тингс Н., Пикок Дж. Справочник по статистическим распределениям. М.: Статистика, 1980. [10] Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Т. 2. М.: Мир, 1967.

Поступила в редакцию
23.06.83

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1984, т. 25, № 4

УДК 539.12.01

МИГРАЦИЯ ОДНОФОТОННОГО ПАКЕТА В ПЕРИОДИЧЕСКИ ДЕФОРМИРОВАННОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

В. Бужек (Чехословакия)

(кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

В работе [1] на основе последовательного микроскопического подхода была переведена на «квантовый язык» теорема погашения Эвальда—Озеена [2]. На базе квантовой теории была посчитана функция эволюции однофотонного пакета, распространяющегося в идеальной бесконечно протяженной кубической решетке. Был установлен эффект погашения, который заключается в том, что поле вторичного излучения в веществе можно описать в виде суммы двух членов, один из которых удовлетворяет волновому уравнению в вакууме и описывает точное «гашение» падающей волны, тогда как второй удовлетворяет волновому уравнению для распространяющегося со скоростью c/n излучения (n — коэффициент преломления).

Предлагаемая работа посвящена квантовому рассмотрению миграции однофотонного пакета в периодически деформированном кристалле. Кристалл может быть деформирован, например, акустической волной, скорость которой много меньше скорости излучения, и поэтому перемещением акустической волны в кристалле можно пренебречь.

Описание теоретической модели. Обсуждаемая ниже задача является модельной: вместо реального вещества рассматривается бесконечно протяженная периодически деформированная кубическая решетка, в узлах которой неподвижно закреплены «атомы» — двухуровневые центры (см., например, [3]), могущие испускать и поглощать фотоны. В модели не учитываются прямые взаимодействия между отдельными центрами. Такая модель (в литературе часто называемая моделью Ли — см. [4]), хотя в ней и не учтены явления, обусловленные тепловым движением и диссипацией, является подходящей теоретической основой для исследования самых характерных черт миграции фотонов в кристаллах.

В качестве фотонов рассматриваются безмассовые, бесспиновые Θ-бозоны. Это упрощение несущественно — поляризационные эффекты можно учесть (см. [5]), но вместе с тем полезно, так как упрощает выкладки.

Гамильтониан взаимодействия между Θ-бозонами (ради простоты последние будем в дальнейшем называть фотонами) и центрами, из которых построен кристалл, имеет в дипольном приближении следующий вид:

$$H_{вз} = \sum_{f=-\infty}^{\infty} (\bar{V}_f N_f \Theta_f^{(-)} + V_f \bar{N}_f \Theta_f^{(+)}) = \sum_f (H_f^{(-)} + H_f^{(+)}). \qquad (1)$$

Дипольное приближение уместно, когда длина волны излучения много больше размеров атомов (более подробно см. [3]). $\bar{N}_f$, $\bar{V}_f$ (N_f, V_f) являются соответственно операторами рождения (уничтожения) основного и возбужденного состояний f-го центра. В дальнейшем будем называть возбужденное состояние центра V-частицей и основное состояние N-частицей. Операторы $\Theta_f^{(\pm)}$ выражаются через операторы рождения и уничтожения фотонов $a^{(\pm)}(\mathbf{k})$:

$$\Theta_f^{(\pm)} = \int d\mathbf{k} a^{(\pm)}(\mathbf{k}) Q^{(\pm)}(\mathbf{k}) e^{\pm it(\omega-\omega_0)\mp i\mathbf{k}\mathbf{x}_f},$$

где $\omega = |\mathbf{k}|$, ω_0 является резонансной частотой атома, $\mathbf{x}_f$ — координатой f-го центра. Для с-численных функций $Q^{(\pm)}(\mathbf{k})$-формфакторов, описывающих атомы, имеет место соотношение

$$[Q^{(\pm)}(\mathbf{k})]^* = Q^{(\mp)}(\mathbf{k}),$$

где * означает операцию комплексного сопряжения. Операторы рождения и уничтожения N-частиц, V-частиц и фотонов подчиняются следующим коммутационным соотношениям:

$$[N_f, \bar{N}_i] = [V_f, \bar{V}_i] = \delta_{fi}; \ [a^{(-)}(\mathbf{k}), a^{(+)}(\mathbf{q})] = \delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{q}).$$

Постановка задачи о распространении однофотонного пакета в периодически деформированном бесконечном кристалле такова: в начальный момент времени $t=0$ существует однофотонный волновой пакет и все атомы находятся в основном состоянии; нужно исследовать эволюцию излучения в кристалле при $t>0$.

