



УДК 539.12

И. Д. ФЕРАНЧУК, ЛИ СУАН ХАЙ (СРВ)

ОПЕРАТОРНЫЙ МЕТОД В ЗАДАЧЕ О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ СИСТЕМЫ ДВУХУРОВНЕВЫХ АТОМОВ С ОДНОМОДОВЫМ КВАНТОВЫМ ПОЛЕМ

Spectrum of a system of two-level atoms interacting with a single-mode electromagnetic field is calculated by means of the Operator Method without the Rotating-Wave Approximation and with arbitrary thickness of medium.

Рассмотрим квантовомеханическую систему со следующим гамильтонианом ($\hbar = c = 1$) [1]:

$$\hat{H} = \epsilon a^+ a + \sum_j \left\{ \frac{\omega_0}{2} \sigma_j^{(3)} - i \frac{g}{2} (\sigma_j^{(+)} - \sigma_j^{(-)}) (a e^{ikr_j} + a^+ e^{-ikr_j}) \right\}, \quad (1)$$

где $\sigma_j^{(3)}$, $\sigma_j^{(\pm)} = \sigma_j^{(1)} \pm i \sigma_j^{(2)}$ – матрицы Паули, определяющие состояние двухуровневого атома, расположенного в точке r_j и с интервалом ω_0 между энергетическими уровнями; a и a^+ – соответственно операторы уничтожения и рождения фотона с импульсом k и частотой ϵ ; взаимодействие между атомами и полем определяется параметром

$$g = d \sqrt{\frac{2\pi\epsilon}{\Omega}}, \quad (2)$$

причем d – дипольный момент резонансного перехода; Ω – нормировочный объем системы.

Несмотря на то, что после классической работы Дике [2] гамильтониан (1) широко используется для моделирования различных физических процессов в резонансных и инвертированных средах (см., напр., [1, 3] и цитированную литературу), расчеты его собственных функций и собственных значений, а также анализ динамики системы проводятся либо в приближении вращающейся волны (ПВВ), либо в рамках модели Дике (МД). Как известно, каждое из этих приближений имеет ограниченную область применимости: МД можно использовать только для систем с характерным размером a , меньшим длины волны излучения ($ka \ll 1$) [1], а ПВВ, эквивалентное, по существу, резонансному приближению при вычислении квазиэнергий двухуровневого атома в монохроматическом поле [4], становится неприменимым при достаточно большой амплитуде когерентного электромагнитного поля, возникающего в среде при высокой плотности атомов.

Для различных физических приложений представляет большой интерес выход за рамки указанных приближений при исследовании системы с гамильтонианом (1). В настоящей работе мы используем для этой цели операторный метод (ОМ) приближенного решения уравнения Шредингера, впервые введенный в работе [5]. Как было показано на примерах различных физических систем, и в частности для атома во внешнем поле [6] или при описании взаимодействия частицы с квантовым полем [7], уже нулевое приближение ОМ дает такую аппроксимацию для всего спектра решений уравнения Шредингера, которая

остается равномерно пригодной во всем диапазоне изменения параметров гамильтониана, а последующие приближения достаточно быстро сходятся к точным решениям. Как будет показано ниже, аналогичные результаты получаются на основе ОМ и для системы (1).

Итак, рассмотрим уравнение Шредингера

$$\hat{H}|\Psi_\nu\rangle = E_\nu|\Psi_\nu\rangle, \quad (3)$$

где \hat{H} – гамильтониан (1), а $|\Psi_\nu\rangle$ – собственный вектор, соответствующий энергии E_ν , которая зависит от набора квантовых чисел ν .

В соответствии с [5–7] схема применения ОМ включает следующие операции: 1) использование канонического преобразования, которое позволяет ввести в гамильтониан совокупность произвольных параметров, с помощью которых можно описать изменения, происходящие в невозмущенной системе при учете взаимодействия; 2) определенный метод выделения гамильтониана нулевого приближения \hat{H}_0 с известным спектром собственных значений из оператора \hat{H} и выбор оптимальных значений параметров; 3) использование итерационной схемы ОМ для вычисления последующих приближений и получения точного решения.

Из физических представлений о свойствах рассматриваемой системы [1–3] следует, что взаимодействие атомов с электромагнитным полем приводит к переходу каждого из них в некоторую суперпозицию основного и возбужденного состояний, зависящую от координаты атома, что можно описать с помощью соответствующего вращения матриц $\sigma_j^{(\alpha)}$.

