объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-92-150

И.К.Кудрявцев[1], С.Ф.Лягушин[2], А.С.Шумовский

СВЕРХИЗЛУЧАТЕЛЬНАЯ ГЕНЕРАЦИЯ В КРИСТАЛЛЕ С ПАРАМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

Направлено в журнал "Теоретическая и математическая физика"

[1]Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова
[2]Днепропетровский государственный университет

1992

Кристалл с парамагнитной примесью в постоянном магнитном поле образует конечноуровневую систему, при этом количество уровней определяется размерностью спина атомов примеси. Взаимодействие такой спиновой системы с колебаниями решетки аналогично хорошо изученному взаимодействию квантовых оптических излучателей с фотонным полем [1,2], что свидетельствует о возможности возникновения при соответствующих условиях в кристалле с парамагнитной примесью акустического сверхизлучения. Сверхизлучательная генерация фононов экспериментально наблюдалась в параэлектрических системах при возбуждении их гиперзвуковыми или электромагнитными импульсами [3-5]. Этот круг явлений, дающий богатую информацию о диполь-фононном взаимодействии, стал предметом интенсивного изучения [6]. Представляет интерес получение аналогичных результатов для систем со спин-решеточным взаимодействием.

Будем рассматривать гамильтониан кристалла с N парамагнитными примесными центрами со спином S=1:

$$H = \sum_{j=1}^{N} \hbar\omega_0 S_j^z + \sum_k \hbar\omega_k (a_k^+ a_k + 1/2) + \frac{1}{N}\sum_k \sum_{j=1}^{N} \hbar[G_k (S_j^+)^2 a_k \exp(i\vec{k}\vec{r}) + G_k^* (S_j^-)^2 a_k^+ \exp(-i\vec{k}\vec{r})], \quad (1)$$

где a_k^+, a_k – операторы рождения и уничтожения фононов с волновым вектором $\vec{k}$ и частотой ω_k; $\vec{S}_j$ – оператор спина в j-ом центре ($S_j^{\pm} = S_j^x \pm iS_j^y$); ω_0 – частота зеемановского расщепления в постоянном магнитном поле; G_k – константа спин-фононного взаимодействия (которую мы в дальнейшем будем считать действительной).

Проекции оператора спинового момента частицы со спином S=1 можно записать в виде [7]:

$$S_j^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{matrix}, \quad S_j^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{matrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{matrix}, \quad S_j^z = \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$$

Для них выполняются обычные коммутационные соотношения

$$[S_i^x, S_j^y] = iS_j^z \delta_{ij}$$

(и получаемые из них циклическими перестановками), а также следующие соотношения, которые мы будем использовать в дальнейших выкладках:

$$[S_i^z, S_j^{\pm}] = \pm S_j^{\pm} \delta_{ij}, \qquad [S_i^+, S_j^-] = 2S_j^z \delta_{ij},$$

$$[S_i^z, (S_j^+)^2] = 2(S_j^+)^2 \delta_{ij}, \qquad [S_i^z, (S_j^-)^2] = -2(S_j^-)^2 \delta_{ij},$$

$$[(S_i^+)^2, (S_j^-)^2] = 4(2S_j^z S_j^+ S_j^- - 2(S_j^z)^2 - S_j^z)\delta_{ij}.$$

Гамильтониан (1) является многомодовым обобщением гамильтониана, предложенного в работе [8] для случая, когда рассматриваемый кристалл является резонатором для одной из фононных мод. При этом предполагается разрешенным переход с $\Delta S_j^z = \pm 2$.

Динамику спиновой подсистемы исследуем по схеме, изложенной в [1]. Запишем гамильтониан (1) в виде:

$$H = H_M + H_F + H_{MF},$$

где

$$H_M = \hbar\omega_\circ S^z, \qquad H_F = \sum_k \hbar\omega_k (a_k^+ a_k + 1/2),$$

$$H_{MF} = \sum_k \hbar (C_k^+ a_k + a_k^+ C_k).$$

Здесь введены следующие коллективные операторы:

$$S^z = \sum_{j=1}^{N} S_j^z, \qquad C_k = \frac{1}{\sqrt{N}} G_k \sum_{j=1}^{N} (S_j^-)^2 \exp(-i\vec{k}\vec{r}).$$