Вектор начального состояния системы фотон — невозбужденный кристалл может быть представлен в виде

$$\Psi_{t=0} = \Psi_{\text{нач}} = \int d\mathbf{k} a^{(+)}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) |\Phi\rangle, \tag{2}$$

где вектор «физического вакуума» $|\Phi\rangle$ выражается через вектор «математического вакуума» $|0\rangle$:

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

При $t>0$ вектор состояния $\Psi(t)$ может быть представлен в виде суммы двух слагаемых:

$$\Psi(t) = \int d\mathbf{k} a^{(+)}(\mathbf{k}) F(\mathbf{k}, t) |\Phi\rangle + \sum_{f=-\infty}^{\infty} \bar{V}_f N_f B_f(t) |\Phi\rangle, \tag{3}$$

где $F(\mathbf{k}, t)$ и $B_f(t)$ являются c-численными функциями. Функция $F(\mathbf{k}, t)$ описывает в импульсном представлении эволюцию однофотонного пакета [6].

Эволюция изучаемой системы описывается уравнением Шрёдингера, в правой части которого добавляется член $i\delta(t)\Psi_{\text{нач}}$, позволяющий учесть начальные условия методом [7]:

$$i\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t} = H\Psi(t) + i\delta(t)\Psi_{\text{нач}}. \tag{4}$$

Подставляя в уравнение (4) выражения (1), (2), (3) для H, $\Psi_{\text{нач}}$ и Ψ, получим уравнение относительно функций $F(\mathbf{k}, t)$ и $B_f(t)$. Это уравнение, в свою очередь, распадается на систему двух уравнений, первое из которых описывает систему, состоящую из N-частиц и фотона, и второе описывает эволюцию системы с V-частицей. Переходя к энергетическому представлению, в котором

$$F(\mathbf{k}, t) = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \cdot e^{it(\omega-\varepsilon)} F(\mathbf{k}, \varepsilon); \ B_f(t) = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \cdot e^{it(\omega_0-\varepsilon)} B_f(\varepsilon),$$

получим систему уравнений для функций $F(\mathbf{k}, \varepsilon)$ и $B_f(\varepsilon)$:

$$(\varepsilon-\omega) F(\mathbf{k}, \varepsilon)=\sum_f Q^{(+)}(\mathbf{k}) B_f(\varepsilon) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_f}+f(\mathbf{k}),$$

$$(\varepsilon-\omega_0) B_f(\varepsilon)=\int d\mathbf{k} Q^{(-)}(\mathbf{k})\, F(\mathbf{k}, \varepsilon)\, e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_f}. \qquad (5)$$

Если кристалл не деформирован, то координата $\mathbf{x}_f$ представима в виде

$$\mathbf{x}_f=\mathbf{f}_a=\{f_1a, f_2a, f_3a\},$$

и для тригонометрической суммы в (5) имеет место формула

$$\sum_{f=-\infty}^{\infty} e^{-ik a f}=\rho \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{g}_l), \qquad (6)$$

где

$$\rho=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3;\ \mathbf{g}_l=\frac{2\pi}{a}\,\mathbf{l}=\left\{\frac{2\pi}{a} l_1, \frac{2\pi}{a} l_2, \frac{2\pi}{a} l_3\right\},$$

l_i — целые числа (см. [8]).

