сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-89-371

С.С.Лапушкин

КВАЗИОДНОМЕРНАЯ ДВУХУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА В ТЕРМОСТАТЕ

1989

I. Рассмотрим квазиодномерную систему взаимодействующих между собой одинаковых частиц, "встроенных" в твердотельную матрицу. Каждая из частиц может находиться в $f = 0, 1, \ldots$ квантовых состояниях. Они могут быть описаны волновыми функциями $\varphi_n^{(f)}$, n - индекс узла; $\varphi_n^{(f)}$ являются решениями одночастичного уравнения Шредингера $\mathcal{H}_n \varphi_n^{(f)} = \mathcal{E}_f \varphi_n^{(f)}$.

Оператор полной энергии системы дается выражением

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_n \hat{\mathcal{H}}_n + \frac{1}{2} \sum_{n,m}' \hat{V}_{n,m} , \qquad (I)$$

$\sum'$ означает, что $n \neq m$. В дальнейшем во втором слагаемом мы будем учитывать взаимодействие только между ближайшими соседями. Поскольку в каждом узле n располагается одна частица, то естественными являются требования

$$\sum_f \hat{\mathcal{N}}_{nf} = 1, \ \sum_{n,f} \hat{\mathcal{N}}_{nf} = \hat{\mathcal{N}}. \qquad (2)$$

Если ограничиться двухуровневой системой $\mathcal{E}_f = \mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1$, то (2) перепишется, как $\hat{\mathcal{N}}_{n0} = 1 - \hat{\mathcal{N}}_{n1}$.

Учитывая, что в представлении чисел заполнения мы имеем

$$\hat{\mathcal{N}}_{nf} | \ldots \mathcal{N}_{nf} \ldots \rangle = \mathcal{N}_{nf} | \ldots \mathcal{N}_{nf} \ldots \rangle, \qquad (3)$$

то $(\hat{\mathcal{N}}_{nf})^2 = \hat{\mathcal{N}}_{nf}$, $\hat{\mathcal{N}}_{n0} \cdot \hat{\mathcal{N}}_{n1} = 0$, а значит оператор числа частиц в узле n в состоянии $f = 0, 1$ может быть представлен в виде $\hat{\mathcal{N}}_{nf} = b_{nf}^{+} b_{nf}$.

Здесь введены неэрмитовы операторы b^+_{nf} , b_{nf} рождения и уничтожения состояния $f=0,1$ в узле n :

$$b^+_{nf}|\ldots N_{nf}\ldots\rangle=(1-N_{nf})|\ldots(N_{nf}+1)\ldots\rangle,$$

$$b_{nf}|\ldots N_{nf}\ldots\rangle=N_{nf}|\ldots(1-N_{nf})\ldots\rangle. \tag{4}$$

Отсюда следует, что операторы (4) удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$b_{nf}b^+_{nf}+b^+_{nf}b_{nf}=1, \quad b^2_{nf}=(b^+_{nf})^2=0,$$

$$[b_{nf}b^+_{nf'}-b^+_{nf'}b_{nf}]=[b_{nf}b^+_{mf}-b^+_{mf}b_{nf}]=0. \tag{5}$$

Вводя операторные функции

$$\hat{\Psi}(\ldots\xi_n\ldots)=\sum_{nf}b_{nf}\varphi^{(f)}_n(\xi_n),$$

$$\hat{\Psi}^+(\ldots\xi_n\ldots)=\sum_{nf}b^+_{nf}\overset{*}{\varphi}{}^{(f)}_n(\xi_n), \tag{6}$$

получаем правила, по которым осуществляется переход от операторов шредингеровского представления к операторам в представлении вторичного квантования:

$$\hat{\mathcal{H}}_0=\sum_{nf}\mathcal{E}_{nf}\hat{N}_{nf},\ \hat{N}=\sum_{nf}\hat{N}_{nf}=\int\hat{\Psi}^+(\ldots\xi_n\ldots)\hat{\Psi}(\ldots\xi_n\ldots)d\xi_n,$$

$$\sum_{n,m}{}'\hat{V}_{n,m}=\sum_{n,m,f,g,f',g'}{}'b^+_{nf'}b^+_{mg'}b_{mg}b_{nf}\langle f'g'|\hat{V}_{nm}|fg\rangle, \tag{7}$$

$$\langle f'g'|\hat{V}_{nm}|fg\rangle=\int\overset{*}{\varphi}{}^{f'}_n(\xi_n)\overset{*}{\varphi}{}^{g'}_m(\xi_m)\hat{V}_{nm}\varphi^g_m(\xi_m)\varphi^f_n(\xi_n)d\xi_n d\xi_m.$$

