Ф И З И К А

УДК 539.1+530.145

ПРОСТРАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ЦЕНТРОВ КАК СЛЕДСТВИЕ КОГЕРЕНТНОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ

***Аванесов А. Г.*[1], *Тумаев Е. Н.*[2]**

SPATIAL-PERIODIC DISTRIBUTION OF OPTICAL CENTERS AS A CONSEQUENCE OF COHERENT TRANSPORT OF THE ELECTRONIC EXCITATION ENERGY

Avanesov A. G., Tumaev E. N.

Processes of coherent interactions of optical centers are investigated. The research has made it possible to specify the oscillating dependence of the energy transport probability on the distance, leading to stable spatially periodic distribution of electronic excitations. Such structures are similar to photon crystals and have an analogue of the forbidden zone — a photon gap, i. e. a band of the frequencies forbidden for electromagnetic waves propagation.

1. Одним из наиболее необычных эффектов, открытых в физике конденсированных сред в последнее время и вызвавший закономерно повышенный интерес исследователей, является эффект замедления света в парах щелочных металлов [1]. В работах [2–4] этот эффект объясняется явлением когерентного пленения населенностей (КПН) в ансамбле невзаимодействующих оптических центров, которое было предсказано Агапьевым Б. Д., Кочаровской О. А и другими за 10 лет до открытия замедления света [5, 6]. В обзоре [7] результаты эксперимента [1] и его интерпретация были подвергнуты критике. В настоящей статье будет указано, что альтернативным по отношению к КПН механизмом, приводящим к замедлению света, может являться возникновение оптически наведенных пространственно-периодических структур. Среды с такими структурами по своим оптическим свойствам аналогичны фотонным кристаллам и обладают аналогом запрещенной зоны — фотонной щелью, т. е. полосой частот, запрещенных для распространения электромагнитных волн. Как и всякая периодическая структура, такая среда обладает зоной Бриллюэна. Закон дисперсии фотонов в среде $\omega(k)$ (зависимость частоты фотона от волнового вектора) будет таким, что, в силу инвариантности относительно пространственных отражений, производная $\nabla_k\omega$, имеющая смысл групповой скорости, обращается в нуль на границе зоны Бриллюэна.

Возникновение индуцированных структур под действием когерентного пучка света изучено как экспериментально, так и теоретически [8]. Так, в работах [9, 10] было изучено возникновение пространственно-периодического распределения атомов щелочных металлов, сопровождающее явление их бозе-конденсации при низких температурах. Гораздо менее изучено спонтанное появление периодических структур при взаимодействии оптических центров. Одной из работ в этом направлении является [11], где отмечается, что в модельной системе — бозе-газе со слабым взаимодействием между частицами возникает пространственно-периодическое распределение плотности газа. В настоящей работе будет показано, что такие же пространственные структуры возникают при взаимодействии оп-

[1]Аванесов Андраник Григорьевич, д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедры экспериментальной физики Кубанского государственного университета.

[2]Тумаев Евгений Николаевич, д-р физ.-мат. наук, доцент кафедры экспериментальной физики Кубанского государственного университета.

тических центров, обусловленных обменом когерентным фотоном.

2. Рассмотрим взаимодействие двух оптических центров (ОЦ), которое осуществляется за счет обмена квантами поперечного электромагнитного поля. Гамильтониан системы выберем в виде

$$H = H_0 + W,$$

где H_0 — гамильтониан невзаимодействующих ОЦ, W — гамильтониан взаимодействия

$$H_0 = \sum_{k=1}^{2} \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m} + eU(r_k), \qquad (1)$$

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{e}{2m} \sum_{k=1}^{2} (\mathbf{p}_k \mathbf{A}(\mathbf{r}_k) + \mathbf{A}(\mathbf{r}_k)\mathbf{p}_k) + \\ + \sum_{k=1}^{2} e\varphi(\mathbf{r}_k).$$

В формуле (1) k обозначает номер ОЦ, $\mathbf{r}_k$, $\mathbf{p}_k$ — радиус-вектор и импульс оптического электрона, принадлежащего k-му ОЦ, e, m — заряд и масса электрона, $eU(\mathbf{r}_k)$ — потенциальная энергия взаимодействия электрона с атомным остовом k-го ОЦ, $\varphi(\mathbf{r}_k)$, $\mathbf{A}(\mathbf{r}_k)$ — скалярный и векторный потенциал электромагнитного поля k-го электрона.

Потенциалы электромагнитного поля могут быть разделены на продольную и поперечную части. Для продольной части калибровочное условие для потенциалов выбирается согласно [12] и в первом порядке по малому параметру a/λ, сводится к условию $A = 0$ (a — размер атомной системы, λ — длина волны, соответствующая частоте перехода между возбужденным и основным состояниями центра). Тогда продольная составляющая гамильтониана взаимодействия описывается слагаемыми $W_{\text{long}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum\limits_{k=1}^{2} e\varphi(\mathbf{r}_k)$, которые для взаимодействующих примесных центров могут быть сведены к гамильтониану взаимодействия $-d_1 E_2$, описывающему перенос энергии электронного возбуждения в теории Ферстера, который в настоящей статье не исследуется.

