Краткие сообщения по физике № 7 июль 1971

КОГЕРЕНТНЫЕ ЭФФЕКТЫ В СИСТЕМЕ ДВУХУРОВНЕВЫХ МОЛЕКУЛ

Т. М. Махвиладзе, Л. А. Шелепин

1. Здесь обсуждаются различные эффекты когерентности, характеризующие коллективные свойства системы N одинаковых квантовых объектов с двумя энергетическими уровнями (для определенности будем говорить о молекулах). Возможность подобных эффектов впервые была указана в известной работе Дике /1/, который рассматривал поведение системы при спонтанном излучении. Согласно /1/ в качестве стационарных состояний системы можно выбрать собственные состояния оператора квадрата квазиспина R^2, коммутирующего с гамильтонианом $H = H_0 + \varepsilon R_3$ (ε - расстояние между уровнями):

$$R^2 \Psi_{R,M} = R(R + 1)\Psi_{R,M}, \qquad R_3\Psi_{R,M} = M\Psi_{R,M}, \tag{1}$$

где $M = (N_1 - N_2)/2$, то-есть полуразности чисел заполнения возбужденного и основного уровня. Интенсивность спонтанного излучения I определяется матричными элементами операторов взаимодействия молекул с полем излучения

$$V = \mu\left[R_-b^+ - R_+b\right],$$

где b, b^+ - операторы рождения и уничтожения резонансных фотонов, μ пропорционально дипольному моменту молекулы. Отсюда

$$I = I_0(R + M)(R - M + 1), \tag{2}$$

где I_0 – интенсивность спонтанного излучения изолированной молекулы. При максимальном R, равном N/2, и M = 0, I пропорционально квадрату числа молекул (сверхизлучающие состояния). При электромагнитных переходах оператор R^2 является интегралом движения.

2. В этом разделе будет показано, что тензорные свойства бозе-операторов можно использовать для рассмотрения модели Дике в представлении вторичного квантования.

Появление квантового числа R связано с введением фиктивного трехмерного пространства, дополнительно характеризующего свойства системы. Таким же образом кооперационная характеристика должна возникать при описании системы методом вторичного квантования, который дает возможность рассматривать когерентные эффекты в процессах, не сохраняющих число частиц в системе.

Молекулы, находящиеся на верхнем и нижнем уровнях, будем описывать двумя парами бозонных операторов рождения и уничтожения c_i, $c_i^+ (i = 1,2)$. Введем операторы

$$R_+ = c_1^+ c_2, \quad R_- = c_2^+ c_1, \quad R_3 = (c_1^+ c_1 - c_2^+ c_2)/2. \qquad (3)$$

Легко проверить, что эти операторы являются генераторами группы вращений в абстрактном 3-мерном пространстве

$$[R_+, R_-] = 2R_3, \quad [R_3, R_+] = R_+, \quad [R_-, R_3] = R_-.$$

Собственные значения R_3 равны полуразности заселенностей уровней; R пробегает через единицу значения от R_3 до N/2.

Интересно отметить, что обычно используемым функциям чисел заполнения $|N_1, N_2\rangle$ должно быть приписано максимальное значение R, равное N/2. Собственные функции операторов R^2, R_3 будем обозначать $|N_1, N_2, R, R_3\rangle$.

Легко показать, что операторы c_2^+, c_1^+ при коммутации с квазиспином ведут себя как составляющие тензор-оператора ранга 1/2 с проекциями +1/2 и -1/2, соответственно. Альтернативный тензор-оператор составляется так:

$$[c]^{1/2}_{-1/2} = c_1, \quad [c]^{1/2}_{1/2} = - c_2.$$

Это позволяет проводить все вычисления, используя обычные правила тензорной алгебры. Так, например, применяя теорему Вигнера-Эккарта, получаем матричные элементы тензор-оператора квазиспина (ранга единица)

$$\langle N_1 - 1, N_2 + 1, R, R_3 - 1|R_-|N_1, N_2, R, R_3\rangle =$$
$$= \sqrt{(R + R_3)(R - R_3 + 1)}, \tag{4}$$

$$\langle N_1 + 1, N_2 - 1, R, R_3 + 1|R_+|N_1, N_2, R, R_3\rangle =$$
$$= \sqrt{(R - R_3)(R + R_3 + 1)}. \tag{5}$$