В результате гамильтониан (I) преобразуем к представлению вторичного квантования:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{n,f} \varepsilon_f b^+_{nf} b_{nf} + \frac{1}{2} \sum_{n,m,f,g,f',g'}{}' b^+_{nf'} b^+_{mg'} b_{mg} b_{nf} \langle f'g' | \hat{V}_{nm} | fg \rangle . \qquad (8)$$

В дальнейшем нам удобно будет пользоваться не операторами b^+_{nf}, b_{nf}, а операторами перехода Паули:

$$\hat{P}_{nf} = b^+_{n0} b_{nf} , \quad \hat{P}^+_{nf} = b^+_{nf} b_{n0} . \qquad (9)$$

Несложно показать, что

$$\hat{P}^+_{nf} \hat{P}_{nf} = \hat{\mathcal{N}}_{nf} , \quad \hat{P}_{nf} \hat{P}^+_{nf} = 1 - \hat{\mathcal{N}}_{nf} ,$$
$$\hat{P}_{nf} \hat{P}^+_{nf} - \hat{P}^+_{nf} \hat{P}_{nf} = 1 - 2\hat{\mathcal{N}}_{nf} . \qquad (10)$$

Обозначив для двухуровневой системы $\hat{P}_n = b^+_{n0} b_{n1}$, $\hat{P}^+_n = b^+_{n1} b_{n0}$, имеем $\hat{P}_n \hat{P}^+_m - \hat{P}^+_m \hat{P}_n = 0$, если $n \neq m$.

Заметим, что при переходе в гамильтониане (8) к операторам Паули даже при учете взаимодействия между ближайшими соседями в двухуровневой системе возникают, кроме линейных членов по операторам Паули, также члены второго, третьего и четвертого порядков. Однако слагаемые нечетного порядка для системы одинаковых центросимметричных ближайших соседей пропадают (см.[I]).

При получении уравнений движения для операторов Паули в гейзенберговской картине

$$i \dot{P}_{nf} = [P_{nf}, \mathcal{H}]_- = \Phi(P_{nf}, P^+_{nf}), \ \hbar = 1 , \qquad (11)$$

возникают трудности лишь алгебраического свойства. Однако описание физических процессов требует получения уравнений для четко определенных физических величин, или амплитуд вероятности . Необходимы уравнения для соответствующих С-чисел.

В частности, для квазиодномерных двухуровневых систем существует точное преобразование от операторов Паули к операторам Ферми[2] :

$$
\alpha_j = P_j \hat{\varepsilon}_j , \quad \alpha_j^+ = P_j^+ \hat{\varepsilon}_j ,
$$

$$
\hat{\varepsilon}_j |n_1 \ldots n_j \ldots n_N\rangle = \left\{ \prod_{i=1}^{i=j} (-1)^{n_i} \right\} |n_1 \ldots n_j \ldots n_N\rangle . \tag{I2}
$$

Здесь и в дальнейшем ради удобства обозначений j означает индекс узла. При этом удалось разработать процедуру "сведения" операторных уравнений к уравнениям в С-числах [3]. Вместе с тем, когда в операторных уравнениях мы не можем пренебречь членами нечетной степени по операторам Паули, в уравнениях для соответствующих С-чисел возникают интегральные слагаемые[4] . Это сильно усложняет задачу нахождения решений этих уравнений, исследование их на устойчивость.

Существует и точное преобразование к операторам Бозе [5]:

$$
P_j = \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \beta_\nu \overset{+}{B}{}_j^\nu B_j^\nu \right] B_j , \quad P_j^+ = B_j^+ \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \beta_\nu \overset{+}{B}{}_j^\nu B_j^\nu \right] , \tag{I3}
$$

где B_j, B_j^+ - операторы Бозе. Однако здесь приходится оперировать с "оборванными"по бозе-операторам рядами, а также учитывать "иерархию" параметров в гамильтониане при выборе оси квантования (см. [4],[6]).