Потенциал поперечной составляющей, напротив, фиксируется радиационной калибровкой, т. е. условиями $\varphi(\mathbf{r}_k) = 0$, $\operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}_k) = 0$. Взаимодействие ОЦ, обусловленное обменом поперечными фотонами, описывается в радиационной калибровке следующим гамильтонианом взаимодействия (выбираем физическую систему единиц, в которой постоянная Планка $\hbar$ и скорость света приняты равными единице)

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{e}{m} (\mathbf{p}_1 \mathbf{A}(\mathbf{r}_1) + \mathbf{p}_2 \mathbf{A}(\mathbf{r}_2)). \qquad (2)$$

Волновые функции основного и возбужденного одноэлектронных состояний оптических центров 1 и 2 выберем в виде разложения Ψ-операторов по операторам рождения и уничтожения a_i^+, a_i в состояниях $|i\rangle$, волновые функции которых обозначим через $\phi_i(\mathbf{r}_k)$

$$\Psi(\mathbf{r}_k) = \sum_i a_i \phi_i(\mathbf{r}_k), \quad \Psi^+(r_i) = \sum_i a_i^+ \phi_i^*(\mathbf{r}_k),$$

$$i = 1, 2.$$

Здесь индекс i нумерует состояния электронов. Оптические центры предполагаем двухуровневыми: $i = 1, 2$, что соответствует исключению из рассмотрения тех уровней энергии, которые не участвуют в процессе переноса электронного возбуждения. Операторы a_i^+, a_i подчиняются каноническим антикоммутационным соотношениям

$$\{a_i, a_j\} = \left\{a_i^+, a_j^+\right\} = 0, \quad \left\{a_i, a_j^+\right\} = \delta_{ij},$$

где $\left\{a_i, a_j^+\right\} = a_i a_j^+ + a_j^+ a_i$ — антикоммутатор операторов рождения и уничтожения, а также соотношению

$$\sum_i a_i^+ a_i = 1,$$

следующему из условия нормировки $\int\limits_V \Psi^+(\mathbf{r}_k)\, \Psi(\mathbf{r}_k)\, dv_k = 1$, $k = 1, 2$.

Знаком «+» здесь и далее обозначена операция эрмитового сопряжения, интегрирование идет по координатам вектора $\mathbf{r}_k$ по всему объему системы V.

Оператор $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, соответствующий волновой функции двухэлектронного состояния выберем в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i,j=1}^{2} a_i a_j \phi_i(\mathbf{r}_1) \phi_j(\mathbf{r}_2),$$

$$\Psi^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i,j=1}^{2} a_i^+ a_j^+ \phi_i^*(\mathbf{r}_1) \phi_j^*(\mathbf{r}_2). \qquad (3)$$

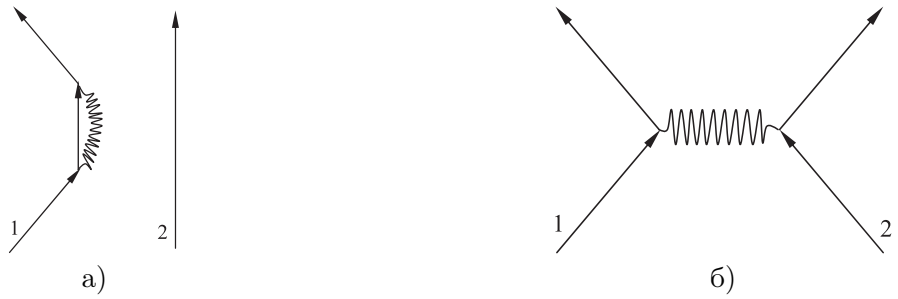

Рис. 1. Фейнмановские диаграммы второго порядка, соответствующие взаимодействию двух атомных электронов. Сплошные линии отвечают электронам первого и второго оптических центров, волнистая линия — фотону

В этом случае гамильтониан системы двух невзаимодействующих примесных центров

$$H_0 = \int\limits_V \int\limits_V \Psi^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \sum_{k=1}^{2} \left(\frac{\mathbf{p}_k^2}{2m} + U(\mathbf{r}_k) \right) \times \\ \times \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) dv_1 dv_2$$

запишется в виде

$$H_0 = 2 \sum_{i=1}^{2} E_i a_i^+ a_i,$$

где E_i — энергия электрона в состоянии $|i\rangle$.

Потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ электромагнитного поля разложим на положительно- и отрицательно-частотные составляющие

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}^{(-)}(\mathbf{r}) + \mathbf{A}^{(+)}(\mathbf{r}), \tag{4}$$

где

$$\mathbf{A}^{(-)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{16\pi^3}} \sum_{k,\lambda=1,2} b_\lambda(\mathbf{k}) e_\lambda(\mathbf{k}) e^{-i(\omega t - \mathbf{kr})},$$

$$\mathbf{A}^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{16\pi^3}} \sum_{k,\lambda=1,2} b_\lambda^+(\mathbf{k}) e_\lambda^*(\mathbf{k}) e^{i(\omega t - \mathbf{kr})},$$

$b_\lambda^+(\mathbf{k})$, $b_\lambda(\mathbf{k})$ — операторы рождения и уничтожения фотонов с волновым вектором $\mathbf{k}$, частотой ω и поляризацией λ, направление которой задается комплексным вектором поляризации $\mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k})$. Операторы $b_\lambda^+(\mathbf{k})$, $b_\lambda(\mathbf{k})$ подчиняются каноническим коммутационным соотношениям

$$[b_\lambda(\mathbf{k}_1), b_\sigma(\mathbf{k}_2)] = 0, \quad \left[b_\lambda^+(\mathbf{k}_1), b_\sigma^+(\mathbf{k}_2)\right] = 0,$$

$$\left[b_\lambda^+(\mathbf{k}_1), b_\sigma(\mathbf{k}_2)\right] = \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2).$$

Здесь $\delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ — дельта-функция Дирака.

Подставляя (3) и (4) в (2), получаем выражение для гамильтониана взаимодействия W в виде $W = W_1 + W_1^+ + W_2 + W_2^+$, где

$$W_k = -\frac{e}{m} \frac{1}{\sqrt{16\pi^3}} \sum_{i,j} \sum_{\mathbf{k}_k,\lambda} a_i^+ a_j b_\lambda(\mathbf{k}_k) e^{-i\omega t} \times \\ \times \int\limits_{V_k} \phi_i^*(\mathbf{r}_k)(p_1 \mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k}_k)) \phi_j(\mathbf{r}_k) e^{i\mathbf{k}_k \mathbf{r}_k} dv_k,$$

В нерелятивистском приближении импульс $\mathbf{p}_k$ равен $m d\mathbf{r}_k/dt = -im\,[H_0, \mathbf{r}_k]$, где $[H_0, \mathbf{r}_k] = H_0 \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_k H_0$ — коммутатор операторов H_0 и $\mathbf{r}_k$. Так как $H_0 \phi_i(\mathbf{r}_k) = E_i \phi_i(\mathbf{r}_k)$, где E_i — энергия электрона в состоянии ϕ_i, то имеем

$$W_k = \frac{ie}{\sqrt{16\pi^3}} \sum_{i,j} \sum_{k_k,\lambda} \omega_{ij} a_i^+ a_j b_\lambda(\mathbf{k}_k) e^{-i\omega t} \times \\ \times \int\limits_V \phi_i^*(\mathbf{r}_k) \left(\mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k}_k) \cdot \mathbf{r}_k\right) \phi_j(\mathbf{r}_k) e^{i\mathbf{k}_k \mathbf{r}_k} dv_k,$$

где $\omega_{ij} = E_i - E_j$ — частота перехода.

