

ДИНАМІЧНИЙ ТА МАКРОСКОПІЧНИЙ ОПИСИ ГАЗУ ВЗАЄМОДІЮЧИХ АТОМІВ У СИЛЬНОМУ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ ПОБЛИЗУ РЕЗОНАНСУ

А.С. СІЖУК,¹ С.М. ЄЖОВ²

¹Фізичний департамент, Техас А&М Університет

(Станція Коледж, Техас 77843, США; e-mail: capnabiss@mail.univ.kiev.ua)

²Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, фізичний факультет

(Просп. Академіка Глушкова, 2, Київ 03022)

УДК 533.9
© 2012

Робота присвячена побудові мікроскопічної та макроскопічної теорій системи N взаємодіючих дворівневих атомів у сильному та слабкому електромагнітних полях. Побудовані мікроскопічні кінетичні рівняння для матричних елементів густини станів атомів та атомного руху N -атомної системи, які враховують взаємодію між атомами та атомів із полем. Відповідна макроскопічна кінетика побудована для одно- та двочастинкової функцій розподілів матриці густини атомних станів. Самоузгоджена система макроскопічних одночастинкових рівнянь для усереднених елементів матриці густини атомних станів разом із рівняннями Максвелла дозволяє описувати випромінювальні та поглинальні властивості системи і пояснити залежність оптичних властивостей від густини частинок у термінах далекої диполь-дипольної взаємодії між атомами.

1. Вступ

У цій роботі запропоновано мікроскопічну та макроскопічну теорії системи N взаємодіючих дворівневих атомів у сильному та слабкому електромагнітних полях із частотами, що близькі до резонансних. Теоретичне дослідження таких систем з далекодією вимагає застосування громіздких математичних інструментів, при цьому для опису можуть бути вибрані різні моделі. Щоб побудувати макроскопічну модель, ми виходимо із точних мікроскопічних еволюційних рівнянь для N -частинкової системи, яка взаємодіє з полем поблизу резонансу.

Експериментально була підтверджена важливість врахування багаточастинкових ефектів для оптичних характеристик щільних атомних газів. Наприклад, у

роботах [1] і [2] диполь-дипольне спектральне розширення резонансної лінії було досліджено в щільній парі рубідію у присутності далеко відстроеного променя накачки. Експериментальні докази впливу атом-атомної взаємодії на спектральні характеристики можуть бути знайдені у [3] та більш ранніх дослідженнях (наприклад, [4–6]). Теоретичний опис ефектів, що включає спектральне звуження та розширення, радіаційну пастку, спричинену далекодією і короткодією (зіткнення “частинок з твердим кором”) атом-атом взаємодій, починає свою історію приблизно з другої половини двадцятого сторіччя [7–14], досягаючи сучасного стану в [15–17]. У цьому дослідженні ми приділяємо більше уваги впливу далекодії на форму спектральних ліній, який ще не був пояснений.

Отримати кінетичні рівняння для матриці густини можна різними методами, але більшість з них використовують наближення невзаємодіючих атомів [18, 19–26], або наближення застиглих положень [27–31]. В роботі [32] розглянуті роботи, в яких на припущенні про бінарні зіткнення описуються специфічні контури спектральних ліній. У цій роботі розглянуті спрощені рівняння еволюції для одночастинкової матриці густини станів, що описують атомні переходи за допомогою використання феноменологічних членів.

Інша техніка, що ґрунтується на використанні функцій Гріна для нерівноважних систем, дозволяє при певних обмеженнях, що проаналізовані у [17], отримати кінетичне рівняння для матриці густини дворівневих станів частинок. Такі еволюційні рівняння для відповідної функції Гріна можуть бути використані для побудови теорії зіткнень за певних спро-

шуючих умов на кореляції у “бінарному” наближенні (див. [14]). Така апроксимація, що ґрунтується на адекватному формулюванні кореляційних функцій [7, 9, 10], є альтернативою формалізму матриці густини. Коректне введення інтеграла подвійних зіткнень для використання у кінетичних рівняннях, що дозволяє описувати внутрішні переходи в атомах під час “короткодії”, є центральним моментом у теорії зіткнень [13, 14].

У наведеній нами макроскопічній теорії члени, що відповідають за атомні переходи під час “короткодії”, є спрощеними у сенсі релаксаційного наближення. Так як і у теорії зіткнень, нехтуємо просторовими кореляціями між будь-якими двома частинками після інтервалу часу, що набагато більший за час зіткнення (короткодії). Побудована в цій роботі система мікроскопічних еволюційних рівнянь дозволяє отримати довільне наближення у сенсі багаточастинкових кореляцій, коли враховується далекодія. Як приклад, тут розглянуто отримання макроскопічних еволюційних рівнянь, що містять двочастинкові елементи матриці густини. У цій статті обмежуємося детальним розглядом випадку відсутності двочастинкових просторових кореляцій.

У порівнянні з представленою теорією у таких роботах, як [11, 12], було розроблено підхід для рівноважних статистичних систем, в якому використовується метод функцій Гріна при одночасному нехтуванні кінетичними процесами у середовищі взаємодіючих атомів.

В роботі [33] було використано модельний гамільтоніан з квантованими оптичним накачуючим полем і пробним електромагнітним полем та квантованим атомним рухом, що дозволило врахувати колективні атомні ефекти віддачі (так звані “CARL”-лазери) за рахунок атомної диполь-дипольної взаємодії. Але для аналізу можливості виникнення явища CARL у “щільній” атомній парі використовувалась досить спрощена напівкласична система рівнянь для кожного атома. Звичайно, величезна кількість таких рівнянь, що описують багаточастинкову диполь-дипольну взаємодію, не може бути включена у послідовний аналітичний опис. Тому макроскопічна теорія не була розроблена у роботі [33]. Щоб описати систему, її автори використали симуляцію поведінки системи за певних умов. Так було знайдено, що далекодійна міжатомна взаємодія може відігравати “негативну роль” у процесі генерації лазерного променя. Останнє було аргументоване некогерентними характеристиками колективного атомного

руху з віддачею при поглинанні або випромінюванні.

Ми вважаємо, що такі результати можуть бути використані для достатньо “холодних” газів. Крім того, міжатомна взаємодія може діяти по-різному на оптичні властивості. Наприклад, присутність диполь-дипольної взаємодії може пригнічувати або сприяти генерації у достатньо “нагрітих” газах (парах), і ставати причиною впорядкованого розподілу популяції та поляризації. У роботі запропоновано також додатну для отримання аналітичних результатів макроскопічну теорію системи.

У роботі [34] нелінійна динаміка відкритої квантової системи була розглянута для довільної кількості дворівневих атомів, що взаємодіють із класичним поліхроматичним полем і однією квантованою модою цього поля. При цьому були знехтувані зіткнення між атомами і диполь-дипольна взаємодія. Більш глибокий аналіз такої ж системи з урахуванням неадіабатичних переходів запропонований у [35]. Подібний аналітичний метод, процесами на узагальненій моделі Джейнса-Камінгса (Jaynes-Cummings model), описаний у [36]. У цій роботі досліджувались деякі характеристики світла у двомодовому резонаторі з можливістю резонансних двофотонних переходів для невзаємодіючих ферміонів, але без урахування дисипативних процесів у системі.

У цій роботі ми вивчаємо ансамбль із N -атомів, беручи до уваги можливість двофотонних збуджень або розпадів у парах атомів, що взаємодіють за допомогою диполь-дипольного зв'язку у режимі сильного накачуючого поля. Для порівняння, попередня теоретична робота [37] описує еволюцію двох диполь-дипольних взаємодіючих атомів у вакуумі, коли початково збуджений тільки один атом. У роботі [31] описано два дворівневих атоми, що незалежно взаємодіють із локальним термальним чи “стиснутим” (squeezed) резервуарами, коли враховується можливість початкового одночасного збудження цих атомів, але нехтується диполь-дипольною взаємодією.

Роботи [29, 30] наслідують наближення [27, 28], додаючи до розгляду ще один стан системи, що дозволяє описувати одночасно збуджені атоми. У цій статті автори також вивчають можливі двофотонні переходи, що відрізняється від нашого дослідження тим, що наша модель автоматично включає двофотонні переходи за допомогою утримання відповідних пар операторів на рівні гамільтоніана (чим було знехтувано у [27]: див. відповідні пояснення у наступному розділі).

Як перевага, у порівнянні з роботами [27, 37], які описують достатньо локалізовані атоми, у цій роботі

враховується взаємодія частинок із спільним випромінювальним середовищем за допомогою модельних членів, що описують диполь-дипольний зв'язок між атомами і які ґрунтуються на певних випромінювальних ефектах (радіаційна пастка включно). У цій роботі формулюються еволюційні рівняння для системи у термінах усереднених одно- та двочастинкових елементів матриці густини. Отриманий відповідний макроскопічний опис дозволяє вивчати систему атомів як єдине ціле і безпосередньо розраховувати випромінювальні та поглинальні властивості середовища, враховуючи задану статистичну поведінку.