Формулы (4), (5) соответствуют основным результатам работы /1/. Вычисление матричных элементов удобнее, однако, проводить, пользуясь представлением Баргманна /2/. Сопоставим состоянию $|N_1, N_2, R, R_3\rangle$ функцию комплексных переменных z_1, z_2, преобразующуюся по представлению $D(R)$ группы вращений

$$v^R_{R_3}(z_1, z_2) = z_1^{R+R_3} z_2^{R-R_3} \Big/ \left[(R + R_3)!(R - R_3)!\right]^{1/2}. \tag{6}$$

На пространстве целых функций от z_1, z_2 определено скалярное произведение (f, f' - произвольные функции этого пространства)

$$(f, f') = \int f^*(z_1, z_2)f'(z_1,z_2)d\mu_2(z_1, z_2), \tag{7}$$

где

$$d\mu_2(z_1,z_2) = \pi^{-2}\exp\left(-|z_1|^2 - |z_2|^2\right) \prod_{k=1}^{2} dx_k dy_k, \; z_k = x_k + y_k.$$

Операторам c_i, c_i^+ сопоставляются дифференциальные операторы z_i, d_i (дифференцирование), $[d_k, z_l] = \delta_{kl}$. Операторам R_+, R_-, R_3 соответствуют баргмановские операторы $z_1 d_2$, $z_2 d_1$, $(z_1 d_1 - z_2 d_2)/2$. Легко показать, что

$$\left(z_1^{h_1} z_2^{h_2},\ z_1^{h_1'} z_2^{h_2'} \right) = h_1! h_2!, \tag{8}$$

если $h_1 = h_1'$, $h_2 = h_2'$, и нулю – во всех остальных случаях.

Матричные элементы операторов любого ранга вычисляются теперь тривиальным образом. Так, например,

$$\begin{gathered}
C_1 |N_1, N_2, R, R_3\rangle = \\
= \sqrt{R + R_3}\, |N_1 - 1, N_2, R - 1/2, R_3 - 1/2\rangle, \\
C_1^+ |N_1, N_2, R, R_3\rangle = \\
= \sqrt{R + R_3 + 1}\, |N_1 + 1, N_2, R + 1/2, R_3 + 1/2\rangle, \\
C_2 |N_1, N_2, R, R_3\rangle = \\
= \sqrt{R - R_3}\, |N_1, N_2 - 1, R - 1/2, R_3 + 1/2\rangle, \\
C_2^+ |N_1, N_2, R, R_3\rangle = \\
= \sqrt{R - R_3 + 1}\, |N_1, N_2 + 1, R + 1/2, R_3 - 1/2\rangle.
\end{gathered} \tag{9}$$

Преимущества использования формализма Баргмана покажем еще на примере вычисления вероятности испускания системой, находящейся в состоянии $|N_1, N_2, R, R_3\rangle$, двух фотонов (второй порядок теории возмущений). Функция (6) должна перейти в функцию $v^R_{R_3-2}$. Этот переход осуществляется, очевидно, оператором $(z_2 d_1)^2$. Используя (8), сразу же получаем

$$I \sim (R + R_3)(R - R_3 + 1)(R + R_3 - 1)(R - R_3 + 2).$$

В заключение заметим, что описание модели Дике схемой вторичного квантования, по-видимому, доказывает, что сделанное Дике предположение о разреженности системы (поэтому он не учитывает симметрию собственных функций системы) не является обязательным.