При решении задачи об эволюции однофотонного пакета в периодически деформированной решетке можно, введя три величины λ_i $(i=1, 2, 3)$, описывающие длины акустических волн в каждом из направлений x_i:

$$\lambda_i=N_i a,$$

представить координаты центра $f: \mathbf{x}_f=\{x^1_{f_1}, x^2_{f_2}, x^3_{f_3}\}$ в виде

$$x^i_{f_i}=L^i(N^i a)+l^i a+\Delta^i \sin\left(\frac{2\pi}{N_i} l_i\right), \ (i=1, 2, 3). \qquad (7)$$

Величины Δ^i описывают максимальное отклонение центров кристалла в направлении осей x^i от невозмущенных положений. Целые числа l^i, L^i, меняющиеся в пределах $(0\leqslant l^i\leqslant N^i-1)$ и $(-\infty<L^i<\infty)$, однозначным образом определяют число f^i:

$$f^i=L^iN^i+l^i.$$

Формулу (7) можно записать в векторной форме:

$$\mathbf{x}_f=\mathbf{L}(Na)+\mathbf{l}a+\mathbf{\Delta} \sin\left(\frac{2\pi}{N} l\right). \qquad (8)$$

Сумму (6) можно представить в виде

$$\sum_{f=-\infty}^{\infty} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_f}=\sum_{f=-\infty}^{\infty} e^{ik a f}=\rho' \sum_{l=0}^{N-1} e^{ilak} \sum_{L=-\infty}^{\infty} \delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{g}_L), \qquad (9)$$

где

$$\rho'=\rho/N^3;\ \mathbf{g}_L=\left\{\frac{2\pi}{N_1a} L_1, \frac{2\pi}{N_2a} L_2, \frac{2\pi}{N_3a} L_3\right\};$$

доказательство см. в Приложении I.

Если вместо $\mathbf{x}_f=fa$ в (9) положить (8), то для тригонометрической суммы в (5) имеем

$$\sum_{f=-\infty}^{\infty} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_f}=\rho' \sum_{l=0}^{N-1} \exp\left\{i\mathbf{k}\left(\mathbf{l}a+\mathbf{\Delta} \sin\left(\frac{2\pi}{N} l\right)\right)\right\} \sum_{L=-\infty}^{\infty} \delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{g}_L).$$

С учетом обозначений

$$I(\mathbf{k}, \Delta, N) \equiv \frac{1}{N^3} \sum_{l=0}^{N-1} \exp\left\{ i\mathbf{k}\left(\mathbf{l}a + \Delta \sin\left(\frac{2\pi}{N} l \right) \right) \right\}, \tag{10}$$

$$B(\mathbf{k}, \varepsilon) \equiv \sum_{f=-\infty}^{\infty} B_f(\varepsilon) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_f},$$

систему (5) перепишем в виде

$$\begin{gathered}(\varepsilon-\omega) F(\mathbf{k}, \varepsilon) = Q^{(+)}(\mathbf{k}) B(\mathbf{k}, \varepsilon) + f(\mathbf{k}), \\ (\varepsilon - \omega_0) B(\mathbf{k}, \varepsilon) = \rho \sum_{L=-\infty}^{\infty} Q^{(-)}(\mathbf{k} + \mathbf{g}_L) F(\mathbf{k} + \mathbf{g}_L) I(\mathbf{g}_L, \Delta, N).\end{gathered} \tag{11}$$

Точное решение системы уравнений (11) для функции эволюции $F(\mathbf{k}, \varepsilon)$ получим методом последовательных итераций; оно имеет вид

$$F(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{f(\mathbf{k})}{(\varepsilon - \omega)} + \frac{\rho Q^{(+)}(\mathbf{k}) \sum\limits_{L=-\infty}^{\infty} Q^{(-)}(\mathbf{k} + \mathbf{g}_L) I(\mathbf{g}_L, \Delta, N) \dfrac{f(\mathbf{k} + \mathbf{g}_L)}{(\varepsilon - |\mathbf{k} + \mathbf{g}_L|)}}{(\varepsilon - \omega)\left[\varepsilon - \omega_0 - \rho \sum\limits_{L=-\infty}^{\infty} \dfrac{|Q(\mathbf{k} + \mathbf{g}_L)|^2 I(\mathbf{g}_L, \Delta, N)}{(\varepsilon - |\mathbf{k} + \mathbf{g}_L|)} \right]}. \tag{12}$$

Прежде чем заняться доказательством теоремы Эвальда—Озеена, заметим, что выражение для функции эволюции (12) переходит при снятии деформации (т. е. при $\Delta^i \to 0$) в функцию эволюции однофотонного пакета, распространяющегося в идеальном кубическом кристалле (см. Приложение II).