2. Основні твердження

Запишемо рівняння Шредінгера для стану N атомів:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\Psi\rangle, \quad \hat{\mathcal{H}} = \hat{H} + \hat{\Gamma}, \quad (1)$$

де \hat{H} – частина гамільтоніана, що описує взаємодію атомів з електромагнітним полем та диполь-дипольну взаємодію між атомами:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \hbar\omega_a \sum_{i=1}^N \sigma_i^+ \sigma_i + \hbar\omega_b \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_i^+ - \\ & - \sum_{i=1}^N (\wp_{ab}^i \sigma_i^+ + \wp_{ba}^i \sigma_i) \cdot \mathcal{E}(t, \mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j;i \neq j}^{N,N} \frac{1}{|\mathbf{r}_{ij}|^3} \times \\ & \times \left[(\wp_{ab}^i \sigma_i^+ + \wp_{ba}^i \sigma_i) \cdot (\wp_{ab}^j \sigma_j^+ + \wp_{ba}^j \sigma_j) - \right. \\ & \left. - 3\hat{r}_{ij} \cdot (\wp_{ab}^i \sigma_i^+ + \wp_{ba}^i \sigma_i) \hat{r}_{ij} \cdot (\wp_{ab}^j \sigma_j^+ + \wp_{ba}^j \sigma_j) \right]. \quad (2) \end{aligned}$$

Тут $\sigma_i^+ = |a\rangle\langle b|_i$ та $\sigma_i = |b\rangle\langle a|_i$ – відповідно, оператори народження та знищення для i -го атома, $i = 1, \dots, N$; a позначає збуджений стан, b – основний (“ground”) стан атома; \mathbf{r}_i – координата i -го атома; $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, $\hat{r}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}/|\mathbf{r}_{ij}|$ – одиничний вектор, напрямлений від атома j до атома i . Недіагональні елементи “дипольної” матриці визначаються як $(\wp_{ab}^i)^* = \wp_{ba}^i = \langle b|\hat{\mu}|a\rangle_i$, $i = 1, \dots, N$, де символ $\hat{\mu}$ позначає оператор дипольного моменту даного атома.

Зовнішнє електромагнітне поле $\mathcal{E}(t, \mathbf{r}_i)$ у точці \mathbf{r}_i включає накачуюче поле, пробне поле з достатньо

близькими частотами, і поле, що випромінене “далекими” атомами. Воно може бути представлено у вигляді

$$\mathcal{E}(t, \mathbf{r}_i) = \mathbf{E}(t, \mathbf{r}_i) + \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r}_i). \quad (3)$$

У випадку присутності тільки сильного поля має місце $\mathbf{E}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$. Тут ω – частота накачки, \mathbf{k} – її хвильовий вектор.

У нашому наближенні вектор стану $|\Psi\rangle$ має вигляд

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha=(\alpha_1 \dots \alpha_N)}^{2^N} C_\alpha(t, \mathbf{X}) |\Psi\rangle_\alpha,$$

$$\{|\Psi\rangle_\alpha\} = \{|\alpha_1 \dots \alpha_i \dots \alpha_N\rangle, \alpha_i = (a, b)\}, \quad (4)$$

де $\mathbf{X} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ – координати атомів. Коефіцієнт типу $C_\alpha(t, \mathbf{X})$ відповідає амплітуді ймовірності знайти систему у стані α , тобто з визначеними внутрішніми станами N атомів (у наборі α), та координатами $\mathbf{X} \pm d\mathbf{X}$ у момент часу $t \pm dt$. Таким чином, уведений вектор стану також описує можливі кореляції між усіма N атомами.

Частина уведеного гамільтоніана, що описує диполь-дипольну взаємодію між усіма парами N атомів, враховує такі припущення. По-перше, всі бінарні комбінації атомних операторів σ_i та σ_j^+ такі, як $\sigma_i^+ \sigma_j^+$ і $\sigma_i \sigma_j$ з $i \neq j$, включені тут шляхом, що вказаний вище. Така форма може бути отримана для достатньо коротких часових інтервалів переходом до незалежних від часу операторів поля у гамільтоніані (3) з використанням канонічного перетворення (7) у роботі [27]. По-друге, середня дистанція між двома найближчими атомами менша за шість частин довжини хвилі накачуючого (пробного) поля. Також припустимо, що середня міжатомна відстань набагато більша за ефективний атомний діаметр. Відповідно, у сумі за атомними парами у рівнянні Шредінгера мають бути враховані тільки такі пари частинок, що знаходяться на відстані не більше ніж на довжину хвилі накладеного сильного поля поділену на 2π . У цьому наближенні дипольне випромінювання від більш далеко розташованих атомів включається у визначення зовнішнього електромагнітного поля $\mathcal{E}(t, \mathbf{r}_i)$.

$\hat{\Gamma}$ – частина гамільтоніана $\hat{\mathcal{H}}$, що описує дисипацію енергії поля. У запропонованому наближенні нехтуємо колективними атомними ефектами віддачі (“recoil”) при “перевипромінюванні”, незважаючи на їх можливу присутність в експерименті. Припускаємо,

що часові проміжки для нарощування підсилення мають бути одного порядку із власним часом випромінювання (менше 20 нс, як це було в описаному у роботі [3] експерименті) так, що процеси зіткнень і вплив численних віддач (але, можливо, не стимульованих) відіграють незначну роль. Порівняно важлива роль у визначенні поведінки системи належить далекодії, що вводиться окремо від представленого “демпінг”-оператора $\hat{\Gamma}$ у модельному гамільтоніані. Оператор $\hat{\Gamma}$ відповідає за “демпінг” атомних станів протягом атомних зіткнень, що враховують твердий кор, і взаємодію із зовнішнім випромінювальним середовищем (включаючи вакуумні флюктуації).

З теоретичної точки зору, квантова фотонна віддача, як досліджено у роботі [37], може бути усунута, оскільки такі ефекти вимагають, щоб атомний рух на проміжках часу, порівняльних із власним часом випромінювання, був малим відносно характерної довжини хвилі. В іншому випадку, характерна частота Рабі не може бути розглянута як стала (див. роботи [27, 29, 30]). Внесок у релаксаційні процеси колективних станів, що спричинені атомними зіткненнями із твердим кором і взаємодією із зовнішнім випромінювальним середовищем, враховується за допомогою використання феноменологічних коефіцієнтів розпаду у кінетичних рівняннях (див. нижче). Така модель розпаду гарантує нормалізацію вектора стану системи і дозволяє використання відповідних усереднених одночастинкових станів. У розділі “Доведення” отримуємо властивості феноменологічного “демпінг”-оператора $\hat{\Gamma}$, що усереднений за атомними квантовими станами.

Далі, у цій статті ми не квантуємо поступальний рух атомів, що узгоджується з наближенням достатньо “гарячого” газу (пари), але розглядаємо напівкласичне наближення для теплового руху.

У випадку сильного накачуючого променя, накладаємо такі умови: $\wp_{ab}^i = \wp_{ba}^i = \wp \hat{\wp}$, $i = 1, \dots, N$ (тут $\hat{\wp}$ – одиничний вектор, паралельний напрямку недиагональних дипольних матричних елементів), і припускаємо лінійну поляризацію сильного поля таку, що недиагональні дипольні матричні елементи слідуєть за напрямком поляризації цього зовнішнього накачуючого поля (паралельно чи антипаралельно його амплітуді \mathbf{E}_0). Тоді наступні мікроскопічні еволюційні рівняння можуть бути отримані (див. розділ “Доведення”):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{aa}^i(t, \mathbf{X}) = \lambda_a - \gamma \rho_{aa}^i(t, \mathbf{X}) +$$

$$+ \frac{i}{\hbar} (\rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}) \wp_{ab}^i \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) - \rho_{ab}^i(t, \mathbf{X}) \wp_{ba}^i \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}_i, t)) -$$

$$- \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{i}{\hbar} \sum_{j:j \neq i}^N \left\{ \left[\rho_{ba;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{ba;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \right. \right.$$

$$\left. \left. - \rho_{ab;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \rho_{ab;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) \right] Q_{ab}^{ij}(\mathbf{r}_{ij}) \right\}; \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{bb}^i(t, \mathbf{X}) = \lambda_b - \gamma \rho_{bb}^i(t, \mathbf{X}) -$$

$$- \frac{i}{\hbar} (\rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}) \wp_{ab}^i \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) - \rho_{ab}^i(t, \mathbf{X}) \wp_{ba}^i \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}_i, t)) +$$

$$+ \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{i}{\hbar} \sum_{j:j \neq i}^N \left\{ \left[\rho_{ba;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \rho_{ba;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \rho_{ab;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \rho_{ab;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) \right] Q_{ab}^{ij}(\mathbf{r}_{ij}) \right\}; \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}) = -\gamma_{ba} \rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}) + i\omega_0 \rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}) +$$

$$+ \frac{i}{\hbar} (\rho_{aa}^i(t, \mathbf{X}) \wp_{ba}^i - \rho_{bb}^i(t, \mathbf{X}) \wp_{ab}^i) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}_i, t) -$$

$$- \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{i}{\hbar} \sum_{j:j \neq i}^N \left\{ \left[\rho_{aa;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{aa;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \right. \right.$$

$$\left. \left. - \rho_{bb;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \rho_{bb;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) \right] Q_{ab}^{ij}(\mathbf{r}_{ij}) \right\}; \quad (7)$$

$$m_i \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r}_i(t) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \left\{ -\left(\rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}) \wp_{ba}^i \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \rho_{ab}^i(t, \mathbf{X}) \wp_{ab}^i \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}_i, t) \right) + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j:j \neq i}^N \left\{ \left[\rho_{ba;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{ba;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \rho_{ab;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{ab;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) \right] Q_{ab}^{ij}(\mathbf{r}_{ij}) \right\} \right\}. \quad (8)$$

