

кинематических областей давать основной вклад. Характерным примером может служить квантовая хромодинамика в калибровках аксиального типа (см., например, [13]).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Chetyrkin K. G., Kataev A. L., Tkachov F. V. Nucl. Phys., B174, 1980, p. 345. [2] Chetyrkin K. G., Tkachov F. V. Nucl. Phys., 1981, B192, p. 159. [3] Reya E. Phys. Reports, 1981, 69, N 3, p. 195. [4] Buras A. J. NORDITTA preprint 81/43, 1981. [5] Mohapatra R. N. Preprint CCNY—HER—82/2, N. Y., 1982. [6] Казаков Д. И., Тарасов О. В., Владимиров А. А. Вычисление критических индексов методами квантовой теории поля. Препринт E2-124961, Дубна, 1979. [7] Васильев А. Н., Письмак Ю. М., Хонконен Ю. Р. ТМФ, 1981, 47, № 3, с. 291. [8] Amati D., Petronzio R., Veneziano G. Nucl. Phys., 1978, B146, p. 29. [9] Усюкина Н. И. ТМФ, 1983, 54, № 1, с. 124. [10] Усюкина Н. И. ТМФ, 1975, 22, № 3, с. 300. [11] Владимиров А. А. ТМФ, 1980, 43, с. 210. [12] VeIokurov V. V., Ussyukina N. I. J. of Phys. A., 1983, 16, p. 2811. [13] Pritchard D. J., Stirling W. J. Nucl. Phys., 1980, B165, p. 237.

Поступила в редакцию
20.12.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 6.

УДК 539.12.01

«ТЕОРЕМА ПОГАШЕНИЯ». КВАНТОВЫЙ ПОДХОД

В. Бужек (Чехословакия), В. И. Григорьев, Я. Хронек (Чехословакия)

(кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

Хорошо известная «Теорема погашения» Эвальда — Озеена, посвященная выяснению — на уровне микроскопического описания — того, как формируется в веществе электромагнитная волна, распространяющаяся со скоростью c/n , была сформулирована сначала в рамках неквантового подхода [1, 2]. В настоящей работе предлагается попытка «перевода на квантовый язык» этой теоремы.

Рассмотрим идеальную бесконечно протяженную кубическую решетку, в узлах которой неподвижно закреплены двухуровневые центры. Гамильтониан взаимодействия между электромагнитным излучением и таким кристаллом запишем в дипольном приближении:

$$H_{\text{вз}} = - \sum_f (\hat{d}_f \hat{E}_f),$$

где \hat{d}_f — оператор дипольного электрического момента f -го центра, имеющего координаты $\{a_{f1}, a_{f2}, a_{f3}\}$, E_f — оператор напряженности электрического поля в той точке, где помещается этот узел. Будем пользоваться калибровкой, при которой

$$\hat{E} = - \partial \hat{A} / \partial t,$$

и

$$\hat{A}_f = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 k \times \\ \times \sum_{\lambda=1}^2 \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \varepsilon(\mathbf{k}, \lambda) \{ a_{\lambda}^{(+)}(\mathbf{k}) e^{i\omega t - i\mathbf{k}\mathbf{x}_f} + a_{\lambda}^{(-)}(\mathbf{k}) e^{-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{x}_f} \}$$

(полагаем $\hbar = c = 1$). Описывающие поляризацию единичные векторы $\epsilon(\mathbf{k}, \lambda)$ для каждого значения \mathbf{k} ортогональны к вектору \mathbf{k} и друг к другу. Правила перестановок для операторов поглощения $a_{\mathbf{k}}^{(-)}$ и испускания $a_{\mathbf{k}}^{(+)}$ фотонов записываются в обычном виде:

$$[a_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{k}), a_{\mathbf{k}'}^{(+)}(\mathbf{k}')] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}').$$

Обозначая операторы порождения (поглощения) основного и возбужденного состояний f -го центра через $N_f, \bar{V}_f(N_f, V_f)$ соответственно, выпишем правила перестановок для этих операторов:

$$[N_f, \bar{N}_f] = [V_f, \bar{V}_f] = \delta_{ff}.$$

Явное выражение гамильтониана взаимодействия через операторы поглощения и испускания

$$H_{\text{вз}} = \sum_f (H_f^{(-)} + H_f^{(+)}); \quad H_f^{(+)} = \bar{N}_f V_f \Theta_f^{(+)}; \quad H_f^{(-)} = \bar{V}_f N_f \Theta_f^{(-)},$$

где

$$\Theta_f^{(\pm)} = \int d^3k \sum_{\lambda=1}^2 Q^{(\pm)}(\mathbf{k}, \lambda) a_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{k}) e^{\pm i t(\omega - \omega_0) \mp i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_f},$$

показывает, что рассматривается один из вариантов модели Ли. Хотя эта модель и не учитывает ряда эффектов, например диссипаций, она все же дает возможность [3] исследовать важные черты процесса распространения электромагнитного излучения в кристаллах.