Приступим к анализу выражения для $F(\mathbf{k}, \varepsilon)$. Первый член правой стороны в (12) описывает начальное излучение, распространяющееся со скоростью света c в вакууме. В этом можно убедиться, если перейти от энергетического к временному представлению. Второй член, описывающий вторичное излучение, разбивается на две части, одна из которых полностью «гасит» начальное излучение и вторая описывает излучение, распространяющееся в деформированном кристалле. Для доказательства эффекта погашения приведем обе части выражения (12) к общему знаменателю и убедимся, что член $f(\mathbf{k})/(\varepsilon - \omega)$ действительно пропадает. Окончательное выражение для функции эволюции однофотонного пакета в деформированном кристалле тогда имеет вид

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}, \varepsilon) = &\left[(\varepsilon - \omega)\left(\varepsilon - \omega_0 - \rho \sum_L \frac{|Q(\mathbf{k} + \mathbf{g}_L)|^2}{(\varepsilon - |\mathbf{k} + \mathbf{g}_L|)} I(\mathbf{g}_L, \Delta, N) \right) \right]^{-1} \times \\ &\times \Big[f(\mathbf{k})(\varepsilon - \omega_0) + \rho \times \\ &\times \sum_{L \neq 0} \frac{Q^{(-)}(\mathbf{k} + \mathbf{g}_L) I(\mathbf{g}_L, \Delta, N)(Q^{(+)}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k} + \mathbf{g}_L) - Q^{(+)}(\mathbf{k} + \mathbf{g}_L) f(\mathbf{k}))}{(\varepsilon - |\mathbf{k} + \mathbf{g}_L|)} \Big]. \end{aligned} \tag{13}$$

Формула (13) дает возможность сделать следующие выводы о вторичном излучении в кристалле:

а) излучение рассеивается на кристалле, т. е. возникает набор волн, распространяющихся в направлениях, отличных от первоначального;

б) скорость излучения в деформированном кристалле меняется по сравнению со скоростью излучения в идеальном кристалле (ср. выражения (12) и (II.1));

в) акустическая волна определяет изменение частот излучения, несмотря на то, что эффектов, учитывающих движение вещества, в теории нет.

Заключение. В работе показано, что при распространении однофотонного пакета в периодически деформированном кристалле имеет место эффект погашения, и тем самым доказана теорема Эвальда—Озеена в квантовой теории излучения.

Более того, приведенное доказательство теоремы Эвальда—Озеена может быть применено для случая произвольно деформированного бесконечно протяженного кристалла, так как любая деформация такого кристалла может быть представлена в виде суперпозиции периодических деформаций, для которых теорема погашения только что была доказана.

Автор выражает глубокую признательность В. И. Григорьеву за постоянную помощь и ценные указания при написании данной работы.

Приложение I.

Докажем, что имеет место формула (одномерный вариант (9))

$$\sum_{f=-\infty}^{\infty} e^{ikaf} = \frac{2\pi}{Na} \sum_{l=0}^{N-1} e^{ilak} \sum_{L=-\infty}^{\infty} \delta\left(k - \frac{2\pi}{Na} L\right). \tag{I.1}$$

Для этого воспользуемся одномерной суммой Эвальда [8]:

$$\sum_{f=-\infty}^{\infty} e^{ikaf} = \frac{2\pi}{a} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta\left(k - \frac{2\pi}{a} l\right), \tag{I.2}$$

которую можно представить в виде

$$\sum_{f=-\infty}^{\infty} e^{i\cdot 2\pi kf} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta(k-l). \tag{I.3}$$

Заметим, что бесконечную сумму δ-функций в формуле (I.2) можем представить однозначным образом в виде двойной суммы:

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta\left(k - \frac{2\pi}{a} l\right) = \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{L=-\infty}^{\infty} \delta\left(k - \frac{2\pi}{a} NL - \frac{2\pi}{a} l\right). \tag{I.4}$$

Умножая равенство (I.4) на величину e^{-ikan}, интегрируя по k и учитывая (I.3), получим соотношение

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{-i\cdot 2\pi nl} = \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{L=-\infty}^{\infty} e^{-i\cdot 2\pi NLn - i\cdot 2\pi ln} = \sum_{f=-\infty}^{\infty} \delta(n-f).$$

Делая в этом выражении замену $n \to -\frac{ak}{2\pi}$ и используя сумму (I.2) для суммирования по L, мы приходим к равенству (I.1), что и требовалось доказать.