Обозначим

$$g_{ij\lambda}(\mathbf{k}_k, \mathbf{r}_k) = \\ = \frac{i\omega_{ij}}{\sqrt{16\pi^3}} \phi_i^*(\mathbf{r}_k) \left(\mathbf{d}_k \cdot \mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k}_k)\right) \phi_j(\mathbf{r}_k) e^{i\mathbf{k}_k \mathbf{r}_k},$$

где $\mathbf{d}_k = e\mathbf{r}_k$ — дипольный момент k-го электрона для перехода между состояниями, описываемыми волновыми функциями $\phi_i(\mathbf{r}_k)$ и $\phi_j(\mathbf{r}_k)$.

В результате получим

$$W_k = \int\limits_V \sum_{i,j} \sum_{k_k,\lambda} g_{ij\lambda}(\mathbf{k}_k, \mathbf{r}_k) \times \\ \times a_i^+ a_j b_\lambda(\mathbf{k}_k) e^{-i\omega t} dv_k. \tag{5}$$

3. Рассмотрим процесс взаимодействия двух ОЦ за счет обмена поперечным фотоном. Начальное и конечное состояния системы выберем в виде, соответствующем одному возбужденному и одному невозбужденному центрам.

Перенос энергии электронного возбуждения, соответствующий фейнмановской диаграмме рис. 1б, описывается матричным элементом $S_{fi}^{(2)}$ матрицы рассеяния S во втором приближении теории возмущений

$$S_{fi}^{(2)} = -\left\langle f \left| \int\limits_{-\infty}^{\infty} W(t_1) \int\limits_{-\infty}^{t_1} W(t_2) dt_2 dt_1 \right| i \right\rangle =$$

$$= -\left\langle f \left| \int\limits_{0}^{\infty} \int\limits_{0}^{t_1} \int\limits_{V} \int\limits_{V} \xi(v_1, v_2, t_1, t_2) dv_1 dv_2 dt_2 dt_1 \right| i \right\rangle,$$

где

$$\xi(v_1, v_2, t_1, t_2) = \sum_{i,j,m,n} \sum_{\mathbf{k}_1,\lambda,\mathbf{k}_2,\sigma} \sum_{r',r''} \Big(v_{ij\lambda}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}', t_1) + v_{ij\lambda}^{+}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}', t_1) \Big) \times \Big(v_{mn\sigma}\left(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}'', t_2\right) + v_{mn\sigma}^{+}\left(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}'', t_2\right) \Big),$$

$$v_{ij\lambda}\left(\mathbf{k}_k, \mathbf{r}_k, t\right) = g_{ij\lambda}\left(\mathbf{r}_k\right) a_i^{+} a_j b_\lambda\left(\mathbf{k}_k\right) e^{-i\omega t},$$

радиус-векторы $\mathbf{r}'$, $\mathbf{r}''$, по которым идет суммирование, принимают независимо значения $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, и, согласно адиабатической гипотезе [12], $W(t) = We^{-i\omega_{ij}t-\varepsilon|t|}$, где $\varepsilon > 0$ — бесконечно малый параметр, назначение которого заключается в придании смысла расходящимся интегралам по временам t_1 и t_2. Физический смысл адиабатической гипотезы заключается в том, что взаимодействие $W(t)$ бесконечно медленно «включается» на интервале $-\infty < t \leqslant 0$, и затем бесконечно медленно исчезает на интервале $0 \leqslant t < \infty$. В окончательных выражениях для матричных элементов матрицы рассеяния выполняется предельный переход $\varepsilon \to 0$.

Усреднение по состояниям электромагнитного поля с помощью соотношений

$$\langle 0| b_\lambda(\mathbf{k}_1) b_\sigma^{+}(\mathbf{k}_2) |0\rangle = \delta_{\lambda\sigma} \delta\left(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2\right),$$

$$\langle 0| b_\lambda\left(\mathbf{k}_1\right) b_\sigma\left(\mathbf{k}_2\right) |0\rangle = \langle 0| b_\lambda^{+}\left(\mathbf{k}_1\right) b_\sigma^{+}\left(\mathbf{k}_2\right) |0\rangle = 0,$$

($\delta_{\lambda\sigma}$ — символ Кронекера) приводит к следующему выражению для матричного элемента $S_{fi}^{(2)}$:

$$S_{fi}^{(2)} = -\int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{t_1} \int\limits_{V} \int\limits_{V} \left\langle f \left| \sum_{\substack{i,j,m,\\ n,k,\lambda}} \sum_{\substack{\mathbf{r}'=\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\\ \mathbf{r}''=\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2}} g_{ij\lambda}^{mn\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{r}', \mathbf{k}, \mathbf{r}'') \times a_i^{+} a_j a_m^{+} a_n e^{i\omega_{ij}t_2} e^{i\omega_{mn}t_1} e^{i\omega(t_2-t_1)} \right| i \right\rangle dv_1 dv_2 dt_2 dt_1. \tag{6}$$

Здесь

$$g_{ij\lambda}^{mn\sigma}\left(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}', \mathbf{k}_2, \mathbf{r}''\right) = g_{ij\lambda}\left(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}'\right) g_{mn\lambda}^{*}\left(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}''\right)$$