Функции $Q^{(+)}(\mathbf{k}, \lambda)$ и $Q^{(-)}(\mathbf{k}, \lambda)$, выступающие в роли формфакторов, примем одинаковыми для всех центров; они выражаются через матричные элементы дипольного момента:

$$Q^{(+)}(\mathbf{k}, \lambda) = \frac{i}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\omega_0}{2}} (d_{21} \epsilon(\mathbf{k}, \lambda)); \quad Q^{(-)}(\mathbf{k}, \lambda) = (Q^{(+)}(\mathbf{k}, \lambda))^+;$$

$$d_{21} = e \int d^3x \varphi_2^*(\mathbf{x}) \mathbf{x} \varphi_1(\mathbf{x}),$$

где $\varphi_1(\mathbf{x})$ и $\varphi_2(\mathbf{x})$ — s -численные волновые функции основного и возбужденного состояний атома соответственно, $\omega_0 = E_2 - E_1$ — частота перехода.

Постановка рассматриваемой ниже задачи такова: в начальный момент $t = 0$ существует однофотонный волновой пакет и все атомы находятся в невозбужденных состояниях. Найти, как распространяется излучение в кристалле при $t > 0$.

Вектор начального состояния записывается следующим образом:

$$\Psi_{t=0} \equiv \Psi_{\text{нач}} = \int d^3k \sum_{\lambda=1}^2 a_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{k}) |\Phi\rangle f(\mathbf{k}, \lambda),$$

где вектор «физического вакуума» есть

$$|\Phi\rangle = \prod_f \bar{N}_f |0\rangle.$$

Пакетная функция пока не конкретизируется; отметим лишь условие нормировки:

$$\sum_{\lambda=1}^2 \int d^3k |f(\mathbf{k}, \lambda)|^2 = 1.$$

Для $t > 0$ вектор состояния из-за специфики модели можно записать в виде

$$\Psi(t) = \Psi^{(0,1)} + \Psi^{(1,0)}, \quad (1)$$

где $\Psi^{(n,k)}$ обозначает вектор состояния с n фотонами и k возбужденными центрами. Будем искать $\Psi^{(1,0)}$ и $\Psi^{(0,1)}$ в форме

$$\begin{aligned} \Psi^{(1,0)} &= \int d^3k \sum_{\lambda=1}^2 a_{\lambda}^{(+)}(\mathbf{k}) |\Phi\rangle G(\mathbf{k}, \lambda; t), \\ \Psi^{(0,1)} &= \sum_f \bar{V}_f N_f |\Phi\rangle B_f(t). \end{aligned}$$

Переходя к энергетическому представлению, перепишем искомые коэффициентные функции в виде

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, \lambda; t) &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathcal{E} G(\mathbf{k}, \lambda; \mathcal{E}) e^{it(\omega - \mathcal{E})}, \\ B_f(t) &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathcal{E} B_f(\mathcal{E}) e^{it(\omega_0 - \mathcal{E})}. \end{aligned}$$

Подставим (1) в уравнение Шредингера, дополненное членом, учитывающим начальное условие:

$$i \frac{\partial \Psi^{(1,0)}}{\partial t} = \sum_f H_f^{(+)} \Psi^{(0,1)} + i\delta(t) \Psi_{\text{нач}}; \quad i \frac{\partial \Psi^{(0,1)}}{\partial t} = \sum_f H_f^{(-)} \Psi^{(1,0)}. \quad (2)$$

Подразумевается, что в правой части (2) берется свертка всех операторов поглощения в $H_f^{(\pm)}$ и соответствующих операторов испускания из $\Psi^{(n,k)}$. Потребовав, чтобы при $t \rightarrow \infty$ волновой вектор $\Psi(t)$ обращался в нуль, мы благодаря добавлению в правой части (2) члена $i\delta(t) \Psi_{\text{нач}}$ учтем начальные условия [4].