Тут використано таке позначення:

$$Q_{ab}^{ij}(\mathbf{r}_{ij}) = \left[\varphi_{ab}^i \varphi_{ab}^j - 3(\varphi_{ab}^i \hat{r}_{ij})(\varphi_{ab}^j \hat{r}_{ij}) \right] \frac{1}{|\mathbf{r}_{ij}|^3}; \quad (9)$$

атомна резонансна частота $\omega_0 = \omega_a - \omega_b \in$, взагалі, функцією швидкості атома внаслідок ефекту Доплера, так, що кожен атом має власну резонансну частоту (таке позначення навмисно не включає атомного індексування); значення $\lambda_a = \gamma \bar{n}_a^{(0)}$, $\lambda_b = \gamma \bar{n}_b^{(0)}$; $\bar{n}_a^{(0)} + \bar{n}_b^{(0)} = 1$, де $\bar{n}_a^{(0)}$ і $\bar{n}_b^{(0)}$ є рівноважними розв'язками наведених вище рівнянь без зовнішніх електромагнітних полів та без диполь-дипольної взаємодії між атомами. У відповідності із представленою моделлю, тут використовуються феноменологічні коефіцієнти розпаду γ та γ_{ba} , які враховують спонтанний розпад, зіткнення та інші взаємодії із зовнішнім середовищем. Ці параметри аналізуємо нижче. Зауважимо, що тут і надалі у тексті, для простоти, ми не відрізняємо φ_{ba}^i та φ_{ab}^i , чи, іншими словами, $\varphi_{ba}^i = (\varphi_{ba}^i)^*$. Також вище використані такі визначення для мікроскопічних N -частинкових елементів матриці густини:

$$\begin{aligned} \rho_{aa}^i &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots a_i \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i a}; \\ \rho_{ab}^i &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i a}; \\ \rho_{bb}^i &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i b}; \\ \rho_{ab;ba}^{i;j} &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots a_j \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i a} \delta_{\beta_j b}; \\ \rho_{aa;ba}^{i;j} &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots a_i \dots a_j \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i a} \delta_{\beta_j b}; \\ \rho_{ba;ba}^{i;j} &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots a_i \dots a_j \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i b} \delta_{\beta_j b}. \end{aligned} \quad (10)$$

Тут $\beta = (\beta_1 \dots \beta_i \dots \beta_N)$, $\beta_i = (a, b)$; $\delta_{\beta_j b}$ – символ Кронекера; $C_{\beta} = C_{\beta}(t, \mathbf{X})$ – коефіцієнти розкладу у виразі (4).

Усереднюючи наведені вище “ N -частинкові” рівняння за розподілом ансамблю систем та використовуючи симетрію ансамблю відносно перестановок атомних пар, може бути отриманий ланцюжок одно-, дво-, три-, ..., N -частинкових кінетичних рівнянь. Тоді, припускаючи, що просторові кореляції

між будь-якими двома атомами достатньо швидко зникають з часом (математично це записано як вираз (53)), можемо отримати таку замкнуту систему одночастинкових макроскопічних рівнянь з відповідних N -частинкових мікроскопічних рівнянь (5)–(8) або одно- і двочастинкових макроскопічних рівнянь (43)–(46), що ґрунтуються на уведеному модельному гамільтоніані (див. детальні визначення і виведення наступних рівнянь у розділі “Доведення”) та позначення $\chi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}(N-1)\varphi^2$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{aa}(t, \mathbf{r}) &= \lambda_a \frac{n(\mathbf{r})}{N} - \gamma \rho_{aa}(t, \mathbf{r}) + \\ &+ \frac{i}{\hbar} \varphi (\rho_{ba}(t, \mathbf{r}) \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}(t, \mathbf{r}) - \rho_{ab}(t, \mathbf{r}) \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r})) + \\ &+ \frac{2}{\hbar} \chi \int d\mathbf{r}' \{ 2 \operatorname{Im}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r})) \operatorname{Re}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r}')) Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \}. \end{aligned} \quad (12)$$

Тут $\rho_{aa}(t, \mathbf{r})$ – одночастинкова густина ймовірності збудженого стану, що визначається усередненим елементом матриці густини, і яка описує ймовірність знайти деякий атом у момент часу $t \pm dt$ з координатами $\mathbf{r} \pm d\mathbf{r}$ у збудженому стані a , незалежно від того, у яких станах знаходиться решта атомів в об'ємі V (об'єм зразку):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{bb}(t, \mathbf{r}) &= \lambda_b \frac{n(\mathbf{r})}{N} - \gamma \rho_{bb}(t, \mathbf{r}) - \\ &- \frac{i}{\hbar} \varphi (\rho_{ba}(t, \mathbf{r}) \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}(t, \mathbf{r}) - \rho_{ab}(t, \mathbf{r}) \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r})) - \\ &- \frac{2}{\hbar} \chi \int d\mathbf{r}' \{ 2 \operatorname{Im}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r})) \operatorname{Re}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r}')) Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \}. \end{aligned} \quad (13)$$

Тут $\rho_{bb}(t, \mathbf{r})$ – одночастинкова густина ймовірності основного стану, дана усередненим елементом матриці густини, що описує ймовірність знайти якийсь атом у момент часу $t \pm dt$ з координатами $\mathbf{r} \pm d\mathbf{r}$ в основному стані b , незалежно від того, у яких станах знаходиться решта атомів в об'ємі V (об'єм зразку):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{ba}(t, \mathbf{r}) &= -\gamma_{ba} \rho_{ba}(t, \mathbf{r}) + i\bar{\omega}_0 \rho_{ba}(t, \mathbf{r}) + \\ &+ \frac{i}{\hbar} (\rho_{aa}(t, \mathbf{r}) - \rho_{bb}(t, \mathbf{r})) \varphi \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r}) - \\ &- \frac{2i}{\hbar} \chi \int d\mathbf{r}' \left\{ (\rho_{aa}(t, \mathbf{r}) - \rho_{bb}(t, \mathbf{r})) \times \right. \\ &\left. \times \operatorname{Re}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r}')) Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

Тут $\rho_{ba}(t, \mathbf{r})$ – усереднений недиагональний елемент матриці густини, що визначає поляризацію даного газового середовища.

Наприкінці цього розділу запишемо рівняння для квазікласичного поступального руху частинок, яке описує зміну усередненої атомної швидкості $\mathbf{u}(t, \mathbf{r})$ з часом і просторовими координатами:

$$m \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(t, \mathbf{r}) = -m \left(\mathbf{u}(t, \mathbf{r}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \mathbf{u}(t, \mathbf{r}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left\{ -\wp(\rho_{ba}(t, \mathbf{r})) \hat{\phi} \cdot \mathbf{E}(t, \mathbf{r}) + \rho_{ab}(t, \mathbf{r}) \hat{\phi} \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r}) + 2\chi \int d\mathbf{r}' \{ 2 \operatorname{Re}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r})) \operatorname{Re}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r}')) Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \} \right\}. \quad (15)$$

Тут

$$Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\hat{\phi} \cdot \hat{\phi}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} - 3 \frac{(\hat{\phi} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')) (\hat{\phi}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'))}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^5}; \quad (16)$$

$\bar{\omega}_0$ – атомна “резонансна” частота, що усереднена за ансамблем.

Тут використовується апроксимація, що нехтує “колективною віддачею”. В той же час це усереднене значення може залежати від часу і координат, як показано у підрозділі “Від мікроскопічного опису до макроскопічного” наступного розділу. Параметри $\lambda_{a,b}$ описують, як і у попередньому мікроскопічному випадку, неусереднені елементи матриці густини для системи невзаємодіючих атомів без зовнішнього електромагнітного поля, $n(\mathbf{r})$ – число атомів в одиниці об’єму.

Щоб врахувати далекодію між атомами необхідно додати до розгляду рівняння Максвелла, які описують поширення макроскопічного електромагнітного поля у даному середовищі:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(t, \mathbf{r}) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E}(t, \mathbf{r}) = -\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{P}(t, \mathbf{r}), \quad (17)$$

де поляризація $\mathbf{P}(t, \mathbf{r})$ системи в одиниці об’єму задається як

$$\mathbf{P}(t, \mathbf{r}) = N \wp \hat{\phi} (\rho_{ba}(t, \mathbf{r}) + \rho_{ab}(t, \mathbf{r})). \quad (18)$$

Тут c – швидкість світла у середовищі.

Необхідно користуватися одним спільним просторовим масштабом для трьох термінів: макроскопічний одночастинковий розподіл, макроскопічна матриця густини станів, і макроскопічне електромагнітне поле. Відповідно, макроскопічні елементи матриці густини $\rho_{aa}(t, \mathbf{r})$, $\rho_{ba}(t, \mathbf{r})$, та $\rho_{ba}(t, \mathbf{r})$ не є чистими

атомними станами, але включають дію накачуючого поля та усереднення за ансамблем.

3. Доведення

У цьому розділі отримані еволюційні рівняння для амплітуд станів системи N атомів. Спочатку отримані еволюційні рівняння для матриці густини і координат атома. Після відповідного мікроскопічного опису системи буде розглянутий метод переходу до замкненої системи одночастинкових макроскопічних кінетичних рівнянь.