и частота ω содержит бесконечно малую мнимую часть $\pm i\varepsilon$. Усредняя по электронным состояниям с помощью тождества $[A, BC] = \{A, B\} C - B \{A, C\}$, приходим к соотношению

$$\langle f| a_i^{+} a_j a_m^{+} a_n |i\rangle = \delta_{jm}\delta_{i2}\delta_{n2} + \delta_{jm}\delta_{i1}\delta_{n1} - \delta_{i2}\delta_{n2}\delta_{1m}\delta_{j1} + \delta_{i1}\delta_{n2}\delta_{1m}\delta_{j2} + \delta_{i2}\delta_{n1}\delta_{1m}\delta_{j2} - \delta_{i1}\delta_{n1}\delta_{2m}\delta_{j2}. \tag{7}$$

Слагаемые в (6) при $\mathbf{r}' = \mathbf{r}''$ соответствуют диаграмме, представленной на рис. 1а, и описывают поправки к уровням энергии оптических центров, вследствие чего они опущены при дальнейших вычислениях. Модифицированные константы связи $g_{ij\lambda}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ пропорциональны разности $E_i - E_j$, следовательно, вклады первого и третьего, а также второго и шестого слагаемых в (7) взаимно компенсируются. Пятое слагаемое дает нулевой вклад, т. к. для него $m = n = 1$, $i = j = 2$. Следовательно, когерентный перенос энергии электронного возбуждения описывается четвертым слагаемым матричного элемента $S_{fi}^{(2)}$ матрицы рассеяния

$$S_{fi}^{(2)} = -\int\limits_{0}^{\infty} \int\limits_{0}^{t_1} \int\limits_{V} \int\limits_{V} \sum_{\substack{i,j,m,\\ n,\mathbf{k},\lambda}} g_{ij\lambda}\left(\mathbf{k}, \mathbf{r}_1\right) g_{mn\lambda}^{*}\left(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2\right) \times \delta_{i1}\delta_{n2}\delta_{j2}\delta_{m1} e^{i\omega_{ij}t_2} e^{i\omega_{mn}t_1} e^{-i\omega(t_1-t_2)} dv_1 dv_2 dt_2 dt_1 =$$

$$= -\int\limits_{0}^{\infty} \int\limits_{0}^{t_1} \int\limits_{V} \int\limits_{V} \sum_{k,\lambda} g_{12\lambda}\left(\mathbf{k}, \mathbf{r}_1\right) g_{12\lambda}^{*}\left(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2\right) \times e^{i\omega_{ij}t_2} e^{i\omega_{mn}t_1} e^{-i\omega(t_1-t_2)} dv_1 dv_2 dt_2 dt_1.$$

Суммирование по поляризациям выполняется с помощью равенства

$$\sum_{\lambda} e_{\lambda\alpha}(\mathbf{k})\, e^{*}_{\lambda\beta}(\mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta,$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ — единичный вектор, направленный вдоль k, α, β — векторные индексы в декартовой системе координат. Тогда

$$S^{(2)} = \frac{i\omega_{12}^2}{16\pi^3\Delta\omega} \sum_{\mathbf{k}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_V \int\limits_V e^{-i\Delta\omega t} \times$$
$$\times\, \phi_2^*(\mathbf{r}_2)\phi_1(\mathbf{r}_1)\left[(\mathbf{d}_1\mathbf{d}_2) - (\mathbf{d}_1 n)(\mathbf{d}_2 n)\right] dv_1 dv_2 \times$$
$$\times\, \phi_2^*(\mathbf{r}_1)\phi_1(\mathbf{r}_2) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} dt, \quad (8)$$

где $\Delta\omega = \omega - \omega_{12} \pm i\varepsilon$. Конкретизируем начальные и конечные состояния. Будем считать, что состояния оптических электронов — ридберговские, т. е. описываются водородоподобными волновыми функциями, причем основное и возбужденное состояния принадлежат одному терму (одному главному квантовому числу n). Тогда

$$\phi_1(\mathbf{r}_k) = R_{nl_1}(r_k) Y_{l_1 m_1}(\theta_k, \varphi_k),$$

$$\phi_2(\mathbf{r}_k) = R_{nl_2}(r_k) Y_{l_2 m_2}(\theta_k, \varphi_k).$$

Здесь $R_{nl}(r)$ — радиальная часть волновой функции, явный вид которой приведен ниже, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферическая функция [12], $n, l, m = l_z$ — главное, орбитальное и магнитное квантовые числа ридберговских состояний, r_k, θ_k, φ_k — координаты вектора r_k в сферической системе координат.

Плоскую волну $e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}$ разложим по сферическим волнам [12]

$$e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} = 4\pi \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{j_z=-j}^{j} i^j g^j(k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \times$$
$$\times\, Y^*_{jj_z}(\mathbf{n}) Y_{jj_z}(\mathbf{n}_{12}),$$

где $g_j(kr) = \sqrt{\pi/2kr}\, J_{j+1/2}(kr)$ — сферическая функция Бесселя, $\mathbf{n}_{12} = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$.

Обозначив зависящий от частоты множитель $\frac{i\omega_{12}^2}{16\pi^3\Delta\omega} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-i\Delta\omega t} dt$ в (8), описывающий нормированный спектр излучения, выраженный в числе квантов на единичный интервал частот, через $G(\omega)$, перепишем выражение для элементов S-матрицы в виде

$$S^{(2)}_{fi} = -G(\omega) \cdot \sum_k \int\limits_V \int\limits_V R_{nl_2}(r_2) Y^*_{l_2 m_2}(\theta_2, \varphi_2) \times$$
$$\times\, R_{nl_1}(r_1) Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \varphi_1)\left[(d_1 d_2) - (d_1 n)(d_2 n)\right] \times$$
$$\times\, R_{nl_2}(r_2) Y^*_{l_2 m_2}(\theta_2, \varphi_2)\, R_{nl_1}(r_1) Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \varphi_1) \times$$
$$\times\, 4\pi \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{j_z=-j}^{j} i^j g^j(k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \times$$
$$\times\, Y^*_{jj_z}(\mathbf{n}) Y_{jj_z}(\mathbf{n}_{12}) dv_1 dv_2, \quad (9)$$

Для дальнейшего преобразования (9) заметим, что разность $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ в аргументе сферической функции Бесселя $g_j(k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ вследствие $r_1, r_2' \ll R$ можно заменить на R, где вектор $\mathbf{R}$ показан на рис. 2. Аналогичная замена для функции $Y_{jj_z}(n_{12})$ приводит к появлению множителя, определяющего зависимость элемента $S^{(2)}_{fi}$ от взаимной ориентации диполей $\mathbf{d}_1$ и $\mathbf{d}_2$.