С другой стороны, излучение атомов приводит к возникновению отличного от нуля среднего значения операторов поля, что соответствует выделению в них классической компоненты [7]. В результате приходим к следующему каноническому преобразованию;

$$\sigma_j^{(\alpha)} = \gamma_j^{(\alpha)} \bar{\sigma}_j^{(3)} + A_j^{(\alpha)} \bar{\sigma}_j^{(+)} + A_j^{(\alpha)*} \bar{\sigma}_j^{(-)}; \quad \alpha = +, -, 3; \quad (4)$$

$$a = u + b; \quad a^+ = u^* + b^+; \quad [b, b^+] = 1, \quad (5)$$

причем u является c -числом, а векторы γ_j и A_j определяют преобразование спиновых матриц j -го атома к такому представлению, где осью квантования является вектор γ_j [8]:

$$\gamma_j^{(\alpha)} = \gamma_j^{(\alpha)*}; \quad \gamma_j^{(3)2} + \gamma^{(+)}\gamma^{(-)} = 1, \quad (6)$$

$$A_j^{(+)} = \mp e^{i\varphi_j} \frac{(1 + \gamma_j^{(3)})}{2}; \quad A_j^{(3)} = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \gamma_j^{(3)2}}; \quad \text{tg} \varphi_j = \frac{\gamma_j^{(2)}}{\gamma_j^{(1)}}.$$

Значения величин u и $\gamma_j^{(\alpha)}$ остаются пока произвольными, а гамильтониан \hat{H} в новом представлении принимает следующий вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V};$$

$$\hat{H}_0 = \epsilon (|u|^2 + b^+b) + \sum_j \left[\frac{\omega_0}{2} \gamma_j^{(3)} - i \frac{g}{2} (\gamma_j^{(+)} - \gamma_j^{(-)}) \times \right. \\ \left. \times (u e^{ikr_j} + u^* e^{-ikr_j}) \right] \bar{\sigma}_j^{(3)}; \quad (7)$$

$$\hat{V} = \sum_j \left\{ \frac{\omega_0}{2} (A_j^{(3)} \bar{\sigma}_j^{(+)} + A_j^{(3)*} \bar{\sigma}_j^{(-)}) - i \frac{g}{2} [(A_j^{(+)} + A_j^{(-)}) \bar{\sigma}_j^{(+)} - \right. \\ \left. - (A_j^{(+)*} + A_j^{(-)*}) \bar{\sigma}_j^{(-)}] [(u+b)e^{ikr_j} + (u^*+b^+)e^{-ikr_j}] - \right. \\ \left. - i \frac{g}{2} (\gamma_j^{(+)} - \gamma_j^{(-)}) (b e^{ikr_j} + b^+ e^{-ikr_j}) \bar{\sigma}_j^{(3)} \right\} + \epsilon (u^*b + ub^+). \quad (8)$$

В соответствии с [5–7], гамильтониан нулевого приближения ОМ \hat{H}_0 выделяется таким условием, чтобы после проведения канонического преобразования (4, 5) он коммутировал с операторами числа любых возбуждений в рассматриваемой системе. Тогда его собственные векторы и собственные значения очевидны:

$$|\Psi_e^{(0)}\rangle = |\{j^+\}; \{j^-\}, n\rangle \equiv \prod_{j^+} X_j^{(+)} \prod_{j^-} X_j^{(-)} |n\rangle; \quad (9)$$

$$E_e^{(0)} \equiv E_{\{j^+\} \{j^-\}}^{(0)} = \epsilon(n + |n|^2) + \sum_{\{j^+\}} \epsilon_j - \sum_{\{j^-\}} \epsilon_j,$$

где символ $\{j^{\pm}\}$ определяет совокупность координат атомов, находящихся соответственно в возбужденном $X_j^{(+)}$ или основном $X_j^{(-)}$ состояниях при произвольном пока направлении оси квантования, т. е.

$$\tilde{\sigma}_j^{(3)} X_j^{(\pm)} = \pm X_j^{(\pm)},$$

причем вектор $|n\rangle$ – собственный для оператора $b^+b = \hat{n}$, $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$; $b|0\rangle = 0$, а величины ϵ_j определяются формулой

$$\epsilon_j = \frac{\omega_0}{2} \gamma_j^{(3)} - i \frac{g}{2} (\gamma_j^{(+)} - \gamma_j^{(-)}) (ue^{ikr_j} + u^*e^{-ikr_j}).$$

Искусственно введенные параметры u и γ фактически определяют выбор представления для базисного набора волновых функций системы, поэтому для любого набора квантовых чисел

$$\frac{\partial E_e}{\partial \gamma_j^{(\pm)}} = \frac{\partial E_e}{\partial u} = \frac{\partial E_e}{\partial u^*} = 0.$$

Следовательно, величины $E_e^{(0)}$ (γ_j , u) будут наилучшим приближением для E_e при оптимальном выборе параметров γ_j и u , определяемом уравнениями

$$\frac{\partial E_e^{(0)}}{\partial \gamma_j^{(\pm)}} = \frac{\partial E_e^{(0)}}{\partial u} = \frac{\partial E_e^{(0)}}{\partial u^*} = 0, \quad (10)$$

которые и соответствуют нулевому приближению ОМ [5–7].