Подстановка приводит к следующей системе c -численных уравнений для коэффициентных функций:

$$\begin{aligned} (\mathcal{E} - \omega) G(\mathbf{k}, \lambda; \mathcal{E}) &= \sum_f Q^{(+)}(\mathbf{k}, \lambda) B_f(\mathcal{E}) e^{-i\mathbf{kx}t} + f(\mathbf{k}, \lambda); \\ (\mathcal{E} - \omega_0) B_f(\mathcal{E}) &= \sum_{\lambda=1}^2 \int d^3k Q^{(-)}(\mathbf{k}, \lambda) G(\mathbf{k}, \lambda; \mathcal{E}) e^{i\mathbf{kx}t}. \end{aligned}$$

Умножим второе из этих уравнений на $e^{-i\mathbf{kx}t}$, просуммировав по всем f и вводя обозначение

$$B(\mathbf{k}; \mathcal{E}) \equiv \sum_f B_f(\mathcal{E}) e^{-i\mathbf{kx}t}, \quad (3)$$

получим уравнения, в которые входят лишь $B(\mathbf{k}; \mathcal{E})$ и $G(\mathbf{k}, \lambda; \mathcal{E})$.

Для возникающих при этом решеточных сумм используем соотношение [2]

$$\sum_f e^{i\mathbf{kx}t} = \rho \sum_f \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{g}_f), \quad (4)$$

где $\rho = (2\pi/a)^3$, a^{-3} — плотность узлов решетки, \mathbf{g}_l — вектор обратной решетки, имеющий компоненты $\left\{ \frac{2\pi}{a} l_1, \frac{2\pi}{a} l_2, \frac{2\pi}{a} l_3 \right\}$, где l_1, l_2, l_3 пробегают все целочисленные значения.

Получаемые с учетом (4) уравнения для $B(\mathbf{k}; \mathcal{E})$ и $G(\mathbf{k}, \lambda; \mathcal{E})$ имеют следующий вид:

$$(\mathcal{E} - \omega) G(\mathbf{k}, \lambda; \mathcal{E}) = Q^{(+)}(\mathbf{k}, \lambda) B(\mathbf{k}; \mathcal{E}) + f(\mathbf{k}, \lambda);$$

$$(\mathcal{E} - \omega_0) B(\mathbf{k}; \mathcal{E}) = \rho \sum_l \sum_{\lambda=1}^2 Q^{(-)}(\mathbf{k} + \mathbf{g}_l, \lambda) G(\mathbf{k} + \mathbf{g}_l, \lambda; \mathcal{E}). \quad (5)$$

Поскольку, как вытекает из (3), $B(\mathbf{k} + \mathbf{g}_l; \mathcal{E}) = B(\mathbf{k}; \mathcal{E})$ при любом l , можно, используя это условие периодичности, записать:

$$(\mathcal{E} - \omega_0) G(\mathbf{k}_l, \lambda; \mathcal{E}) = Q^{(+)}(\mathbf{k}_l, \lambda) B(\mathbf{k}; \mathcal{E}) + f(\mathbf{k}_l, \lambda),$$

где $\mathbf{k}_l = \mathbf{k} + \mathbf{g}_l$, $\omega_l = |\mathbf{k}_l|$.

Подставляя определяемое этим уравнением $G(\mathbf{k}_l, \lambda; \mathcal{E})$ во второе из уравнений (5) и выбирая правила обхода особых точек таким образом, чтобы обеспечить выполнение начальных условий (это сводится к тому, что во всех энергетических знаменателях \mathcal{E} заменяется на $\mathcal{E} + i0$), приходим к следующему выражению для $G(\mathbf{k}, \lambda; \mathcal{E})$:

$$G(\mathbf{k}, \lambda; \mathcal{E}) = \frac{f(\mathbf{k}, \lambda)}{\mathcal{E} - \omega} + \rho Q^{(+)}(\mathbf{k}, \lambda) \times$$

$$\times \frac{\sum_{\lambda'=1}^2 \sum_l \frac{Q^{(-)}(\mathbf{k}_l, \lambda')}{\mathcal{E} - \omega_l} f(\mathbf{k}_l, \lambda')}{(\mathcal{E} - \omega) \left(\mathcal{E} - \omega_0 - \rho \sum_{\lambda'=1}^2 \sum_l \frac{|Q(\mathbf{k}_l, \lambda')|^2}{\mathcal{E} - \omega_l} \right)}. \quad (6)$$

Полученное выражение для $G(\mathbf{k}, \lambda; \mathcal{E})$ является точным решением поставленной нами задачи; оно, в частности, не предполагает ограничений на отношение длины волны излучения к постоянной решетки a .