3.1. Рівняння еволюції для амплітуд станів системи

Домножуючи ліву і праву частини рівняння (1) на $\langle \Psi |_{\beta} = \langle \beta_1 \dots \beta_i \dots \beta_j \dots \beta_N |$, отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} C_{\beta}(t, \mathbf{X}) &= -i\omega_a \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha}^{2^N} C_{\alpha}(t, \mathbf{X}) \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i^+ | \Psi \rangle_{\alpha} - \\ &- i\omega_b \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha}^{2^N} C_{\alpha}(t, \mathbf{X}) \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i | \Psi \rangle_{\alpha} + \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha}^{2^N} C_{\alpha}(t, \mathbf{X}) \left(\wp_{ab}^i \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i^+ | \Psi \rangle_{\alpha} + \right. \\ &\left. + \wp_{ba}^i \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i | \Psi \rangle_{\alpha} \right) \cdot \mathcal{E}(t, \mathbf{r}_i) - \\ &- \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{i}{\hbar} \sum_{i,j;i \neq j}^{N,N} \sum_{\alpha}^{2^N} C_{\alpha}(t, \mathbf{X}) \left[\wp_{ab}^i \cdot \wp_{ab}^j \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i^+ \sigma_j^+ | \Psi \rangle_{\alpha} + \right. \\ &+ \wp_{ab}^i \cdot \wp_{ba}^j \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i^+ \sigma_j | \Psi \rangle_{\alpha} + \\ &+ \wp_{ba}^i \cdot \wp_{ab}^j \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i \sigma_j^+ | \Psi \rangle_{\alpha} + \wp_{ba}^i \cdot \wp_{ba}^j \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i \sigma_j | \Psi \rangle_{\alpha} - \\ &- 3 \left((\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ab}^i) (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ab}^j) \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i^+ \sigma_j^+ | \Psi \rangle_{\alpha} + \right. \\ &+ (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ab}^i) (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ba}^j) \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i^+ \sigma_j | \Psi \rangle_{\alpha} + \\ &+ (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ba}^i) (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ab}^j) \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i \sigma_j^+ | \Psi \rangle_{\alpha} + \\ &\left. + (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ba}^i) (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ba}^j) \langle \Psi |_{\beta} \sigma_i \sigma_j | \Psi \rangle_{\alpha} \right) \left] \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} - \right. \\ &\left. - \frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha}^{2^N} C_{\alpha}(t, \mathbf{X}) \langle \Psi |_{\beta} \hat{\Gamma} | \Psi \rangle_{\alpha}. \quad (19) \end{aligned}$$

Після підстановки виразів для усереднених операторів (24), (25) (див. у наступному підрозділі) отримаємо із (19) таке:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} C_\beta(t, \mathbf{X}) &= -i\omega_a \sum_{i=1}^N C_{\beta_1 \dots a_i \dots \beta_N} \delta_{\beta_i a} - \\
 &- i\omega_b \sum_{i=1}^N C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N} \delta_{\beta_i b} + \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \left(C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N} \delta_{\beta_i a} \wp_{ab}^i + \right. \\
 &+ C_{\beta_1 \dots a_i \dots \beta_N} \delta_{\beta_i b} \wp_{ba}^i \left. \right) \cdot \mathcal{E}(t, \mathbf{r}_i) - \\
 &- \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{i}{\hbar} \sum_{i,j;i \neq j}^{N;N} \left[C_{\beta_1 \dots b_i \dots b_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i a} \delta_{\beta_j a} \wp_{ab}^i \cdot \wp_{ab}^j + \right. \\
 &+ C_{\beta_1 \dots b_i \dots a_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i a} \delta_{\beta_j b} \wp_{ab}^i \cdot \wp_{ba}^j + \\
 &+ C_{\beta_1 \dots a_i \dots b_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i b} \delta_{\beta_j a} \wp_{ba}^i \cdot \wp_{ab}^j + \\
 &+ C_{\beta_1 \dots a_i \dots a_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i b} \delta_{\beta_j b} \wp_{ba}^i \cdot \wp_{ba}^j - \\
 &- 3 \left(C_{\beta_1 \dots b_i \dots b_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i a} \delta_{\beta_j a} (\wp_{ab}^i \cdot \hat{r}_{ij}) (\wp_{ab}^j \cdot \hat{r}_{ij}) + \right. \\
 &+ C_{\beta_1 \dots b_i \dots a_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i a} \delta_{\beta_j b} (\wp_{ab}^i \cdot \hat{r}_{ij}) (\wp_{ba}^j \cdot \hat{r}_{ij}) + \\
 &+ C_{\beta_1 \dots a_i \dots b_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i b} \delta_{\beta_j a} (\wp_{ba}^i \cdot \hat{r}_{ij}) (\wp_{ab}^j \cdot \hat{r}_{ij}) + \\
 &+ C_{\beta_1 \dots a_i \dots a_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i b} \delta_{\beta_j b} (\wp_{ba}^i \cdot \hat{r}_{ij}) (\wp_{ba}^j \cdot \hat{r}_{ij}) \left. \right) \times \\
 &\times \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha}^{2N} C_\alpha(t, \mathbf{X}) \langle \Psi | \beta \hat{\Gamma} | \Psi \rangle_\alpha. \quad (20)
 \end{aligned}$$

3.2. Рівняння руху атома

У квазікласичному наближенні, рівняння руху атома між зіткненнями має таку форму:

$$m_i \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r}_i(t) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \langle \hat{H}_i \rangle, \quad (21)$$

де

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_i &= -(\wp_{ab}^i \sigma_i^+ + \wp_{ba}^i \sigma_i) \cdot \mathcal{E}(t, \mathbf{r}_i) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \\
 &\times \sum_{j;i \neq j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} \left[(\wp_{ab}^i \sigma_i^+ + \wp_{ba}^i \sigma_i) \cdot (\wp_{ab}^j \sigma_j^+ + \wp_{ba}^j \sigma_j) - \right.
 \end{aligned}$$

$$-3 \hat{r}_{ij} \cdot (\wp_{ab}^i \sigma_i^+ + \wp_{ba}^i \sigma_i) \hat{r}_{ij} \cdot (\wp_{ab}^j \sigma_j^+ + \wp_{ba}^j \sigma_j) \left. \right]. \quad (22)$$

Тоді

$$\begin{aligned}
 m_i \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r}_i(t) &= -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \sum_{\beta}^{2N} \sum_{\alpha}^{2N} C_\beta^*(t, \mathbf{X}) C_\alpha(t, \mathbf{X}) \times \\
 &\times \left\{ \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} - (\wp_{ab}^i \langle \Psi | \beta \sigma_i^+ | \Psi \rangle_\alpha + \wp_{ba}^i \langle \Psi | \beta \sigma_i | \Psi \rangle_\alpha) \times \right. \\
 &\times \mathcal{E}(t, \mathbf{r}_i) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j;j \neq i}^N \left[\wp_{ab}^i \cdot \wp_{ab}^j \langle \Psi | \beta \sigma_i^+ \sigma_j^+ | \Psi \rangle_\alpha + \right. \\
 &+ \wp_{ab}^i \cdot \wp_{ba}^j \langle \Psi | \beta \sigma_i^+ \sigma_j | \Psi \rangle_\alpha + \wp_{ba}^i \cdot \wp_{ab}^j \langle \Psi | \beta \sigma_i \sigma_j^+ | \Psi \rangle_\alpha + \\
 &+ \wp_{ba}^i \cdot \wp_{ba}^j \langle \Psi | \beta \sigma_i \sigma_j | \Psi \rangle_\alpha - 3 \left((\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ab}^i) (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ab}^j) \times \right. \\
 &\times \langle \Psi | \beta \sigma_i^+ \sigma_j^+ | \Psi \rangle_\alpha + (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ab}^i) (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ba}^j) \times \\
 &\times \langle \Psi | \beta \sigma_i^+ \sigma_j | \Psi \rangle_\alpha + (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ba}^i) (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ab}^j) \langle \Psi | \beta \sigma_i \sigma_j^+ | \Psi \rangle_\alpha + \\
 &\left. \left. + (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ba}^i) (\hat{r}_{ij} \cdot \wp_{ba}^j) \langle \Psi | \beta \sigma_i \sigma_j | \Psi \rangle_\alpha \right) \right] \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} \left. \right\}. \quad (23)
 \end{aligned}$$

