqrt{I(I+1)(2I+1)}\,A({}^3D_2(6s7d))}$$

Найдем смешивание $^3D_1(5d6d)$ с $^1D_2(6s7d)$

~~Нам~~. Действуем аналогично предыдущему.

$$|^1D_{21}(6s7d)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|s_\uparrow\rangle|d_{1\downarrow}\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|s_\downarrow\rangle|d_{1\uparrow}\rangle \qquad (15)$$

Отметим, что диагональный МЭ = 0:

$$\langle^1D_{21}|V_0|^1D_{21}\rangle = \frac{1}{2}\left[\langle s_\uparrow|V_0|s_\uparrow\rangle + \langle s_\downarrow|V_0|s_\downarrow\rangle\right] = 0 \qquad (16)$$

Т.е. в этом приближении $A(^1D_2) = 0$

Теперь недиагональный МЭ (используем (9) и (15)):

$$\langle^1D_{21}|V_0|^3D_{11}\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{10}}\left[\langle s_\uparrow|V_0|s_\uparrow\rangle - \langle s_\downarrow|V_0|s_\downarrow\rangle\right] = -\sqrt{\frac{3}{10}}\langle s_\uparrow|V_0|s_\uparrow\rangle \qquad (17)$$

Вместо (12) получаем

$$\frac{\langle^1D_{21}|V_0|^3D_{11}\rangle}{\langle^3D_{21}|V_0|^3D_{21}\rangle} = -\frac{6\sqrt{3}}{\sqrt{10}} \qquad (18)$$

$$\langle^1D_2\|V\|^3D_1\rangle = -\frac{6\sqrt{3}}{\cancel{\sqrt{10}}}\frac{\cancel{\sqrt{10}}}{\cancel{\sqrt{30}}}\cancel{\sqrt{30}}\,A(^3D_2) = -6\sqrt{3}\,A(^3D_2) \qquad (19)$$

Окончательно для ~~смеш~~ амплитуды получаем:

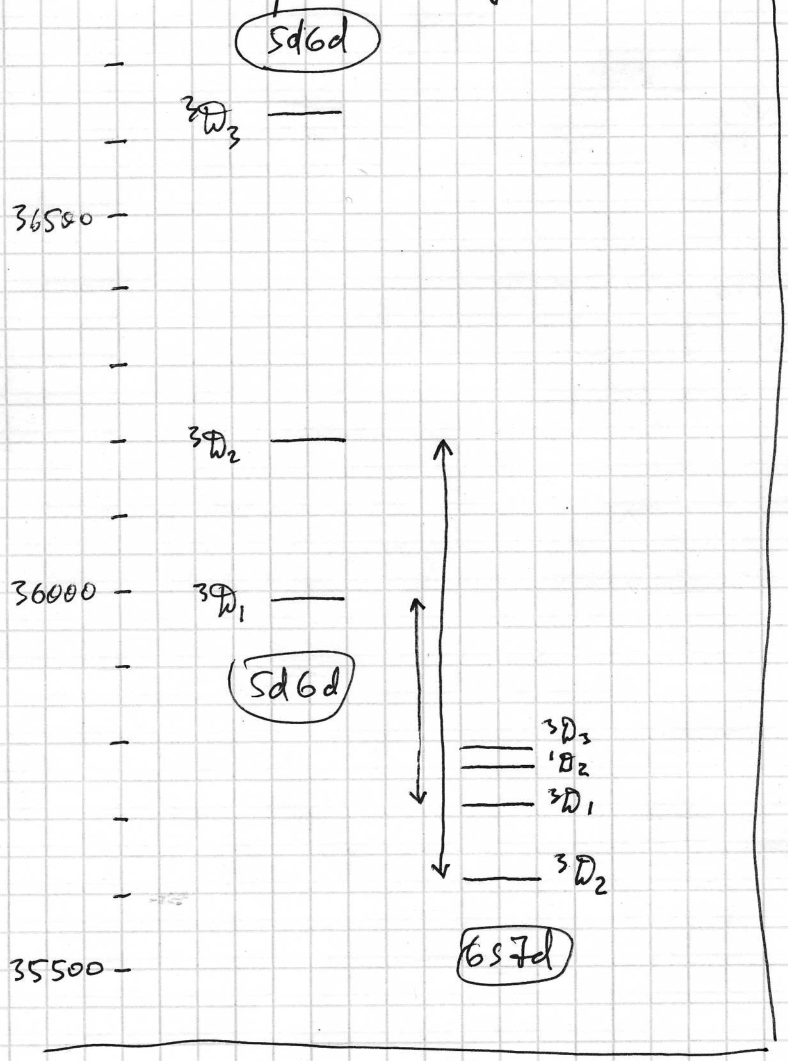
$$\boxed{\langle c'|H_{hf}|b\rangle = 2.1\,(-1)^{I+F}\begin{Bmatrix}F & I & 2\\ 1 & 1 & I\end{Bmatrix}\sqrt{I(I+1)(2I+1)}\;A(^3D_2(6s7d))} \qquad (20)$$

Смешивание уровней $^3D_J(5d6d)$ и $^3D(6s7d)$ в Ba 9.05.09 – 1

В [2.05.09, ур-ние (1)] мы использовали результат [KMB01] по смешиванию $^3D_1(5d6d)$ и $^3D_1(6s7d)$.

Нельзя ли получить это смешивание аналитически?

Схема уровней по данным NIST



Если предположить, что уровень $^3D_2(6s7d)$ "съехал" со своего места между $^3D_3$ и $^3D_1$ за счёт взаимодействия с $^3D_3(5d6d)$, то тогда и уровни $^3D_1(5d6d)$ и $^3D_1(6s7d)$ должны расталкиваться. Причем, расталкивание $^3D_1(5d6d)$ и $^3D_1(6s7d)$ должно быть даже сильнее, т.к. они ближе друг к другу, а МЭ не должен зависеть от J:

$$\langle {}^3D_{J'}(5d6d)|V|{}^3D_J(6s7d)\rangle = \langle L=2(5d6d)|V|L=2(6s7d)\rangle\,\langle S=1|S=1\rangle\,\delta_{J'J}$$

поскольку кулоновский МЭ не затрагивает спиновые степени свободы.

Поэтому, сдвиг уровня $^3D_2(6s7d)$ не связан с взаимодействием с уровнем $^3D_2(5d6d)$.

Вообще, я не вижу, что может так сильно сдвинуть уровень $^3D_2(6s7d)$. Т.ч. приходится опираться на работу [KMB01].