Первый член в правой части (6) описывает распространение фотонного пакета в вакууме; все волны, составляющие этот пакет, имеют скорость c . Остальные члены относятся ко вторичному излучению, возникающему в кристалле под действием первичного пакета. «Погашение», являющееся предметом рассмотрения, выражается в том, что часть вторичных волн, накладываясь на первичные, «гасит» их, а остающиеся волны распространяются со скоростями, отличными от c и определяемыми как свойствами атомов, так и структурой кристалла. В том, что такое «погашение» действительно описывается полученным выше выражением для $G(\mathbf{k}, \lambda; \mathcal{E})$, легко убедиться непосредственными вычислениями. Однако здесь целесообразно обсудить и поляризационные эффекты.

Пусть, например, начальный пакет является линейно поляризованным; пакетную функцию при этом можно выбрать так, чтобы $f(\mathbf{k}, 1)$ было отличным от нуля, а $f(\mathbf{k}, 2) = 0$. Если при этом и формфакторы таковы, что $Q^{(\pm)}(\mathbf{k}, 1) \neq 0$; $Q^{(\pm)}(\mathbf{k}, 2) = 0$, т. е. все атомы могут испускать и поглощать только фотоны начальной поляризации, то

$$G(\mathbf{k}, 1; \mathcal{E}) = \frac{1}{(\mathcal{E} - \omega) W} \left\{ f(\mathbf{k}, 1) \cdot (\mathcal{E} - \omega_0 - \rho \sum_{l \neq 0} \frac{|Q(\mathbf{k}_l, 1)|^2}{\mathcal{E} - \omega_l}) + \right.$$

$$+ \rho Q^{(+)}(\mathbf{k}, 1) \sum_{l \neq 0} \frac{Q^{(-)}(\mathbf{k}, l)}{\varepsilon - \omega_l} f(\mathbf{k}, l) \Big\},$$

$$G(\mathbf{k}, 2; \varepsilon) = 0, \quad (7)$$

$$W = \varepsilon - \omega_0 - \rho \sum_l \frac{|Q(\mathbf{k}_l, 1)|^2}{\varepsilon - \omega_l}.$$

Таким образом, пакетная функция трансформируется; из нее выпадает член, описывающий распространение начального пакета со скоростью c ; появляются и вклады от фотонов, распространяющихся в направлениях, отличных от начальных, если только по условиям задачи нельзя ограничиться длинноволновым приближением, т. е. отбросить слагаемые с $l \neq 0$.

Когда же и $Q^{(\pm)}(\mathbf{k}, 2)$ отлично от нуля, то помимо трансформированного пакета первоначальной поляризации появляется и составляющая с другой поляризацией и, конечно, со скоростью распространения, также отличной от c :

$$G(\mathbf{k}, 2; \varepsilon) = \frac{\rho Q^{(+)}(\mathbf{k}, 2) \sum_l \frac{Q^{(+)}(\mathbf{k}_l, 1)}{\varepsilon - \omega_l} f(\mathbf{k}_l, 1)}{(\varepsilon - \omega) \left(\varepsilon - \omega_0 - \rho \sum_l \frac{|Q(\mathbf{k}_l, 1)|^2 + |Q(\mathbf{k}_l, 2)|^2}{\varepsilon - \omega_l} \right)}$$

Переход к длинноволновому приближению ведет к заметным упрощениям. Этот переход оправдан, если формфакторы $Q^{(\pm)}(\mathbf{k}, \lambda)$ отличны от нуля лишь при $|\mathbf{k}| \ll 1/a$; при этом и начальные пакеты должны быть построены из таких волн, волновые векторы которых (и поляризации, конечно) относятся к той области значений, где эти формфакторы не обращаются в нуль. Но если $f(\mathbf{k}, \lambda)$ таково, что при указанных условиях $Q^{(\pm)}(\mathbf{k}, \lambda) \neq 0$, $Q^{(\pm)}(\mathbf{k}_l, \lambda)$ даже при $l=1$ обращается в нуль, так как $|\mathbf{k}_l| \approx 2\pi/a$.