Після підстановки виразів для усереднених операторів

$$\begin{aligned}
 \sigma_i^+ \sigma_i | \Psi \rangle_\alpha &= (|a\rangle \langle a|_i) |\alpha_1 \dots \alpha_i \dots \alpha_N\rangle = \delta_{a\alpha_i} | \Psi \rangle_\alpha; \\
 \sigma_i^+ | \Psi \rangle_\alpha &= (|a\rangle \langle b|_i) |\alpha_1 \dots \alpha_i \dots \alpha_N\rangle = \delta_{b\alpha_i} |\alpha_1 \dots a_i \dots \alpha_N\rangle; \\
 \langle \Psi | \beta \sigma_i^+ | \Psi \rangle_\alpha &= \delta_{b\alpha_i} \delta_{\beta_1 \alpha_1} \dots \delta_{\beta_i a} \dots \delta_{\beta_N \alpha_N}; \\
 \sigma_i | \Psi \rangle_\alpha &= (|b\rangle \langle a|_i) |\alpha_1 \dots \alpha_i \dots \alpha_N\rangle = \delta_{a\alpha_i} |\alpha_1 \dots b_i \dots \alpha_N\rangle; \\
 \langle \Psi | \beta \sigma_i | \Psi \rangle_\alpha &= \delta_{a\alpha_i} \delta_{\beta_1 \alpha_1} \dots \delta_{\beta_i b} \dots \delta_{\beta_N \alpha_N}; \\
 \sigma_i^+ \sigma_j^+ | \Psi \rangle_\alpha &= \sigma_i^+ \delta_{b\alpha_j} |\alpha_1 \dots a_j \dots \alpha_N\rangle = \\
 &= \delta_{b\alpha_i} \delta_{b\alpha_j} |\alpha_1 \dots a_i \dots a_j \dots \alpha_N\rangle; \\
 \langle \Psi | \beta \sigma_i^+ \sigma_j^+ | \Psi \rangle_\alpha &= \\
 &= \delta_{b\alpha_i} \delta_{b\alpha_j} \delta_{\beta_1 \alpha_1} \delta_{\beta_2 \alpha_2} \dots \delta_{\beta_i a} \dots \delta_{\beta_j a} \dots \delta_{\beta_N \alpha_N}; \\
 \sigma_i^+ \sigma_j | \Psi \rangle_\alpha &= \sigma_i^+ \delta_{a\alpha_j} |\alpha_1 \dots b_j \dots \alpha_N\rangle =
 \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned}
 &= \delta_{b\alpha_i} \delta_{a\alpha_j} |\alpha_1 \dots a_i \dots b_j \dots \alpha_N\rangle; \\
 \langle \Psi | \beta \sigma_i^+ \sigma_j | \Psi \rangle_\alpha &= \delta_{b\alpha_i} \delta_{a\alpha_j} \delta_{\beta_1 \alpha_1} \dots \delta_{\beta_i a} \dots \delta_{\beta_j b} \dots \delta_{\beta_N \alpha_N}; \\
 \langle \Psi | \beta \sigma_i \sigma_j^+ | \Psi \rangle_\alpha &= \delta_{a\alpha_i} \delta_{b\alpha_j} \delta_{\beta_1 \alpha_1} \dots \delta_{\beta_i b} \dots \delta_{\beta_j a} \dots \delta_{\beta_N \alpha_N}; \\
 \langle \Psi | \beta \sigma_i \sigma_j | \Psi \rangle_\alpha &= \delta_{a\alpha_i} \delta_{a\alpha_j} \delta_{\beta_1 \alpha_1} \dots \delta_{\beta_i b} \dots \delta_{\beta_j b} \dots \delta_{\beta_N \alpha_N}; \\
 \langle \Psi | \beta \sigma_i^+ \sigma_i | \Psi \rangle_\alpha &= \delta_{a\alpha_i} \delta_{\beta_1 \alpha_1} \dots \delta_{\beta_i a} \dots \delta_{\beta_N \alpha_N}; \quad (25)
 \end{aligned}$$

одержуємо таке рівняння руху для атома i :

$$\begin{aligned}
 m_i \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r}_i(t) &= -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \sum_{\beta} C_{\beta}^*(t, \mathbf{X}) \times \\
 &\times \left\{ \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} - (C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N} \delta_{\beta_i a} \wp_{ab}^i + C_{\beta_1 \dots a_i \dots \beta_N} \delta_{\beta_i b} \wp_{ba}^i) \times \right. \\
 &\times \mathcal{E}(t, \mathbf{r}_i) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j:j \neq i}^N \left[C_{\beta_1 \dots b_i \dots b_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i a} \delta_{\beta_j a} \wp_{ab}^i \cdot \wp_{ab}^j + \right. \\
 &+ C_{\beta_1 \dots b_i \dots a_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i a} \delta_{\beta_j b} \wp_{ab}^i \cdot \wp_{ba}^j + \\
 &+ C_{\beta_1 \dots a_i \dots b_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i b} \delta_{\beta_j a} \wp_{ba}^i \cdot \wp_{ab}^j + \\
 &+ C_{\beta_1 \dots a_i \dots a_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i b} \delta_{\beta_j b} \wp_{ba}^i \cdot \wp_{ba}^j - \\
 &- 3 \left(C_{\beta_1 \dots b_i \dots b_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i a} \delta_{\beta_j a} (\wp_{ab}^i \cdot \hat{r}_{ij}) (\wp_{ab}^j \cdot \hat{r}_{ij}) + \right. \\
 &+ C_{\beta_1 \dots b_i \dots a_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i a} \delta_{\beta_j b} (\wp_{ab}^i \cdot \hat{r}_{ij}) (\wp_{ba}^j \cdot \hat{r}_{ij}) + \\
 &+ C_{\beta_1 \dots a_i \dots b_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i b} \delta_{\beta_j a} (\wp_{ba}^i \cdot \hat{r}_{ij}) (\wp_{ab}^j \cdot \hat{r}_{ij}) + \\
 &+ C_{\beta_1 \dots a_i \dots a_j \dots \beta_N} \delta_{\beta_i b} \delta_{\beta_j b} (\wp_{ba}^i \cdot \hat{r}_{ij}) (\wp_{ba}^j \cdot \hat{r}_{ij}) \left. \right] \times \\
 &\times \left. \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} \right\}. \quad (26)
 \end{aligned}$$

3.3. Еволюційні рівняння для матриці густини і координат атома

Зараз можна записати вирази для похідної за часом від матриці густини:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{aa}^i(t, \mathbf{X}), \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}), \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho_{bb}^i(t, \mathbf{X}), \quad (27)$$

де

$$\begin{aligned}
 \rho_{aa}^i &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots a_i \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i a}, \\
 \rho_{ab}^i &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i a}, \\
 \rho_{bb}^i &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i b}, \quad (28)
 \end{aligned}$$

та реалізувати необхідні перетворення у рівняннях для атомних координат. Зазначимо, що тут і в означеннях (10), (11) вище, наведені записи, що включають дельта-символ Кронекера, які означають таке:

$$\begin{aligned}
 \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots a_i \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i a} &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots a_i \dots \beta_N}^* C_{\beta_1 \dots a_i \dots \beta_N}; \\
 \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i a} &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}^* C_{\beta_1 \dots a_i \dots \beta_N}; \\
 \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}^* C_{\beta} \delta_{\beta_i b} &= \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}^* C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}. \quad (29)
 \end{aligned}$$

3.3.1. Умови нормування і оператор $\hat{\Gamma}$

Щоб задовольнити умови нормування

$$\rho_{aa}^i(t, \mathbf{X}) + \rho_{bb}^i(t, \mathbf{X}) = 1, \quad (30)$$

приймаємо таку модель “релаксаційного” оператора $\hat{\Gamma}$, що

$$\begin{aligned}
 &-\frac{i}{\hbar} \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots a_i \dots \beta_N}^* \sum_{\alpha}^{2^N} C_{\alpha} \langle \Psi | \beta_1 \dots a_i \dots \beta_N \hat{\Gamma} | \Psi \rangle_{\alpha} + \\
 &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}^* \sum_{\alpha}^{2^N} C_{\alpha} \left(\langle \Psi | \beta_1 \dots a_i \dots \beta_N \hat{\Gamma} | \Psi \rangle_{\alpha} \right)^* = \\
 &= \gamma_{bb} \rho_{bb}^i(t, \mathbf{X}) - \gamma_{aa} \rho_{aa}^i(t, \mathbf{X}). \quad (31)
 \end{aligned}$$

Також за аналогією

$$\begin{aligned}
 &-\frac{i}{\hbar} \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}^* \sum_{\alpha}^{2^N} C_{\alpha} \langle \Psi | \beta_1 \dots b_i \dots \beta_N \hat{\Gamma} | \Psi \rangle_{\alpha} + \\
 &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{\beta}^{2^N} C_{\beta_1 \dots b_i \dots \beta_N}^* \sum_{\alpha}^{2^N} C_{\alpha} \left(\langle \Psi | \beta_1 \dots b_i \dots \beta_N \hat{\Gamma} | \Psi \rangle_{\alpha} \right)^* =
 \end{aligned}$$

$$= \gamma_{aa} \rho_{aa}^i(t, \mathbf{X}) - \gamma_{bb} \rho_{bb}^i(t, \mathbf{X}). \quad (32)$$

Але,

$$\begin{aligned} & -\frac{i}{\hbar} \sum_{\beta} C_{\beta_1 \dots \beta_N}^* \sum_{\alpha} C_{\alpha} \langle \Psi |_{\beta_1 \dots \beta_N} \hat{\Gamma} | \Psi \rangle_{\alpha} + \\ & + \frac{i}{\hbar} \sum_{\beta} C_{\beta_1 \dots \beta_N} \sum_{\alpha} C_{\alpha}^* \left(\langle \Psi |_{\beta_1 \dots \beta_N} \hat{\Gamma} | \Psi \rangle_{\alpha} \right)^* = \\ & = -\gamma_{ba} \rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}). \end{aligned} \quad (33)$$

3.3.2. Рівняння руху для елементів матриці густини

Щоб отримати рівняння руху, підставимо вираз (20) у частинні похідні, що були введені раніше. Наприклад,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{aa}^i(t, \mathbf{X}) &= \sum_{\beta} C_{\beta} \delta_{\beta, a} \frac{\partial}{\partial t} C_{\beta_1 \dots \beta_N}^* + \\ & + \sum_{\beta} C_{\beta_1 \dots \beta_N}^* \frac{\partial}{\partial t} C_{\beta} \delta_{\beta, a}. \end{aligned} \quad (34)$$

Як наслідок, використовуючи результати із попередніх підрозділів та введені позначення, система динамічних (мікроскопічних) рівнянь (5)–(8) для i -го атома може бути отримана у наближенні “ротаційної хвилі” (“rotating-wave approximation”) для взаємодії атом–поле.