Для вычисления $N = (\mathbf{d}_1\mathbf{d}_2) - (\mathbf{d}_1\mathbf{n})(\mathbf{d}_2\mathbf{n})$ выберем ось Oz сферической системы координат вдоль радиус-вектора $\mathbf{R}$. Векторы $\mathbf{d}_1$, $\mathbf{d}_2$ в этой системе координат имеют следующие компоненты:

$$\mathbf{d}_1 = (\sin\theta_1 \cos\varphi_1,\ \sin\theta_1 \sin\varphi_1,\ \cos\theta_1),$$

$$\mathbf{d}_2 = (\sin\theta_2 \cos\varphi_2,\ \sin\theta_2 \sin\varphi_2,\ \cos\theta_2).$$

В таком случае

$$N = \frac{d_1 d_2}{2} \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) =$$
$$= \frac{4\pi}{3} d_1 d_2 \Big[Y_{11}(\theta_1, \varphi_1)\, Y_{11}(\theta_2, \varphi_2) +$$
$$+\, Y_{1,-1}(\theta_1, \varphi_1)\, Y_{1,-1}(\theta_2, \varphi_2) \Big].$$

Перепишем выражение для элемента $S^{(2)}_{fi}$ в виде

$$S^{(2)}_{fi} = -\frac{4\pi^2 e^2}{3} G(\omega) \sum_{\mathbf{k}} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{jz=-j}^{jz=j} \sum_{m=\pm 1} i^j g_j(kR) \times$$
$$\times\, Y_{jjz}(\mathbf{n}) \int\limits_V r_1 R_{nk_1}(r_1)\, R_{nk_2}(r_1)\, Y_{k_1\kappa_1}(\theta_1, \phi_1) \times$$
$$\times\, Y_{1m}(\theta_1, \phi_1)\, Y_{k_2\kappa_2}(\theta_1, \phi_1)\, dv_1 \times$$
$$\times \int r_2 R_{nl_1}(r_2) R_{nl_2}(r_2) \times$$
$$\times\, Y_{l_1\lambda_1}(\theta_2, \phi_2) Y_{1m}(\theta_2, \phi_2) Y_{l_2\lambda_2}(\theta_2, \phi_2) dv_2.$$

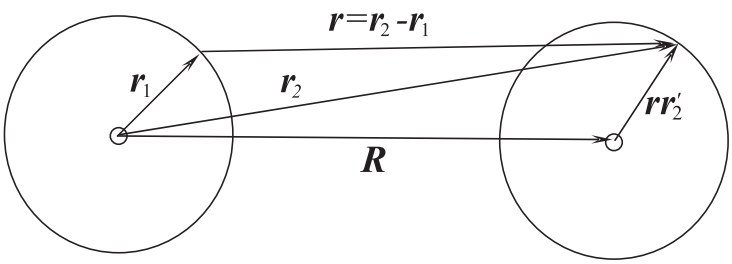

Рис. 2. Выбор координат, описывающих положения оптических электронов при когерентном взаимодействии оптических центров

Здесь учтено, что $d = er$. Используя формулу

$$\int Y^*_{l_1m_1}(\theta,\varphi)Y_{l_2m_2}(\theta,\varphi)Y_{l_3m_3}(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi = \\ = (-1)^{m_1}\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)/4\pi}\times \\ \times W^{l_1l_2l_3}_{000}W^{l_1l_2l_3}_{-m_1m_2m_3},$$

где через $W^{l_1l_2l_3}_{m_1m_2m_3}$ обозначен $3j$-символ Вигнера [13], и вводя следующее обозначение для радиальных интегралов

$$K^n_{l_1l_2} = \int\limits_0^\infty r^3 R_{nl_1}(r)\,R_{nl_2}(r)dr,$$

получаем

$$S^{(2)}_{fi} = -\frac{4\pi^2e^2}{3}G(\omega)\times \\ \times\sum_{\mathbf{k}}\sum_{j=0}^{\infty}\sum_{jz=-j}^{jz=j}\sum_{m=\pm1} i^j(-1)^{\kappa_1+\lambda_1}\times \\ \times g_j(kR)\,Y_{jjz}(\mathbf{n})\,K^n_{k_1k_2}K^n_{l_1l_2}\times \\ \times[3(2k_1+1)(2k_2+1)/4\pi]^{1/2}\times \\ \times[3(2l_1+1)(2l_2+1)/4\pi]^{1/2}\times \\ \times W^{k_11k_2}_{000}W^{k_11k_2}_{-\kappa_1m\kappa_2}W^{l_11l_2}_{000}W^{l_11l_2}_{-\lambda_1m\lambda_2}. \quad (10)$$