II. Модельный гамильтониан, описывающий двухуровневую систему в термостате, строится с учетом того, что система состоит из одинаковых двухуровневых молекул, а фононы рассматриваются в гармоническом приближении.

$$\mathcal{H} = \sum_{k} \omega_k N_k + \frac{\nu}{2}\sum_{j=1}^{N} \sigma_j + \frac{i\eta}{2}\sum_{j=1}^{N} \sigma_j \sigma_{j+1} + \sum_{j,k}\left(g_{j,k} B_k^+ P_j + \overset{*}{g}_{j,k} B_k P_j^+ \right) + \mu \sum_{j=1}^{N} \left(P_j^+ P_{j+1} + P_{j+1}^+ P_j \right) + \mu' \sum_{j=1}^{N} \left(P_j^+ P_{j+1}^+ + P_{j+1} P_j \right), \tag{14}$$

при этом $N_k = B_k^+ B_k$, B_k - оператор моды фононного поля, ω_k - частота фононной моды с квазиимпульсом k ("номер" моды); $\sigma_j = \mathcal{N}_j^1 - \mathcal{N}_j^0$ - оператор инверсной заселенности, где $\mathcal{N}_j^1 = P_{j1}^+ P_{j1}$, $\mathcal{N}_j^0 = P_{j0}^+ P_{j0}$; $g_{j,k}$ - параметр взаимодействия с k -ой фононной модой. Перестановочные соотношения для квазиспинов имеют вид:

$$\left[\sigma_j, P_{j'}^+\right]_- = 2P_j^+ \delta_{jj'}, \quad \left[\sigma_j, P_{j'}\right]_- = -2P_j \delta_{jj'}, \quad \left[P_j^+, P_{j'}\right]_- = \sigma_j \delta_{jj'} . \tag{15}$$

Представляет интерес введение в гамильтониан (14) с параметром η слагаемого, которое описывает взаимодействие инверсных заселенностей. Выбор этого слагаемого в таком виде возможен в связи с тем, что рассматривается открытая система с подкачкой и диссипацией. Далее нами будет учтено наличие в системе флуктуационных процессов.

Кроме того, в гамильтониане (14) присутствуют члены с параметрами μ и μ' , выражения для которых приведены в работе [1]. Наряду с обычными слагаемыми при параметре μ , описывающими перенос возбуждения между соседними молекулами, в (14) оставлены и "аномальные" боголюбовские слагаемые с параметром μ', которые учитывают возбуждение и переход в основное состояние двух ближайших соседей.

Теперь, используя (II) и (I4), получим систему уравнений для операторов поляризации P_j инверсной заселенности σ_j и амплитуды фононного поля B_k. Можно было бы воспользоваться приближенным преобразованием Шульца - Маттиса (см. [7]) и "избавиться" от четвертого слагаемого в гамильтониане (I4), но вместо него появился бы член четвертого порядка по операторам Паули с соответствующей перенормировкой параметров. Поскольку мы хотим исследовать взаимное влияние фононной подсистемы, инверсной заселенности и поляризации, мы не будем прибегать здесь к этому приему.

Выпишем операторные уравнения для B_k, P_j и σ_j:

$$
\begin{aligned}
i\dot{B}_k &= [B_k \mathcal{H}]_- = \omega_k B_k + \sum_j g_{j,k} P_j ;\\
i\dot{P}_j &= \nu P_j - \sum_k \overset{*}{g}_{j,k} B_k \sigma_j - \mu' \sigma_j P^+_{j+1} - \\
&- \mu\left(\sigma_j P^+_{j+1} + \sigma_{j+1} P^+_{j-1}\right) - \frac{ih}{2}\left(\sigma_{j+1} + \sigma_{j-1}\right)\sigma_j^+ ;\\
i\dot{\sigma}_j &= \frac{ih}{2}\left(\sigma_{j+1} + \sigma_{j-1}\right) + \\
&+ 2\sum_k \left(\overset{*}{g}_{j,k} B_k P_j^+ - g_{j,k} B_k^+ P_j\right) + \\
&+ 2\mu\left[P^+_{j-1} P_j + P_j^+ P_{j-1} - P_j^+ P_{j+1} - P^+_{j+1} P_j\right] + \\
&+ 2\mu'\left[P^+_{j-1} P_j^+ + P_j^+ P^+_{j+1} - P_{j+1} P_j - P_j P_{j-1}\right] .
\end{aligned}
\tag{I6}
$$