3.4. Від мікроскопічного опису до макроскопічного

Нехай $D(t, \mathbf{r}_1(t), \mathbf{r}_2(t), \dots, \mathbf{r}_N(t)) = D(t, \mathbf{X})$ – густина ймовірності знайти систему у стані з координатами $\mathbf{X} \pm d\mathbf{X}$. Тоді усереднена густина ймовірності знайти i -й атом у збудженому стані з координатами $\mathbf{r}_i \pm d\mathbf{r}_i$ визначається як

$$\begin{aligned} \overline{\rho_{aa}^i}(t, \mathbf{r}_i) &= \int D(t, \mathbf{X}) \rho_{aa}^i(t, \mathbf{X}) \times \\ & \times d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N. \end{aligned} \quad (35)$$

Щоб описати систему атомів для різних просторових і часових масштабів, застосуємо *кінетичне наближення*, яке містить розчеплення двочастинкової матриці густини на добуток двох одностинкових матриць густини

$$\overline{\rho_{ab;ba}^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \int D(t, \mathbf{X}) \rho_{ab;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) \times$$

$$\begin{aligned} & \times d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_{j-1} d\mathbf{r}_{j+1} \dots d\mathbf{r}_N \simeq \\ & \simeq \overline{\rho_{ab}^i}(t, \mathbf{r}_i) \overline{\rho_{ba}^j}(t, \mathbf{r}_j), \end{aligned} \quad (36)$$

і разом із розчепленням Боголюбова (див., наприклад, [38]) може описувати зникаючі кореляції між частинками з часом при їх русі у тривимірному просторі \mathbf{r} :

$$\overline{f(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}', t)} \simeq \overline{f(\mathbf{r}, t)} \overline{f(\mathbf{r}', t)}, \quad (37)$$

де

$$f(\mathbf{r}, t) = \int \sum_i^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)) d\mathbf{p} \quad (38)$$

– функція просторового розподілу N частинок, коли $\mathbf{p}_i(t)$ – імпульс i -ї частинки.

У ролі наступного наближення застосуємо *гідродинамічну апроксимацію*, а саме: локальна функція розподілу частинок у шестивимірному просторі швидкості–координати є розподіл Максвелла–Больцмана, що описує локальний рівноважний стан атомів. Тоді зіткнення між атомами не дають внеску в усереднене рівняння еволюції, яке описує положення фізично малого елемента об’єму $d\mathbf{r}$ (інтеграл Больцмана–Енскога зникає) (див. [39]).

Усереднені еволюційні рівняння будуть отримані таким шляхом. Із означення елементів N -частинкової матриці густини

$$\begin{aligned} \rho_{ab}^i(t, \mathbf{X}) &= (\rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}))^*; \\ \rho_{ab;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) &= (\rho_{ba;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}))^*, \\ \rho_{ba;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) &= (\rho_{ab;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}))^*, \\ \rho_{aa;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) &= (\rho_{aa;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}))^*, \\ \rho_{bb;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) &= (\rho_{bb;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}))^*, \end{aligned} \quad (39)$$

випливає, що

$$\rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}) - \rho_{ab}^i(t, \mathbf{X}) = 2i \text{Im}(\rho_{ba}^i(t, \mathbf{X})),$$

$$\rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}) + \rho_{ab}^i(t, \mathbf{X}) = 2\text{Re}(\rho_{ba}^i(t, \mathbf{X})),$$

$$\begin{aligned} \rho_{ba;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{ba;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \rho_{ab;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \rho_{ab;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) = \\ = 2i \text{Im}(\rho_{ba;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{ba;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X})), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_{aa;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{aa;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \rho_{bb;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \rho_{bb;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) &= \\ = 2 \operatorname{Re} \left(\rho_{aa;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \rho_{bb;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) \right), \\ \rho_{ba;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{ba;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{ab;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{ab;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) &= \\ = 2 \operatorname{Re} \left(\rho_{ba;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{ba;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}) \right). \end{aligned} \quad (40)$$

Далі для скорочення застосуємо такі позначення:

$$P^{i;j}(t, \mathbf{X}) = \rho_{ba;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) + \rho_{ba;ab}^{i;j}(t, \mathbf{X}), \quad (41)$$

і

$$R^{i;j}(t, \mathbf{X}) = \rho_{aa;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}) - \rho_{bb;ba}^{i;j}(t, \mathbf{X}). \quad (42)$$

Усереднимо рівняння (5)–(8) за розподілом $\mathcal{D}(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}})$, яке описує ймовірність знайти систему атомів у фазовому об'ємі $(\mathbf{X} \pm d\mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}} \pm d\dot{\mathbf{X}})$ на часовому інтервалі $t \pm dt$. Тоді, відповідно до (35), приходимо до такої системи рівнянь: для ρ_{aa}^i

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N D(t, \mathbf{X}) \frac{\partial}{\partial t} \rho_{aa}^i(t, \mathbf{X}) &= \\ = \lambda_a \frac{n(\mathbf{r}_i)}{N} - \gamma \overline{\rho_{aa}^i}(t, \mathbf{r}_i) + \frac{i}{\hbar} \left(\overline{\rho_{ba}^i}(t, \mathbf{r}_i) \wp_{ab}^i \cdot \mathbf{E}(t, \mathbf{r}_i) - \right. \\ \left. - \overline{\rho_{ab}^i}(t, \mathbf{r}_i) \wp_{ba}^i \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r}_i) \right) + \frac{2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sum_{j:j \neq i}^N \int d\mathbf{r}_j \times \\ \times \left\{ \operatorname{Im} \left(\overline{P^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right) Q_{ab}^{ij}(\mathbf{r}_{ij}) \right\}; \end{aligned} \quad (43)$$

для ρ_{bb}^i

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N D(t, \mathbf{X}) \frac{\partial}{\partial t} \rho_{bb}^i(t, \mathbf{X}) &= \\ = \lambda_b \frac{n(\mathbf{r}_i)}{N} - \gamma \overline{\rho_{bb}^i}(t, \mathbf{r}_i) - \\ - \frac{i}{\hbar} \left(\overline{\rho_{ba}^i}(t, \mathbf{r}_i) \wp_{ab}^i \cdot \mathbf{E}(t, \mathbf{r}_i) - \overline{\rho_{ab}^i}(t, \mathbf{r}_i) \wp_{ba}^i \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r}_i) \right) - \\ - \frac{2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sum_{j:j \neq i}^N \int d\mathbf{r}_j \left\{ \operatorname{Im} \left(\overline{P^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right) Q_{ab}^{ij}(\mathbf{r}_{ij}) \right\}; \end{aligned} \quad (44)$$

для ρ_{ba}^i

$$\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N D(t, \mathbf{X}) \frac{\partial}{\partial t} \rho_{ba}^i(t, \mathbf{X}) =$$

$$\begin{aligned} &= -\gamma_{ba} \overline{\rho_{ba}^i}(t, \mathbf{r}_i) + i\overline{\omega_0} \overline{\rho_{ba}^i}(t, \mathbf{r}_i) + \\ &+ \frac{i}{\hbar} \left(\overline{\rho_{aa}^i}(t, \mathbf{r}_i) - \overline{\rho_{bb}^i}(t, \mathbf{r}_i) \right) \wp_{ab}^i \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r}_i) - \\ &- \frac{2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sum_{j:j \neq i}^N \int d\mathbf{r}_j \left\{ \operatorname{Re} \left(\overline{R^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right) Q_{ab}^{ij}(\mathbf{r}_{ij}) \right\}. \end{aligned} \quad (45)$$

Приведемо також отримане квазікласичне рівняння руху:

$$\begin{aligned} m_i \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N d\dot{\mathbf{r}}_1 \dots d\dot{\mathbf{r}}_N \times \\ \times \mathcal{D}(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) \dot{\mathbf{r}}_i(t) = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \left\{ - \left(\overline{\rho_{ba}^i}(t, \mathbf{r}_i) \wp_{ab}^i \cdot \mathbf{E}(t, \mathbf{r}_i) + \right. \right. \\ \left. \left. + \overline{\rho_{ab}^i}(t, \mathbf{r}_i) \wp_{ba}^i \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r}_i) \right) + \right. \\ \left. + \frac{2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j:j \neq i}^N \int d\mathbf{r}_j \left\{ \operatorname{Re} \left(\overline{P^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right) Q_{ab}^{ij}(\mathbf{r}_{ij}) \right\} \right\}, \end{aligned} \quad (46)$$

де усереднені величини $\overline{P^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ і $\overline{R^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ визначаються в (36). Тут було використано такі позначення:

$$\begin{aligned} \overline{\omega_0} \overline{\rho_{\alpha\beta}^i}(t, \mathbf{r}_i) &= \\ = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N d\dot{\mathbf{r}}_1 \dots d\dot{\mathbf{r}}_N \times \\ \times \rho_{\alpha\beta}^i(t, \mathbf{X}) \mathcal{D}(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) \omega_0(\dot{\mathbf{r}}_i), \end{aligned} \quad (47)$$

де $\alpha \in (a, b)$ і $\beta \in (a, b)$;

$$\begin{aligned} \frac{n(\mathbf{r}_i)}{N} = \overline{\rho_{aa}^i}(t, \mathbf{r}_i) + \overline{\rho_{bb}^i}(t, \mathbf{r}_i) &= \\ = \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N d\dot{\mathbf{r}}_1 d\dot{\mathbf{r}}_2 \dots d\dot{\mathbf{r}}_N \times \\ \times \mathcal{D}(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}), \end{aligned} \quad (48)$$