Метод исключения бозонных переменных [9,10] позволяет получить в представлении Гейзенберга кинетическое уравнение для среднего значения произвольного оператора o, действующего только в подпространстве спиновых переменных:

$$\frac{d\langle o\rangle}{dt} + i\omega_\circ [o, S^z] = \sum_k \{\langle [C_k, o] C_k\rangle + \langle C_k^+ [o, C_k]\rangle +$$

(2)

$$+ n_k (\langle [[C_k^+, o], C_k]\rangle + \langle [C_k^+, [o, C_k]]\rangle\} \pi\delta(2\omega_\circ - \omega_k),$$

где $n_k = [\exp(\beta\hbar\omega_k) - 1]^{-1}$ – число заполнения k-ой фононной моды в начальный момент времени, когда состояние решеточной подсистемы предполагается равновесным с обратной температурой β.

При выводе (2) мы воспользовались адиабатическим приближением

Борна – Маркова:

$$C_k(\tau) \cong C_k(t) \exp[2i\omega_\circ (t-\tau)],$$

рассмотрели систему на больших временах и пренебрегли сдвигами частот.

Из (2) видно, что вклад дают только фононные моды с частотами, удовлетворяющими соотношению $\omega_k = 2\omega_\circ$. Суммирование по k в гамильтониане (1) и последующих равенствах означает взятие двух сумм: по дискретному индексу σ_k – номеру ветви в спектре фононов (в случае фононов одному значению волнового числа $\vec{k}$ может соответствовать несколько значений частоты ω_k [11]) и по квазинепрерывному спектру значений $\vec{k}$. От суммирования по волновым векторам перейдем к интегрированию в пространстве $\vec{k}$, рассматривая изотропный случай:

$$\sum_{\vec{k}} f(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty f(k) k^2 dk.$$

Здесь V – обьем квантования электромагнитного поля.

Для δ-функций воспользуемся известной из теории сингулярных функций формулой [12]:

$$\delta(\omega_k - \omega_\circ) = \sum_q \frac{\delta(k-q)}{\left.\frac{d\omega_k}{dk}\right|_{k=q}}, \qquad (3)$$

где q пробегает значения всех корней уравнения $\omega_k = 2\omega_\circ$, взятого при каждом возможном виде функции ω_k, т.е. для всех ветвей фононного спектра, причем в знаменателе фигурирует производная именно той функции ω_k, при которой данное q обращает в нуль выражение $\omega_k - 2\omega_\circ$.

Отметим, что в работе [13] при рассмотрении на основе метода исключения бозонных переменных проблемы фононного сверхизлучения в кристалле авторы ограничились учетом акустических фононов, имеющих так же, как и фотоны, простую дисперсионную зависимость. Формула (3) позволяет избавиться от этого ограничения и провести более общее рассмотрение, включающее оптические фононы, для которых и наблюдалось явление акустического сверхизлучения.

В результате (2) преобразуется к виду

$$\frac{d\langle o\rangle}{dt} = -i\omega_\circ[o,S^z] + \sum_q \lambda_q\{\langle[c_q^+,o]c_q\rangle + \langle c_q^+[o,c_q]\rangle + \qquad (4)$$

$$+ n_q(\langle[[c_q^+,o],c_q]\rangle + \langle[c_q^+,[o,c_q]]\rangle\},$$

где

$$\lambda_q = \frac{Vq^2}{2\pi \left.\frac{d\omega_k}{dk}\right|_{k=q}}.$$

Рассмотрим теперь случай, когда уравнение $\omega_k - 2\omega_\circ$ имеет одно решение среди всех фононных ветвей. В этом случае в правой части (4) остается только один член в сумме по q. Возьмем в качестве o следующие операторы:

1) $o = S^z$.

$$\frac{d\langle S^z\rangle}{dt} = -4\lambda_q(\langle c_q^+c_q\rangle + \alpha_q n_q\langle S^z\rangle).$$

При выводе использовались приведенные выше коммутационные соотношения для спиновых операторов, равенства

$$S^+S^- + (S^z)^2 - S^z = S(S+1) = 2,$$

$$(S^z)^3 = S^z$$

и обозначение

$$\alpha_q = \frac{4}{N}G_q^2.$$

2) $o = c_q^+c_q$.