Для дальнейших вычислений ограничимся в (10) первым слагаемым, отвечающим значению $j = 0$. Тогда $j_z = 0$, $g_0(kR) = \sin(kR)/kR$, откуда следует выражение для вероятности перехода $w^{k_1k_2,l_1l_2}_{fi}$ в одну секунду, получающееся из $\left|S^{(2)}_{fi}\right|^2$ с учетом соотношения $|G(\omega)|^2 = 2\pi TG(\omega)$, где T — время наблюдения над системой

$$w^{k_1k_2,l_1l_2}_{fi} = 2\pi^3e^4G(\omega)\frac{\sin^2 kR}{(kR)^2}\left(K^n_{k_1k_2}K^n_{l_1l_2}\right)^2\times \\ \times(2k_1+1)(2k_2+1)(2l_1+1)(2l_2+1)\times \\ \times\sum_{\mathbf{k}}|Y_{00}(\mathbf{n})|^2\times \\ \times\left|\sum_{m=\pm1}W^{k_11k_2}_{000}W^{k_11k_2}_{-\kappa_1m\kappa_2}W^{l_11l_2}_{000}W^{l_11l_2}_{-\lambda_1m\lambda_2}\right|^2. \quad (11)$$

Учитывая, что $\sum\limits_{\mathbf{k}}|Y_{00}(\mathbf{n})|^2 = 1$, усредняя вероятность (11) по квантовым числам начального состояния κ_1, λ_1, и суммируя по квантовым числам конечного состояния κ_2, λ_2 с помощью соотношения $\sum\limits_{\kappa_1,\kappa_2}W^{k_11k_2}_{-\kappa_1m\kappa_2}W^{k_11k_2}_{-\kappa_1n\kappa_2} = \delta_{mn}$, получаем

$$w^{k_1k_2,l_1l_2}_{fi} = 2\pi^3e^4G(\omega)\frac{\sin^2 kR}{(kR)^2}\left(K^n_{k_1k_2}K^n_{l_1l_2}\right)^2\times \\ \times(2k_1+1)(2k_2+1)(2l_1+1)(2l_2+1)\times \\ \times\left(W^{k_11k_2}_{000}\right)^2\left(W^{l_11l_2}_{000}\right)^2. \quad (12)$$

Оценим далее величины $K^n_{l_1l_2}$. Радиальная часть $R_{nl}(r)$ волновой функции водородоподобного состояния выражается через присоединенные полиномы Лагерра $L^k_n(r)$

$$R_{nl}(r) = \alpha^{3/2}\left[\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\right]\times \\ \times\exp(-\alpha r/2)(\alpha r)^l L^{2l+1}_{n-l-1}(\alpha r),$$

где $\alpha = \dfrac{2Z}{na_0}$, Z — заряд атомного остова, и $a_0 = \dfrac{\hbar^2}{me^2} = 0,529$ Å — Боровский радиус. Для

рассматриваемых здесь электродипольных переходов $k_2 = k_1 \pm 1$, $l_2 = l_1 \pm 1$, значения интегралов $K^n_{l,l\pm1}$ согласно [13] равны

$$K^n_{l,l+1} = \frac{3}{2} a_0 n \sqrt{n^2 - (l+1)^2},$$

$$K^n_{l,l-1} = \frac{3}{2} a_0 n \sqrt{n^2 - l^2}.$$

Учитывая также значения $3j$-символов при $k_2 = k_1 \pm 1$, $l_2 = l_1 \pm 1$ [13]

$$W^{l1,l+1}_{000} = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{(l+1)}{(2l+3)(2l+1)}},$$

$$W^{l1,l-1}_{000} = (-1)^{l} \sqrt{\frac{l}{(2l+1)(2l-1)}},$$

получаем из (12) следующее выражение для вероятности перехода $w^{l,l+1}_{fi}$ при $k_1 = l_1 = l$, $k_2 = l_2 = l+1$:

$$w^{l,l+1}_{fi} = \frac{9\pi^3}{2} e^4 a_0^4 G(\omega) \times \\ \times \frac{\sin^2 kR}{(kR)^2} n^4 \left[n^2 - (l+1)^2\right]^2 (l+1)^2. \quad (13)$$

Аналогично вероятность перехода $w^{l,l-1}_{fi}$ при $k_1 = l_1 = l$ и $k_2 = l_2 = l-1$ равна

$$w^{l,l-1}_{fi} = \frac{9\pi^3}{2} e^4 a_0^4 G(\omega) \times \\ \times \frac{\sin^2 kR}{(kR)^2} n^4 \left[n^2 - l^2\right]^2 l^2. \quad (14)$$

Наибольший интерес представляют в качестве ОЦ ионы переходных и редкоземельных металлов, у которых не заполнены 3d- и 4f-электронные оболочки. Полная вероятность $P^{l_1 l_2}_{fi}$ переноса энергии электронного возбуждения, получаемая суммированием вероятности перехода $w^{l,l-1}_{fi}$ по всем частотам в пределах полосы частот $G(\omega)$, в случае $l_1 = l$, $l_2 = l-1$ равна

$$P^{l,l-1}_{fi} = \int w^{l,l-1}_{fi} d\omega = \\ = \frac{9\pi^3}{2} e^4 a_0^4 \frac{\sin^2 kR}{(kR)^2} n^4 (2n-1)^2 (n-1)^2.$$

При $l_2 = l+1$ вероятность $P^{l,l+1}_{fi}$ равна нулю в соответствии с правилами отбора.

Выражения (13) и (14) показывают, что вероятность когерентного переноса энергии электронного возбуждения является периодической функцией расстояния, что может привести к пространственно-периодическому распределению возбуждений в конденсированной среде. Образование периодических одномерных, двумерных и трехмерных структур в кристаллах при воздействии на них когерентного излучения наблюдалось в эксперименте.