та

$$D(t, \mathbf{X}) = \int d\dot{\mathbf{r}}_1 d\dot{\mathbf{r}}_2 \dots d\dot{\mathbf{r}}_N \mathcal{D}(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}). \quad (49)$$

При цьому враховується така умова нормування:

$$\int_{V^N} d\mathbf{X} D(t, \mathbf{X}) = \int d\mathbf{X} d\dot{\mathbf{X}} \mathcal{D}(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) = 1. \quad (50)$$

Тут інтегрування за кожною координатою \mathbf{r}_i ($i = 1, \dots, N$) відбувається у межах об'єму V , що фізично заповнений газом атомів. Таким чином, оскільки число частинок в об'ємі V зберігається (що також видно із умови нормування), уведені N -частинкові фазові розподіли \mathcal{D} і D не залежать явним чином від часу: умова нормування виконується для будь-якого моменту часу t . Як наслідок маємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V^N} d\mathbf{X} D(t, \mathbf{X}) &= \frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{X} d\dot{\mathbf{X}} \mathcal{D}(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) = 0 \\ \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} D(t, \mathbf{X}) &= 0. \end{aligned} \quad (51)$$

Отримані властивості дозволяють представити усереднену частинну похідну за часом від величин $\rho_{aa}^i(t, \mathbf{X})$, $\rho_{bb}^i(t, \mathbf{X})$, $\rho_{ba}^i(t, \mathbf{X})$ таким чином:

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N D(t, \mathbf{X}) \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\alpha\alpha'}^i(t, \mathbf{X}) &= \\ = \frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N D(t, \mathbf{X}) \rho_{\alpha\alpha'}^i(t, \mathbf{X}) - \\ - \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N \rho_{\alpha\alpha'}^i(t, \mathbf{X}) \frac{\partial}{\partial t} D(t, \mathbf{X}) &= \\ = \frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho_{\alpha\alpha'}^i}(t, \mathbf{r}_i), \end{aligned} \quad (52)$$

де $\alpha = \{a, b\}$ і $\alpha' = \{a, b\}$.

Щоб зробити наступне наближення, припускаємо, що два атоми перестають статистично корелювати через такий достатньо малий проміжок часу, що наступні вирази справджуються у відповідно вибраному часовому масштабі:

$$\begin{aligned} \overline{\rho_{ba;ba}^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) &\approx \overline{\rho_{ba}^i}(t, \mathbf{r}_i) \overline{\rho_{ba}^j}(t, \mathbf{r}_j); \\ \overline{\rho_{ba;ab}^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) &\approx \overline{\rho_{ba}^i}(t, \mathbf{r}_i) \overline{\rho_{ab}^j}(t, \mathbf{r}_j); \\ \overline{\rho_{aa;ba}^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) &\approx \overline{\rho_{aa}^i}(t, \mathbf{r}_i) \overline{\rho_{ba}^j}(t, \mathbf{r}_j); \\ \overline{\rho_{bb;ba}^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) &\approx \overline{\rho_{bb}^i}(t, \mathbf{r}_i) \overline{\rho_{ba}^j}(t, \mathbf{r}_j). \end{aligned} \quad (53)$$

Тут розглядається система із однакових атомів. Це приводить до симетрії усереднених розподілів:

$$\begin{aligned} \overline{\rho_{ba}^i}(t, \mathbf{r}_i) &= \rho_{ba}(t, \mathbf{r}), \\ \overline{\rho_{aa}^i}(t, \mathbf{r}_i) &= \rho_{aa}(t, \mathbf{r}), \end{aligned}$$

$$\overline{\rho_{bb}^i}(t, \mathbf{r}_i) = \rho_{bb}(t, \mathbf{r}). \quad (54)$$

Тоді вирази у круглих дужках під інтегруванням в еволюційних рівняннях (43)–(46) можуть бути представлені таким чином:

$$\begin{aligned} \text{Im} \left(\overline{\rho_{ba;ba}^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \overline{\rho_{ba;ab}^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right) &\approx \\ \approx 2 \text{Im} (\rho_{ba}(t, \mathbf{r})) \text{Re} (\rho_{ba}(t, \mathbf{r}')); & \\ \text{Re} \left(\overline{\rho_{aa;ba}^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - \overline{\rho_{bb;ba}^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right) &\approx \\ \approx (\rho_{aa}(t, \mathbf{r}) - \rho_{bb}(t, \mathbf{r})) \text{Re} (\rho_{ba}(t, \mathbf{r}')); & \\ \text{Re} \left(\overline{\rho_{ba;ba}^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \overline{\rho_{ba;ab}^{i;j}}(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right) &\approx \\ \approx 2 \text{Re} (\rho_{ba}(t, \mathbf{r})) \text{Re} (\rho_{ba}(t, \mathbf{r}')). & \end{aligned} \quad (55)$$

У результаті система еволюційних рівнянь (43)–(46) для густин атомних станів стає замкненою відносно невідомих, що описують тільки одностинкові розподіли ($\rho_{aa}(t, \mathbf{r})$, $\rho_{bb}(t, \mathbf{r})$, $\rho_{ba}(t, \mathbf{r})$). Крім того, припускаємо локальну рівновагу за розподілом \mathcal{D} в межах об'єму $\frac{(\pi)^3}{k^3}$, що дорівнює об'єму куба, який побудований на половині довжини хвилі. Так, що ефекти зіткнень зникають після усереднення прискорення i -ї частинки $\frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt}$:

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N d\dot{\mathbf{r}}_1 d\dot{\mathbf{r}}_2 \dots d\dot{\mathbf{r}}_N \mathcal{D} \times \\ \times (t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) \ddot{\mathbf{r}}_i(t) &= \frac{d}{dt} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N \times \\ \times d\dot{\mathbf{r}}_1 \dots d\dot{\mathbf{r}}_N \mathcal{D}(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) \dot{\mathbf{r}}_i(t) - \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{i-1} \times \\ \times d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_N d\dot{\mathbf{r}}_1 d\dot{\mathbf{r}}_2 \dots d\dot{\mathbf{r}}_N \dot{\mathbf{r}}_i \frac{d}{dt} \mathcal{D}(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) &\approx \\ \approx \frac{d}{dt} \mathbf{u}(t, \mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(t, \mathbf{r}) + \left(\mathbf{u}(t, \mathbf{r}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \mathbf{u}(t, \mathbf{r}), \end{aligned} \quad (56)$$

де

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{D}(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \mathcal{D}(\mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) \frac{d}{dt} \mathbf{X} + \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{X}}} \mathcal{D}(\mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) \times \\ \times \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{X} &= - \frac{\mathcal{D}(\mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}})}{J(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}})} \left[\frac{\partial}{\partial t} J(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} J \times \right. \\ \times (t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) \cdot \dot{\mathbf{X}} &+ \left. \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{X}}} J(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}) \cdot \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{X} \right]. \end{aligned} \quad (57)$$

Тут $J(t, \mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}})$ – якобіан перетворення фазових координат вздовж фазових траєкторій атомів з часом:

$$\left(\mathbf{X}(t+dt), \dot{\mathbf{X}}(t+dt) \right) = \hat{J} \cdot \left(\mathbf{X}(t), \dot{\mathbf{X}}(t) \right). \quad (58)$$

Покладаючи $\varphi_{ab}^i = \varphi_{ba}^i = \varphi \hat{\varphi}$, $i = 1, \dots, N$, що відображає паралельність або антипаралельність зовнішньому полю з амплітудою \mathbf{E} , отримуємо таку систему еволюційних рівнянь:

для $\rho_{aa}(t, \mathbf{r})$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{aa}(t, \mathbf{r}) &= \lambda_a \frac{n(\mathbf{r})}{N} - \gamma \rho_{aa}(t, \mathbf{r}) + \\ &+ \frac{i}{\hbar} \varphi (\rho_{ba}(t, \mathbf{r}) \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}(t, \mathbf{r}) - \rho_{ab}(t, \mathbf{r}) \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r})) + \\ &+ \frac{2}{\hbar} \chi \int d\mathbf{r}' \{ 2 \operatorname{Im}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r})) \operatorname{Re}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r}')) Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \}; \end{aligned} \quad (59)$$

для $\rho_{bb}(t, \mathbf{r})$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{bb}(t, \mathbf{r}) &= \lambda_b \frac{n(\mathbf{r})}{N} - \gamma \rho_{bb}(t, \mathbf{r}) - \\ &- \frac{i}{\hbar} \varphi (\rho_{ba}(t, \mathbf{r}) \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}(t, \mathbf{r}) - \rho_{ab}(t, \mathbf{r}) \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r})) - \\ &- \frac{2}{\hbar} \chi \int d\mathbf{r}' \{ 2 \operatorname{Im}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r})) \operatorname{Re}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r}')) Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \}; \end{aligned} \quad (60)$$

для $\rho_{ba}(t, \mathbf{r})$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{ba}(t, \mathbf{r}) &= -\gamma_{ba} \rho_{ba}(t, \mathbf{r}) + i \bar{\omega}_0 \rho_{ba}(t, \mathbf{r}) + \\ &+ \frac{i}{\hbar} (\rho_{aa}(t, \mathbf{r}) - \rho_{bb}(t, \mathbf{r})) \varphi \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r}) - \\ &- \frac{2i}{\hbar} \chi \int d\mathbf{r}' \{ (\rho_{aa}(t, \mathbf{r}) - \rho_{bb}(t, \mathbf{r})) \operatorname{Re}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r}')) Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \}. \end{aligned} \quad (61)$$

Крім того, можна отримати рівняння для квазі-класичного поступового руху частинок:

$$\begin{aligned} m \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(t, \mathbf{r}) &= -m \left(\mathbf{u}(t, \mathbf{r}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \mathbf{u}(t, \mathbf{r}) - \\ &- \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left\{ -\varphi (\rho_{ba}(t, \mathbf{r}) \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}(t, \mathbf{r}) + \rho_{ab}(t, \mathbf{r}) \hat{\varphi} \cdot \mathbf{E}^*(t, \mathbf{r})) + \right. \\ &\left. + 2\chi \int d\mathbf{r}' \{ 2 \operatorname{Re}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r})) \operatorname{Re}(\rho_{ba}(t, \mathbf{r}')) Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \} \right\}. \end{aligned} \quad (62)$$

Останнє доводить справедливість рівнянь (12)–(15).