Следует сразу отметить, что процедуру сведения операторных уравнений такого типа к уравнениям в C-числах удалось провести лишь для некоторых весьма простых систем (см., например, [8]). В связи с этим мы прибегнем к стандартной апробированной процедуре, изложенной Г.Хакеном в работах [9]. В итоге имеем уравнения:

$$\begin{aligned}
i\dot{b}_k^* &= (\omega_k - i\chi_k)\, b_k^* + \sum_j g_{j,k}\rho_j + i\mathcal{F}_k(t);\\
i\dot{\rho}_j^* &= (\nu - i\nu_0)\rho_j^* + \sum_k \overset{*}{g}_{j,k}\, b_k^*\sigma_j + i\mathcal{F}_j(t) +\\
&\quad + \mu'\sigma_j\rho_{j+1}^* + \mu(\sigma_j\rho_{j+1}^* + \sigma_{j+1}\rho_{j-1}^*) +\\
&\quad + \frac{i\eta}{2}(\sigma_{j+1} + \sigma_{j-1})\,\sigma_j^*;\\
i\dot{\sigma}_j^* &= i\gamma(\sigma_j^* - \sigma_0) + i\mathcal{F}_{\sigma,j}(t) -\\
&\quad - 2\sum_k \left(g_{j,k}\, b_k^*\rho_j - \overset{*}{g}_{j,k}\, b_k\rho_j^*\right) +\\
&\quad + 2\rho_j^*\left[\mu(\rho_{j-1} - \rho_{j+1}) - \mu'(\rho_{j-1}^* + \rho_{j+1}^*)\right] +\\
&\quad + 2\rho_j\left[\mu(\rho_{j-1}^* - \rho_{j+1}^*) + \mu'(\rho_{j-1} + \rho_{j+1})\right].
\end{aligned} \tag{I7}$$

В (I7) мы обозначили (по [9]) через χ_k время затухания фононной моды b_k в отсутствии лазерной генерации, $g_{j,k}$ – взаимодействие между k-ой модой и частицей в узле j. $\mathcal{F}_k(t)$ -стохастическая сила, обусловленная флуктуациями в диссипативной системе. Таким образом, "полевое уравнение" (в терминологии [9]) формально не изменилось. Основательное изменение претерпели как и следовало ожидать, "материальные уравнения" – уравнения для инверсной заселенности σ_j и дипольного момента ρ_j. К первым трем слагаемым в (I7), - их смысл пояснен в [9], - добавляются слагаемые, возникшие из-за учета взаимодействия частиц. Наряду с "привычными" нелинейными слагаемыми ($b_k^* \rho_j$, $b_k \rho_j^*$, $b_k^* \sigma_j$), добавляются нелинейности $\rho_j^* \rho_{j+1}$, $\rho_{j-1}^* \rho_j$, $\rho_j^* \rho_j^*$, $\rho_j \rho_{j+1}$ и т.п.; меняется, естественно, и физический смысл флуктуирующих сил $\mathcal{F}_k(t), \mathcal{F}_j(t), \mathcal{F}_{\sigma,j}(t)$.

В дальнейшем для получения решений необходимо воспользоваться как физическими соображениями о связи фононной подсистемы с "встроенной" в матрицу квазиодномерной взаимодействующей двухуровневой системой, так и аппроксимациями, что станет предметом последующих исследований.

Я признателен В.К.Федянину за обсуждение результатов и ценные замечания.

Литература

1. В.К.Федянин, Л.В.Якушевич. ТМФ, 37, 3, 371-382 , 1978.
2. D.B.Chesnut, A.Suna, J.Chem.Phys. 39, 146, 1963.
3. V.G.Makhankov and V.K.Fedyanin, Phys.Rep. 104, 1, 1-84, 1984.
4. S.S.Lapushkin, JINR, E17-88-941, Dubna, 1988.
5. В.М.Агранович, Теория экситонов, Изд."Наука", 1968.
6. V.G.Makhankov, R.Myrzakulov, A.V.Makhankov, Phys. Scripta, 35, 233-237, 1987.
7. В.К.Федянин, Л.В.Якушевич, ТМФ, 30, I, 133, 1977.
8. K.Lindenberg, B.J.West, Phys.Rev.A, 30, 1, 568-582, 1984.
9. H.Haken, Rev.Mod.Phys., 47, 67, 1975; Laser Theory, Springer, Berlin - Heidelberg - New York, 1970;

   Г.Хакен, Синергетика, Изд. "Мир", Москва, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 мая 1989 года.