По этой причине и $f(\mathbf{k}, \lambda)Q^{(\pm)}(\mathbf{k}_l, \lambda)$ и $Q^{(+)}(\mathbf{k}_l, \lambda)Q^{(-)}(\mathbf{k}_l, \lambda')$ получаются равными нулю при $l \neq 0$, так что вместо (7), например, можно записать

$$G(\mathbf{k}, 1; \varepsilon) = f(\mathbf{k}, 1) \frac{\varepsilon - \omega_0}{(\varepsilon - \omega) \left(\varepsilon - \omega_0 - \frac{|Q(\mathbf{k}, 1)|^2}{\varepsilon - \omega} \right)}. \quad (8)$$

Выражение (8) получает наглядность, если перейти к пространственно-временному описанию. Такое описание удобно осуществлять при помощи величины

$$F(\mathbf{x}, t, \lambda) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \cdot G(\mathbf{k}, \lambda; \varepsilon) e^{-i\varepsilon t + i\mathbf{k}\mathbf{x}}. \quad (9)$$

Подставляя в (9) выражение (8) и переходя к наиболее интересному случаю, когда начальный пакет состоит из волн, импульсы которых имеют небольшой разброс около некоторого значения \mathbf{p} , получаем

$$F(\mathbf{x}, t, 1) \sim e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} \frac{(\varepsilon_p^{(1)} - \omega_0) e^{-i\varepsilon_p^{(1)} t} - (\varepsilon_p^{(2)} - \omega_0) e^{-i\varepsilon_p^{(2)} t}}{2\Delta_p}. \quad (10)$$

Здесь

$$\Delta_p = \sqrt{\left(\frac{\omega_0 - |p|}{2}\right)^2 + \rho |Q(p, 1)|^2},$$
$$g_p^{(1,2)} = \frac{\omega_0 + |p|}{2} \pm \Delta_p.$$

Полученное выражение для $F(x, t, 1)$ определяет такую физическую картину эволюции длинноволновых пакетов: каждая из плоских волн, формирующих начальный пакет, расщепляется на две волны, распространяющиеся в том же направлении, что и начальная, но с различными амплитудами и скоростями:

$$|v^{(1,2)}| = \frac{\partial g_p^{(1,2)}}{\partial p} = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{|p| - \omega_0 + 2\rho \frac{\partial}{\partial p} |Q(p, 1)|^2}{2\Delta_p} \right\}. \quad (11)$$

Использованная выше модель физически оправдана лишь при частотах, близких к резонансным, т. е. когда $(|p| - \omega_0)^2 < 4\rho |Q(p, 1)|^2$. При этом условии происходит выравнивание амплитуд обеих конечных волн, и для $F(x, t, 1)$ можно записать выражение

$$F(x, t, 1) \sim e^{i\omega_0 t + i p x} \cos(t - \Delta_p). \quad (12)$$

Появляющиеся при этом «биения» определяются периодической перекачкой энергии от электромагнитной волны к образующим кристалл центрам и обратно; конечно, при учете диссипаций пакет излучения получился бы не пульсирующим, а затухающим.

Полученное выше решение, хотя оно и относится к упрощенной модели, по-видимому, может иметь не только методическую значимость. В первую очередь это касается самого существа «эффекта погашения» как результата коллективного влияния всех активных центров вещества на распространение в нем электромагнитного излучения. Для получения более реалистических значений показателей преломления веществ нужно, разумеется, включить в рассмотрение и взаимодействия между атомами, и температурные эффекты, и процессы, обуславливающие поглощение. Однако некоторые важные качественные особенности процесса миграции излучения в веществе выявляются и на базе той модели «микроскопического» описания, которая обсуждалась выше. Это позволяет, в частности, надеяться, что такая модель может оказаться полезной для описания на микроскопическом уровне процессов типа вынужденного излучения как при $a/\lambda \ll 1$, так и при $a/\lambda \gtrsim 1$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Oseen C. W. Ann. d. Physik, 1915, 48, p. 1. [2] Ewald P. P. Ann. d. Physik, 1916, 49, p. 1. [3] Делоне Н. Б., Крайнов В. П. Атом в сильном световом поле. М.: Атомиздат, 1978. [4] Гайтлер В. Квантовая теория излучения. М.: ИЛ, 1956.

Поступила в редакцию
27.12.82