Уравнения (10) с учетом связи (6) между величинами $\gamma_j^{(\pm)}$ приводят к следующим результатам:

$$\gamma_j^{(\pm)} = \pm i \frac{2g}{\omega_0} \gamma_j^{(3)} (ue^{ikr_j} + u^*e^{-ikr_j}); \quad (11)$$

$$u = i \frac{g}{2\epsilon} \sum_j (\gamma_j^{(+)} - \gamma_j^{(-)}) e^{-ikr_j};$$

$$E_{(N_+, n)}^{(0)} = \frac{1}{2} \omega_0 \sum_j \gamma_j^{(3)} + \epsilon(-|n|^2 + n),$$

где введено обозначение

$$\sum_j' = \sum_{j=1}^{N_+} - \sum_{j=N_++1}^{N_0},$$

причем N_0 – полное число атомов, из которых N_+ находятся в возбужденном состоянии.

Пусть ρ_- и ρ_+ – плотности атомов, находящихся соответственно в основном и возбужденном состояниях, а $\rho = \rho_+ + \rho_-$ – полная плотность атомов. Предполагая выполненным условие

$$\rho \pm \lambda^3 \gg 1, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}, \quad (12)$$

можно записать:

$$\sum_j' = (\rho_+ - \rho_-) \int_{\Omega} dr = (2\rho_+ - \rho) \int_{\Omega} dr.$$

Дальнейшие вычисления зависят от формы и геометрических размеров исследуемой системы. Поэтому для определенности примем, что нормировочный объем имеет форму цилиндра с площадью поперечного

сечения S и длиной $L = \lambda \cdot \Delta$ (λ – длина волны излучения, Δ – безразмерная величина), причем ось цилиндра совпадает с осью Z , направленной вдоль волнового вектора k . Тогда с помощью уравнений (6) и (11) находим:

$$\begin{aligned} \gamma_j^{(3)} \equiv \gamma^{(3)}(z) &= [1 + \xi^2 u_0^2 \cos^2(kz + \varphi)]^{-1/2}; \\ u_0 &= -\frac{1}{4} \frac{\omega_0}{\epsilon} \xi^2 u_0 \frac{(2\rho + -\rho)}{\pi \Delta} J, \end{aligned} \quad (13)$$

где введены следующие обозначения:

$$u = u_0 e^{i\varphi}; \quad \xi = 4g/\omega_0;$$

$$\varphi = \pi \left(\frac{1}{2} - \Delta \right) \quad l \in \mathcal{N};$$

$$J = \frac{1}{\xi u_0} \left[\frac{1}{\mu} E(\Pi \Delta, \mu) - \frac{\mu}{\xi^2 u_0^2} F(\Pi \Delta, \mu) \right]; \quad (14)$$

$$\mu = \left[1 + \frac{1}{\xi^2 u_0^2} \right]^{-1/2},$$

и функции $F(\psi, k)$ и $E(\psi, k)$ являются неполными эллиптическими интегралами 1-го и 2-го рода соответственно. Как видно из (13), без нарушения общности можно считать $\varphi = 0$.

Энергия системы определяется формулой

$$\begin{aligned} E^{(0)}(\rho_+, n) &= \frac{1}{2} \omega_0 \frac{(2\rho + -\rho)}{\Pi \Delta} \Omega \frac{\mu}{\xi u_0} F(\Pi \Delta, \mu) + \epsilon n - \\ &- \frac{1}{16} \frac{\omega_0^2}{\epsilon} \xi^4 u_0^2 \left[\frac{(2\rho + -\rho) \Omega}{\Pi \Delta} \right]^2 J^2. \end{aligned} \quad (15)$$

Обсудим теперь качественные особенности рассматриваемой системы, которые вытекают из анализа уравнений (13)–(15), определяющих ее стационарные состояния. Прежде всего заметим, что эти уравнения имеют решение $u = 0$, $\gamma^{(3)} = 1$, которое приводит к энергетическим уровням, совпадающим с уровнями системы без взаимодействия,

$$E_H^{(0)} = \frac{\omega_0}{2} (2\rho + -\rho) \Omega + \epsilon n. \quad (16)$$

Назовем такое состояние системы нормальной фазой (Н-фазой).