$$\frac{d\langle c_q^+c_q\rangle}{dt} = 2\alpha_q\lambda_q[\langle c_q^+c_qS^z\rangle - 2\langle c_q^+c_q\rangle + n_q(-2\langle c_q^+c_q\rangle + \alpha_q\langle(S^z)^2\rangle].$$

3) $o = (S^z)^2$.

$$\frac{d\langle (S^z)^2\rangle}{dt} = 8\lambda_q[-\langle c_q^+c_qS^z\rangle + \langle c_q^+c_q\rangle\ n_q(-\alpha_q\langle S^z\rangle^2 - 2\langle c_q^+c_q\rangle + 3\alpha_q\langle S^z\rangle].$$

Таким образом, как и обычно [1], мы получаем незамкнутую иерархическую систему уравнений. В данном случае в полученные уравнения входит тройной коррелятор $\langle c_q^+c_qS^z\rangle$. Производя расцепление

$$\langle c_q^+c_qS^z\rangle \cong \langle c_q^+c_q\rangle\langle S^z\rangle,$$

мы получаем следующую замкнутую систему:

$$\frac{d\langle S^z\rangle}{dt} = -4\lambda_q(\langle c_q^+c_q\rangle + \alpha_q n_q\langle S^z\rangle),$$

$$\frac{d\langle c_q^+c_q\rangle}{dt} = 2\alpha_q\lambda_q\{\langle c_q^+c_q\rangle\langle S^z\rangle - 2(1+n_q)\langle c_q^+c_q\rangle + \alpha_q n_q\langle(S^z)^2\rangle],$$

$$\frac{d\langle (S^z)^2\rangle}{dt} = 8\lambda_q[-\langle c_q^+c_q\rangle(\langle S^z\rangle - 1) + n_q(-\alpha_q\langle(S^z)^2\rangle - 2\langle c_q^+c_q\rangle +$$

$$+ 3\alpha_q\langle S^z\rangle].$$

Тем самым мы имеем систему нелинейных дифференциальных уравнений, решение которой (при задании определенных начальных условий) может быть получено численно. Система имеет тот же вид, как и системы, получаемые в теории сверхизлучения [1,15]. Решения тоже качественно совпадают. Именно, если в начальный момент времени все спины ориентированы против поля (т.е. $\langle S^z\rangle = N$), то в течение некоторого времени, называемого временем задержки, $\langle S^z\rangle$ остается приблизительно постоянным, а затем резко достигается значение $\langle S^z\rangle \cong -N$, $\langle c_q^+ c_q\rangle$ имеет значение $\sim N^2$ в момент, когда $\langle S^z\rangle \cong 0$, а затем стремится к 0 при $t \to \infty$.

Рассмотрим вопрос о состоянии решетки в ходе сверхизлучательных процессов в спиновой подсистеме. Заметим, что наша модель кристалла с парамагнитной примесью (1) имеет интеграл движения

$$S^z + 2\sum_k a_k^+ a_k = \text{const}.$$

Соответственно, при изменении $\langle S^z\rangle$ от N до -N должна возрасти на N величина $\langle \sum a_k^+ a_k\rangle$. В начальный момент, как указывалось выше, средние числа заполнения бозонных мод даются формулой Бозе – Эйнштейна.

Известно [16], что средний квадрат смещения атомов относительно равновесных положений в кристаллической решетке $\frac{1}{N}\sum_{\vec{l}}|\vec{u}_{\vec{l}}|^2$ пропорционален $\langle\sum_k (a_k^+ a_k + \frac{1}{2})$. Когда $(\frac{1}{N}\sum_{\vec{l}}|\vec{u}_{\vec{l}}|^2)^{1/2}$ становится $\sim 0{,}25 r_s$ (где r_s – средний радиус элементарной ячейки), кристалл теряет устойчивость. Несмотря на грубость этого критерия, можно говорить о возможной нестабильности кристаллической структуры за счет резкого роста величины $\langle\sum_k (a_k^+ a_k + \frac{1}{2})$ при акустическом сверхизлучении.