3. Развитый формализм позволяет рассмотреть когерентные эффекты в случае, когда система подвергается возмущению, несохраняющему число частиц (оператор R^2 при этом уже не является интегралом движения). Примерами таких возмущений являются уход частиц из системы вследствие какого-либо элементарного акта (химическая реакция с посторонними молекулами, ионизация), вследствие их диффундирования из наблюдаемого объема, газодинамических процессов и т.п. или, наоборот, возникновение молекул в том или ином процессе*). В общем виде гамильтониан взаимодействия имеет вид

$$V = \sum_{i=1,2} (k_i c_i + k_i' c_i^+),$$

где k_i, k_i' - коэффициенты, определяющие динамику того или иного процесса.

Скорость соответствующего процесса зависит от числа когерентности R в соответствии с формулами (9). Так, например, вероятность ухода возбужденных молекул в химическую реакцию

$$w = |\langle N_1 - 1,\ N_2,\ R - 1/2,\ R_3 - 1/2 | V | N_1,\ N_2,\ R,\ R_3 \rangle|^2 \sim$$
$$\sim (R + R_3), \qquad (10)$$

и только в случае максимального R пропорциональна N_1, как это обычно имеет место. При $R = N/2$, $R_3 = 0$, w оказывается пропорциональной полному числу частиц в системе.

*) Здесь, разумеется, сделано предположение о сравнимости характерных времен этих процессов с временами радиационных переходов.

Учет соотношений типа (10) может оказаться весьма существенным при анализе динамики излучательных процессов в системах с переменным числом частиц.

4. Используя проведенное в /3,4/ обобщение результатов Дике, предыдущее рассмотрение можно распространить на случай многоуровневых молекул.

В /3/ было показано, что состояния системы молекул с n уровнями описываются представлениями $D(P0...0)$ группы SU_n. Например, в случае 3-уровневых молекул степень когерентности определяется двумя квантовыми числами T и P, а формулы для интенсивности излучения имеют вид

$$\begin{aligned} I_{21} &= I_0^{(21)}(T + t)(T - t + 1), \\ I_{31} &= I_0^{(31)}(P - 2T)(T + t + 1), \\ I_{32} &= I_0^{(32)}(P - 2T)(T - t + 1). \end{aligned} \tag{11}$$

Действительно, используя представление Баргманна (формулы (7), (8) легко обобщаются на случай трехмерного комплексного пространства), легко показать, что девять операторов z_1d_2, z_2d_1, $(z_1d_1 - z_2d_2)/2$, z_3d_2, z_2d_3, $(z_3d_3 - z_2d_2)/2$ и т.д. определяют алгебру группы SU_3. Формулы (11) позволяют сразу же построить представления $D(P0)$ группы SU_3

$$v_{P,T,t}(z_1,z_2z_3) = \frac{z_1^{T+t}\, z_2^{T-t}\, z_3^{P-2T}}{[(T + t)!(T - t)!(P - 2T)!]^{1/2}} .$$

Вычисляя теперь матричные элементы оператора $\sum_{i=1}^{3} k_i c_i$, получаем формулы, аналогичные (10), для трехуровневой схемы

$$w_1 = |\langle N_1 - 1,\ N_2,\ N_3,\ P - 1,\ T - 1/2,\ t -$$

$$- 1/2 | V | N_1,\ N_2,\ N_3,\ P,\ T,\ t\rangle|^2 \sim (T + t),$$

$$w_2 = |\langle N_1, N_2 - 1, N_3, P - 1, T - 1/2,$$

$$t + 1/2 | V | N_1, N_2, N_3, P, T, t\rangle|^2 \sim (T - t),$$

$$w_3 = |\langle N_1, N_2, N_3 - 1, P - 1, T, t | V | N_1, N_2, N_3, P, T, t\rangle|^2 \sim$$

$$\sim (P - 2T).$$

Поступила в редакцию
29 марта 1971 г.

Литература

1. R. H. Dicke. Phys. Rev., 93, 99 (1954).
2. V. Bargmann. Rev. Mod. Phys., 35, 916 (1963).
3. Л. А. Шелепин. ЖЭТФ, 54, 1463 (1968).
4. Э. Ш. Теплицкий. Теор. и матем. физика, 2, 399 (1970).