Однако наряду с указанной фазой системы возможно и такое ее состояние, при котором возникает отличная от нуля классическая компонента электромагнитного поля, обусловленная коллективным взаимодействием атомов, в результате которого они находятся в некоторой взаимно согласованной суперпозиции состояний. Такая коллективная фаза системы (К-фаза) возникает только при таких параметрах, когда существует отличное от нуля решение следующего уравнения:

$$-\frac{1}{4} \frac{\omega_0}{\epsilon} \xi^2 \frac{(2\rho + -\rho)}{\Pi \Delta} J = 1. \quad (17)$$

При этом можно доказать, что если К-фаза возникает, то она является энергетически более выгодной, чем Н-фаза, т. е.

$$E_K^{(0)}(\rho_+, n) < E_H^{(0)}(\rho_+, n). \quad (18)$$

Следует отметить, что при рассмотрении стационарного уравнения Шредингера нельзя еще говорить о фазовом переходе в системе, который требует анализа термодинамического равновесия. Однако можно утверждать, что при таких параметрах, когда уравнение (17) не имеет решения, энергетические уровни свободной системы (16) устойчивы по отношению к учету взаимодействия, которое в следующих порядках приближения приведет к относительно небольшому сдвигу уровней без существенного изменения их структуры. В то же время при $u_0 \neq 0$ возникает качественная

перестройка уровней, структура которых, в свою очередь, является устойчивой при учете последующих приближений ОМ. Условия указанного перехода можно приближенно найти, если использовать следующие неравенства для эллиптических функций [9]:

$$(1 - k^2)^{1/2} \psi \leq E(\psi, k) \leq \psi; \quad \frac{\psi}{(1 - k^2)^{1/2}} \geq F(\psi, k) \geq \psi.$$

Учитывая (14) и (17), получаем следующее условие на параметры системы:

$$-\frac{1}{4} \frac{\omega_0}{c} \xi^2 \Omega (2\rho_+ - \rho) \geq 1. \quad (19)$$

Можно показать, что нулевое приближение ОМ, определяемое формулами (13)–(15), дает возможность воспроизвести результаты, полученные в рамках модели Дике (случай $\Delta \ll 1$) либо с помощью приближения вращающейся волны ($\xi^2 \Omega \rho \ll 1$). О равномерной пригодности полученных результатов свидетельствует также то, что поправка второго порядка по оператору \hat{V} в гамильтониане (7) (поправка первого порядка ОМ по определению равна нулю) оказывается малой по сравнению с $E_0^{(0)}$ во всем диапазоне изменения параметров системы. Более детально указанные результаты, а также анализ термодинамической устойчивости системы будут рассмотрены в последующей работе.

Список литературы

1. Андреев А. В., Емельянов В. И., Ильинская Ю. А. Кооперативные явления в оптике. М., 1988.
2. Dicke R. H. // Phys. Rev. A. 1954. V. 93. № 1. P. 99.
3. Альперин М. М., Клубис Я. Д., Хижняк А. И. Введение в физику двухуровневых систем. Киев, 1987.
4. Зельдович Я. Б. // Успехи физических наук. 1973. Т. 110. № 1. С. 139.
5. Feinshuk I. D., Komarov L. I. // Phys. Lett. A. 1982. V. 88. № 5. P. 212.
6. Feinshuk I. D., Komarov L. I., Neshpor I. V. // Journ. Phys. A. 1987. V. 20. № 12. P. 3849.
7. Feinshuk I. D., Fisher S. I., Komarov L. I. // Journ. Phys. C. 1984. V. 17. № 24. P. 4309.
8. Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма. М., 1975.
9. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., 1971.

Поступила в редакцию 14.12.92.

УДК 536

Н. И. СИРОТА

ТРЕТИЙ ЗАКОН ТЕРМОДИНАМИКИ. II

From the analysis of the main statements of the third law of thermodynamics the magnetic and electrocaloric effects, temperature coefficients of the surface energy, energy fluctuations and mean square atomic displacements, thermal conductivity of solids, entropy of solution mixing, elasticities of substance vapours, solutions structure and solubility limits of the compounds near the absolute zero temperature are considered. The reasons for the systems deviations from the third law of thermodynamics near the absolute zero of temperature are analyzed.

В первой части настоящей статьи [1] критически рассмотрены основные положения [2] и некоторые следствия третьего закона термодинамики. В частности, показано, что при $T \rightarrow 0$ детерминант термодинамической устойчивости [3] $D_y \rightarrow \infty$, а все термические коэффициенты обобщенных координат и сил $(\frac{\partial X_i}{\partial T})_{X_j} \rightarrow 0$.

Продолжим рассмотрение следствий третьего закона термодинамики. Направимся линии двухфазного равновесия на фазовой диаграмме X, T однокомпонентного вещества вблизи абсолютного нуля. Из треть-