В рассматриваемом приближении формальные решения уравнений движения для фононных операторов

$$\frac{da_k}{dt} = -i\omega_k - iC_k,$$

$$\frac{da_k^+}{dt} = i\omega_k^+ + iC_k^+$$

можно записать в виде

$$a_k(t) = a_k(t_\circ)\exp[-i\omega_k(t-t_\circ)] - iC_k(t)\delta(\omega_k - 2\omega_\circ),$$

$$a_k^+(t) = a_k^+(t_\circ)\exp[i\omega_k(t-t_\circ)] + iC_k^+(t)\delta(\omega_k - 2\omega_\circ).$$

Соответствующие выражения можно записать и для средних значений этих операторов. Отсюда видно, что взаимодействие дает вклад только в резонансные моды – происходит так называемое макроскопическое заполнение резонансной моды бозонного поля. При этом мы имеем соотношение

$$\langle a_k^+ a_k\rangle = -\frac{1}{2}\langle S^z\rangle,$$

и мы можем говорить об акустическом сверхизлучении в кристалле с парамагнитной примесью, возникающем за счет спин-фононного взаимодействия. Условия для генерации сверхизлучательного импульса могут быть созданы быстрым изменением направления магнитного поля на противоположное. В случае макроскопического заполнения фононной моды может реализовываться нестабильность кристаллической структуры (структурный фазовый переход), индуцируемая акустическим сверхизлучением.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н.Н.(мл.), Шумовский А.С. Сверхизлучение. Дубна: ОИЯИ, 1987.
2. Андреев А.В., Емельянов В.И., Ильинский Ю.А. Кооперативные явления в оптике. М.: Наука, 1988.
3. Larson T.R., Silsbee R.H. - Phys.Rev., 1972, B6, 3927.
4. Вагапова Ф.С., Сабурова Р.В. - Опт. и спектроскопия, 1977, 43, 474.
5. Вагапова Ф.С., Ершов Г.М. - ФТТ, 1977, 21, 392.
6. Копвиллем У.Х., Сабурова Р.В. Параэлектрический резонанс. М.: Наука, 1982.
7. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Наука, 1973.
8. Буйнов Н.С., Нагибаров В.Р., Соловаров Н.К. - Доклады АН БССР, 1977, 21, 13.
9. Боголюбов Н.Н. - ЭЧАЯ, 1978, 9, 501.
10. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н.(мл.). - ЭЧАЯ, 1980, 11, 245.
11. Давыдов А.С. Теория твердого тела. М.: Наука, 1976.
12. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1973.
13. Боголюбов Н.Н.(мл.), Лягушин С.Ф. Сообщ. ОИЯИ Р17-88 436, Дубна, 1988.
14. Bogolubov N.N. Jr., Shumovsky A.S., Kudryavtsev I.K., Lyagushin S.F. - Physica A, 1988, 151, 293.
15. Боголюбов Н.Н.(мл), Садовников Б.И., Шумовский А.С. Математические методы статистической механики модельных систем. М.: Наука, 1989.
16. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 апреля 1992 года.

Кудрявцев И.К., Лягушин С.Ф., Шумовский А.С.

Р17-92-150

Сверхизлучательная генерация в кристалле с парамагнитными примесями

Для модели кристалла с парамагнитными примесными центрами со спином S=1 в приближении Борна - Маркова получена иерархическая система уравнений для средних от операторов спиновой подсистемы. При расщеплении тройных корреляторов получена система для $<S^z>$, $<(S^z)^2>$ и $<S^+S^->$, аналогичная соответствующим системам в теории сверхизлучения. Указано на возможность существования структурного фазового перехода, индуцированного акустическим сверхизлучением.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1992

Перевод авторов

Kudryavtsev I.K., Lyagushin S.F., Shumovsky A.S.

P17-92-150

Generation of Superradiation in a Crystal with Paramagnetic Impurity

The hierarchial system of equations for the averages of the spin subsystem operators is obtained in the Born - Markov approximation for the model of crystal with paramagnetic impurity centres with spin S=1. After decoupling of ternary correlations the system for $<S^z>$, $<(S^z)^2>$ and $<S^+S^->$ is obtained. This system is analogous to the corresponding system in the theory of superradiation. The possibility of structural phase transition, induced by acoustic superradiation, is indicated.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1992