Приложение II.

Докажем, что при снятии деформации, т. е. при $\Delta \to 0$, выражение для функции эволюции однофотонного пакета в деформированном кристалле переходит в функцию эволюции однофотонного пакета в идеальном кубическом кристалле (см. [1]), т. е. формула (12) переходит в выражение

$$F(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{f(\mathbf{k})}{(\varepsilon - \omega)} + \frac{\rho Q^{(+)}(\mathbf{k}) \sum\limits_{l=-\infty}^{\infty} Q^{(-)}(\mathbf{k} + \mathbf{g}_l) \dfrac{f\left(\mathbf{k} + \frac{2\pi}{a} l\right)}{\left(\varepsilon - \left|\mathbf{k} + \frac{2\pi}{a} l\right|\right)}}{(\varepsilon - \omega)\left[\varepsilon - \omega_0 - \rho \sum\limits_{l=-\infty}^{\infty} \dfrac{\left|Q\left(\mathbf{k} + \frac{2\pi}{a} l\right)\right|^2}{\left(\varepsilon - \left|\mathbf{k} + \frac{2\pi}{a} l\right|\right)}\right]}. \quad (\text{II}.1)$$

Для этого представим (12) в виде

$$F(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{f(\mathbf{k})}{(\varepsilon - \omega)} +$$

$$+ \frac{\rho Q^{(+)}(\mathbf{k}) \sum\limits_{L=-\infty}^{\infty} \int d^3q Q^{(-)}(\mathbf{q}) \dfrac{f(\mathbf{q})}{(\varepsilon - |\mathbf{q}|)} I(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \Delta, N)\, \delta^3\left(\mathbf{q} - \mathbf{k} - \frac{2\pi}{Na}\mathbf{L}\right)}{(\varepsilon - \omega)\left[\varepsilon - \omega_0 - \rho \sum\limits_{L=-\infty}^{\infty} \int d^3q \dfrac{|Q(\mathbf{q})|^2}{(\varepsilon - |\mathbf{q}|)} I(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \Delta, N)\, \delta^3\left(\mathbf{q} - \mathbf{k} - \frac{2\pi}{Na}\mathbf{L}\right)\right]}. \quad (\text{II}.2)$$

Если в этом выражении положить $\Delta = 0$, расписать функцию $I(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \Delta, N)$ соответственно (10) и воспользоваться формулой (9), то (II.2) можно записать в виде

$$F(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{f(\mathbf{k})}{(\varepsilon - \omega)} +$$

$$+ \frac{\rho Q^{(+)}(\mathbf{k}) \sum\limits_{l=-\infty}^{\infty} \int d^3q Q^{(-)}(\mathbf{q}) \dfrac{f(\mathbf{q})}{(\varepsilon - |\mathbf{q}|)}\, \delta^3\left(\mathbf{q} - \mathbf{k} - \frac{2\pi}{a} l\right)}{(\varepsilon - \omega)\left[\varepsilon - \omega_0 - \rho \sum\limits_{l=-\infty}^{\infty} \int d^3q \dfrac{|Q(\mathbf{q})|^2}{(\varepsilon - |\mathbf{q}|)}\, \delta^3\left(\mathbf{q} - \mathbf{k} - \frac{2\pi}{a} l\right)\right]}.$$

После выполнения интегрирования по $\mathbf{q}$ приходим к формуле (II.1), что и требовалось доказать.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Григорьев В. И. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон., 1981, 22, № 4, с. 13. [2] Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1970. [3] Делоне Н. Б., Крайнов В. П. Атом в сильном световом поле. М.: Атомиздат, 1978. [4] Швебер С. Введение в релятивистскую квантовую теорию поля. М.: ИЛ, 1963. [5] Бужек В., Григорьев В. И., Хронек Я. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон., 1983, 24, № 6, с. 27. [6] Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В. Введение в теорию квантованных полей. М.: Наука, 1976. [7] Гайтлер В. Квантовая теория излучения. М.: ИЛ, 1956. [8] Владимиров В. С. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1981.

Поступила в редакцию
30.06.83