4. Докажем устойчивость пространственно-периодического распределения электронного возбуждения по отношению к малым возмущениям. Полный гамильтониан системы, включающий как систему ОЦ, так и электромагнитное поле, имеет вид ($\omega_{k\lambda}$ — энергия фотонов с волновым вектором $\mathbf{k}$ и поляризацией λ)

$$H = 2\sum_m E_m a^+_m a_m + \\ + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega_{k\lambda} b^+_\lambda(\mathbf{k}) b_\lambda(\mathbf{k}) + W. \quad (15)$$

Руководствуясь аналогией с преобразованием Фрелиха [14], подберем такое унитарное преобразование $U = e^S$ гамильтониана H, при котором гамильтониан $H' = U^+ H U$ не содержит слагаемое W, описывающее взаимодействие ОЦ с электромагнитным полем. Антиэрмитов оператор S ($S^+ = -S$) выберем в виде

$$S = \sum_{\mathbf{k}\lambda} S_{k\lambda}, \quad S_{k\lambda} = \gamma^+_{k\lambda} b^+_\lambda(\mathbf{k}) - \gamma_{k\lambda} b_\lambda(\mathbf{k}),$$

$$\gamma_{k\lambda} = \sum_{i,j} \int_V \int_V f_{ijk\lambda}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) a^+_i a_j dv_1 dv_2, \quad (16)$$

$$\gamma^+_{k\lambda} = \sum_{m,n} \int_V \int_V f^*_{mnk\lambda}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) a^+_m a_n dv_1 dv_2.$$

Функции $f_{ijk\lambda}$ подбираются так, чтобы исключить W в (14). Используя операторное тождество $[AB, CD] = A[B, CD] + [A, CD]B$, находим

$$\left[a^+_i a_j, a^+_m a_n\right] = \delta_{jm} a^+_i a_n - \delta_{in} a^+_m a_j.$$

Если выбрать коэффициенты разложения $f_{ijk\lambda}$ симметричными по индексам i и j, то коммутатор $\left[\gamma_{k\lambda}, \gamma^+_{q\sigma}\right] = 0$. В этом случае оператор $\left[\gamma_{k\lambda} b_\lambda(\mathbf{k}), \gamma^+_{k\lambda} b^+_\lambda(\mathbf{k})\right]$ коммутирует с оператором $S_{k\lambda}$, вследствие чего можно применить тождество Бейкера-Хаусдорфа $e^{\beta+\beta^+} = e^\beta e^{\beta^+} e^{-[\beta,\beta^+]/2}$, где $\beta = \sum_{k,\lambda} \gamma_{k\lambda} b_\lambda(k)$,

$\beta^+ = \sum\limits_{\mathbf{k},\lambda} \gamma^*_{\mathbf{k}\lambda} b^+_\lambda(\mathbf{k})$, и оператор U можно записать в следующих двух формах:

$$U = e^{\beta^+} e^{-\beta} e^{\chi/2}, \text{ или } U = e^{-\beta} e^{\beta^+} e^{-\chi/2}.$$

Здесь $\chi = \sum\limits_{k,\lambda} \gamma^+_{\mathbf{k}\lambda} \gamma_{k\lambda}$.

Разложим $e^{\chi/2}$ в ряд. Произвольный член этого разложения, содержащий n операторов рождения и столько же операторов уничтожения путем использования канонических антикоммутационных соотношений, приводится к члену, пропорциональному $a^+_1 a^+_2 a_1 a_2$. Действительно, индексы i, j, m, n принимают значения 1 и 2: 1 — для основного состояния первого или второго атома, 2 — для возбужденного. Следовательно, если какой-то член разложения $e^{\chi/2}$ в ряд будет содержать более двух операторов уничтожения, среди них будут два совпадающих, но тогда, используя канонические антикоммутационные соотношения, их можно поставить рядом и учесть, что $a_i a_i = 0$. Отмеченный факт является следствием общей теоремы, доказанной в [15]. В результате унитарный оператор U равен

$$U = (1 + \chi/2)\, e^{\beta^+} e^{-\beta}, \text{ или } U = (1 - \chi/2)\, e^{-\beta} e^{\beta^+}.$$

Вычислим гамильтониан H'. Поскольку U коммутирует с операторами $a^+_i a_j$, входящими в гамильтониан взаимодействия W, то можно использовать операторное тождество

$$e^{-S} b_\lambda(\mathbf{k})\, e^S = b_\lambda(\mathbf{k}) - \frac{1}{1!}[S, b_\lambda(\mathbf{k})] + \frac{1}{2!}[S, [S, b_\lambda(\mathbf{k})]] - \ldots.$$

Тогда

$$U^+ b_\lambda(\mathbf{k})\, U = b_\lambda(\mathbf{k}) + \gamma^+_{k\lambda},$$

$$U^+ b^+_\lambda(\mathbf{k})\, U = b^+_\lambda(\mathbf{k}) + \gamma_{k\lambda}.$$

Следовательно

$$H' = 2\sum_m E'_m a^+_m a_m + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega_{k\lambda} b^+_\lambda(\mathbf{k})\, b_\lambda(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega_{k\lambda} \gamma_{k\lambda} b_\lambda(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega_{k\lambda} \gamma^+_{k\lambda} b^+_\lambda(\mathbf{k}) + W'_1 + W'_2 + W'^+_1 + W'^+_2,$$

где

$$W'_k = \int\limits_V \sum_{i,j} \sum_{\mathbf{k},\lambda} g_{ij\lambda}(\mathbf{r}_k)\, a^+_i a_j b_\lambda(\mathbf{k})\, e^{-i\omega_{k\lambda} t} dv_k + \int\limits_V \sum_{i,j} \sum_{\mathbf{k},\lambda} g_{ij\lambda}(\mathbf{r}_k)\, a^+_i a_j \gamma^+_{k\lambda} e^{-i\omega_{k\lambda} t} dv_k + \text{э.с.},$$

$$k = 1, 2.$$

Символом «э.с.» обозначено выражение, эрмитово сопряженное сумме первых двух слагаемых.

Для исключения гамильтониана взаимодействия необходимо положить

$$\sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega_{k\lambda} \gamma_{k\lambda} + \sum_{k=1,2} \sum_{\substack{i,j,\\ \mathbf{k},\lambda}} \times \int\limits_V g_{ij\lambda}(\mathbf{r}_k)\, a^+_i a_j e^{-i\omega_{k\lambda} t} dv_k = 0,$$

$$\sum_{k\lambda} \omega_{k\lambda} \gamma^+_{k\lambda} + \sum_{k=1,2} \sum_{\substack{i,j,\\ \mathbf{k},\lambda}} \times \int\limits_V g^*_{ij\lambda}(\mathbf{r}_k)\, a^+_i a_j e^{i\omega_{k\lambda} t} dv_k = 0. \quad (17)$$

Тогда гамильтониан H' с учетом (17) приобретает вид

$$H' = 2\sum_m E'_m a^+_m a_m + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega_{k\lambda} b^+_\lambda(\mathbf{k})\, b_\lambda(\mathbf{k}) + W',$$

где

$$W' = -\frac{2}{\omega_{\mathbf{k}\lambda}} \int\limits_V \int\limits_V \sum_{\substack{i,j,\\ m,n}} \sum_{\substack{\mathbf{k},\lambda,\\ \mathbf{q},\sigma}} g_{ij\lambda}(\mathbf{r}_1) \times g^*_{mn\sigma}(\mathbf{r}_2)\, a^+_i a_j a^+_m a_n dv_1 dv_2 - \text{э.с.}. \quad (18)$$

В гамильтониане (18) опущены все слагаемые, содержащие интегрирование только по координатам одного атома; эти слагаемые соответствуют поправкам к уровням энергии изолированного атома (диаграмма рис. 1а) и не имеют отношения к взаимодействию атомов. Оставшиеся слагаемые описывают взаимодействие атомов, соответствующий потенциал взаимодействия равен

$$\Pi(R) = \sum_{ijmn} \sum_{\lambda\sigma} g_{ij\lambda}(\mathbf{r}_1)\, g^*_{mn\sigma}(\mathbf{r}_2), \quad (19)$$

Здесь, как и выше, расстояние между электронами ОЦ $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ заменено на расстояние R между атомными остовами.

Гамильтониан (18) формально совпадает с гамильтонианом Фрелиха в теории сверхпроводимости, описывающим взаимодействие между электронами проводимости путем обмена виртуальным фононом. Таким образом, взаимодействие между атомами, которое осуществляется путем обмена фотоном, приводит к образованию связанного состояния двух атомов. Энергия возбужденного состояния такой квазимолекулы E_m^{eff} отличается от удвоенного значения энергии одного атома E'_m на величину потенциала взаимодействия $\Pi(R)$

$$E_m^{eff} = 2E'_m - \Pi(R). \qquad (20)$$

То, что взаимодействие оптических центров приводит к образованию именно связанного состояния, видно из формул (19) и (20). Согласно формуле (19) $\Pi > 0$, а из (20) следует, что энергия связанной обменом виртуальным фотоном пары оптических центров меньше суммарной энергии невзаимодействующих центров.

Выражение (20) дает критерий температурной устойчивости периодических структур — энергия теплового движения должна быть достаточно мала по сравнению с энергией взаимодействия оптических центров

$$kT \ll \Pi(R).$$

В настоящее время остается открытым вопрос, является ли переход от упорядоченной структуры оптических центров к структуре, не содержащей порядка, фазовым переходом. Этот вопрос связан с более точным вычислением собственных значений и собственных функций гамильтониана (18). Тем не менее, как отмечено в начале статьи, именно образование периодических структур позволяет объяснить отмеченные выше характерные особенности распространения света в конденсированных средах при низких температурах.

Литература

1. *Fillips D. F., Fleischhauer A., Mair A., Walsworth R. L., Lukin M. D.* Storage of light in atomic vapour // Physical. Review Letters. 2001. Vol. 86. No. 5. P. 783–786.
2. *Cerboneschi E., Renzoni F., Arimondo E.* Relaxation processes in slow light: the role of the atomic momentum // Optics Communications. 2002. Vol. 204. P. 211–217.
3. *Cerboneschi E., Renzoni F., Arimondo E.* Dynamics of slow-light formation // Optics Communications. 2002. Vol. 208. P. 125–130.
4. *Deng L., Hagley E. W., Payne M. G.* Optical wave group velocity reduction in sodium without on-resonance electromagnetically induced transparency // Optics Communications. 2002. Vol. 212. P. 101–105.
5. *Агапьев Б. Д., Горный М. Б., Матисов Б. Г., Рождественский Ю. В.* Когерентное пленение населенностей в квантовых системах // Успехи физических наук. 1993. Т. 163. №9. С. 1–35.
6. *Кочаровская О.А.* Когерентные низкочастотные эффекты в трехуровневых средах с асимметричными оптическими переходами // Квантовая электроника. 1990. Т. 17. №1. С. 20–27.
7. *Александров Е. Б., Запасский В. С.* Легенда об остановленном свете // Успехи физических наук. 2004. Т. 174. №10. С. 1005–1108.
8. *Тайченачев А. В., Тумайкин А. М., Ольшаный М. А., Юдин В. И.* Локализация атомов в резонансном неоднородно поляризованном поле за счет когерентного пленения населенностей // Письма в ЖЭТФ. Т. 53. Вып. 7. С. 336–338.
9. *Meves M.-O., Andrews M. R., van Druten N. J., Kurn D. M., Durfee D. S., Ketterle W.* Bose-Einstein condensation in a tightly confining dc magnetic trap // Physical Review Letters. 1996. V. 77. No. 3. P. 416–419.
10. *Кеттерле В.* Когда атомы ведут себя как волны. Бозе-эйнштейновская конденсация и атомный лазер // Успехи физических наук. 2003. Т. 173. №12. С. 1339–1358.
11. *Пелетминский А. С., Пелетминский С. В., Слюсаренко Ю. В.* К теории пространственно-периодического бозе-конденсата в модели слабонеидеального бозе-газа // Теоретическая и математическая физика. 2000. Т. 125. №1. С. 152–177.
12. *Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1980, 704 с.
13. *Собельман И. И.* Введение в теорию атомных спектров. М.: Физматгиз, 1963, 640 с.
14. *Марч Н., Янг У., Сампантхар С.* Проблема многих тел в квантовой механике. М.: Мир, 1969. 496 с.
15. *Березин Ф.А.* Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1986. 320 с.

Статья поступила 5 июня 2007 г.
Кубанский государственный университет, г. Краснодар
© Аванесов А. Г., Тумаев Е. Н., 2007