4. Висновки

У роботі побудовані мікроскопічні та макроскопічні кінетичні рівняння для матричних елементів густини N -атомних станів і атомного поступального руху, які враховують взаємодію між атомами та взаємодію атомів із зовнішнім полем.

З певною модифікацією ця теорія може бути застосована для опису спектроскопічних властивостей при описі колективних ефектів. Описаному тут наближенню можуть відповідати системи достатньо “теплих” та щільних атомарних газів, що опромінюються паралельно чи антипаралельно напрямленими лазерними променями з частотами, близькими до резонансного переходу, і які експериментально досліджені, наприклад, у роботах [3, 6]. Головна відмінність від наближення [27] полягає у тому, що останнє застосовне для опису достатньо “холодних” атомарних газів із згаданими вже обмеженнями та достатньо повільними “випромінювальними” процесами порівняно із часом спонтанного випромінювання, як у роботах [23, 30]. Як можливе застосування аналітичні рішення можуть бути отримані для результуючих макроскопічних рівнянь у різних наближеннях, наприклад, для систем, що складаються з сильного когерентного “накачуючого” поля та протилежного за напрямком слабкого “пробного” поля.

Інший цікавий достатньо фундаментальний результат заслуговує тут декількох слів. Використаний модельний гамільтоніан дозволяє моделювати диполь-дипольну взаємодію між атомами, беручи до уваги вплив взаємодії атомів з “польовим” середовищем, і будувати безпосередньо мікроскопічні кінетичні рівняння для матричних елементів густини станів системи. Інші методи, що використовують відповідні функції Гріна, як у роботах [13–17], можуть бути більш громіздкими і, взагалі-то, не дозволяють формулювати кінетичні рівняння (які включають “близькодю” та “далекодю” в інтегралі “зіткнень”) у зручних для інтерпретації термінах матриці густини.

1. V.A. Sautenkov, H. Van Kampen, E.R. Eliel, and J.P. Woerdman, Phys. Rev. Letters **77**, 3327 (1996).
2. H. Li, V.A. Sautenkov, Y.V. Rostovtsev, and M.O. Scully, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **42**, 065203 (2009).
3. P.R. Hemmer, N.P. Bigelow, D.P. Katz, M.S. Shahriar, L. DeSalvo, and R. Bonifacio, Phys. Rev. Letters **77**, 1468 (1996).
4. J.R. Murray and A. Javan, J. Mol. Spectr. **42**, 1 (1972).
5. R.S. Eng, A.R. Calawa, T.C. Harman, P.L. Kelley, and A. Javan, Appl. Phys. Letters **21**, 303 (1972).

6. J. Huennekens and A. Gallagher, Phys. Rev. A **27**, 1851 (1983).
7. P.W. Anderson, Phys. Rev. **76**, 647 (1949).
8. R.H. Dicke, Phys. Rev. **89**, 472 (1953).
9. M. Baranger, Phys. Rev. **111**, 481 (1958).
10. H.R. Griem, M. Baranger, A.C. Kolb, and G. Oertel, Phys. Rev. **125**, 177 (1962).
11. Yu.A. Vdovin and V.M. Galitskii, JETP **25**, 894 (1967).
12. H.R. Zaidi, Can. J. Phys. **55**, 1229 (1977).
13. A.P. Kazantsev, JETP **24**, 1183 (1966).
14. J. Cooper, Reviews of Modern Physics **39**, 167 (1967).
15. Michael Fleischhauer and Susanne F. Yelin, Phys. Rev. A **59**, 2427 (1999).
16. S.G. Rautian, JETP **91**, 713 (2000).
17. E.A. Titov, Optics and Spectroscopy **96**, 869 (2004).
18. B.R. Mollow, Phys. Rev. A **5**, 2217 (1972).
19. M.O. Scully and S. Zubairy, *Quantum Optics* (University Press, Cambridge, 1997).
20. Zbigniew Ficek and Stuart Swain, *Quantum Interference and Coherence. Theory and Experiments* (Springer Series in Optical Sciences, 2004).
21. F.A. Vorob'ev and R.I. Sokolovskii, Zhurnal Prikladnoi Spektroskopii **13**, No. 1, 66 (1970).
22. R. Bonifacio, B.W.J. McNeil, N. Piovella, and G.R.M. Robb, Phys. Rev. A **61**, 023807 (2000).
23. P.R. Berman, Phys. Rev. A **59**, 585 (1999).
24. L. De Salvo, R. Cannerozzi, R. Bonifacio, E.J. D'Angelo, and L.M. Narducci, Phys. Rev. A **52**, 2342 (1995).
25. T. Lindvall and I. Tittonen, Phys. Rev. A **80**, 032505 (2009).
26. T. Zigdon, A.D. Wilson-Gordon, and H. Friedmann, Phys. Rev. A **80**, 033825 (2009).
27. R.H. Lehmborg, Phys. Rev. A **2**, 883 (1970).
28. M.J. Stephen, J. Chem. Phys. **40**, 669 (1964).
29. M.S. Kim, F.A.M. de Olivera, and P.L. Knight, Optics Communications **70**, 473 (1989).
30. Th. Richter, Annalen der Physik. 7. Folge, Band **40**, Heft 4/5, 234 (1983).
31. M. Ikram, F. Li, and M.S. Zubairy, Phys. Rev. A **75**, 062336 (2007).
32. Paul. R. Berman, Springer-Verlag, Appl. Phys. **6**, 283 (1975).
33. L. Zhang, G.J. Yang, and Z.H. He, Physics Letters A **322**, 166 (2004).
34. M.Z. Smirnov, Quantum Electronics **30**, 821 (2000).
35. G.P. Miroshnichenko and M.Z. Smirnov, Phys. Rev. A **64**, 053801 (2001).
36. Horacio Grinberg, J. Phys. Chem. B **112**(50), 16140 (2008).
37. F. Lastra, S. Wallentowitz, M. Orszag, and M. Hernández, J. of Phys. B: Atom., Mol. and Opt. Phys. **42**, 065504 (2009).
38. N.N. Bogolyubov and N.N. Bogolyubov, jr., *Introduction into Quantum Statistical Mechanics* (Nauka, Moscow, 1984) (in Russian).
39. O.G. Sitenko and V.M. Malnev, *Foundations of Plasma Theory* (Naukova Dumka, Kiev, 1994) (in Ukrainian).

Одержано 12.05.11

ДИНАМІЧЕСКОЕ И МАКРОСКОПИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ГАЗА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ АТОМОВ В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ ОКОЛО РЕЗОНАНСА

А.С. Сижук, С.Н. Ежов

Резюме

Работа посвящена построению микроскопической и макроскопической теорий системы N взаимодействующих двухуровневых атомов в сильном и слабом электромагнитных полях. Построенные микроскопические кинетические уравнения для матричных элементов плотности состояний атомов и атомного движения N -атомной системы учитывают взаимодействие между атомами и между атомами и внешним полем. Соответствующая макроскопическая кинетика построена для одно- и двухчастичной функций распределения матриц плотности атомных состояний. Замкнутая система макроскопических одночастичных уравнений для усредненных элементов матрицы плотности атомных состояний вместе с уравнениями Максвелла позволяют описывать испускательные и поглощательные свойства системы, а также зависимость оптических свойств от плотности частиц в терминах далекодействующего диполь-дипольного взаимодействия между атомами.

DYNAMICAL AND MACROSCOPIC DESCRIPTIONS OF THE STRONGLY DRIVEN GAS MEDIUM OF INTERACTING ATOMS

A.S. Sizhuk¹, S.M. Yezhov²

¹Physics Department, Texas A&M University; (College Station, Texas 77843, USA; e-mail: cannabiss@mail.univ.kiev.ua)

²Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics; (2, Prosp. Academician Glushkov, Kyiv 03022, Ukraine)

Summary

This paper is devoted to constructing the microscopic and macroscopic theories of a system of N interacting two-level atoms coupled with a strong near resonant pumping field and a weak probe electromagnetic one. Microscopic kinetic equations for the density

matrix elements of N -atom states including atomic motion are deduced with regard for the atom-field and atom-atom interactions. The corresponding macroscopic kinetics is built for the one- and two-particle density matrix distribution functions. The self-consistent system of macroscopic one-particle equations for the av-

eraged density matrix elements along with the Maxwell equations allow us to describe the emission and absorption properties of the system and to explain the dependence of the optical properties on the particle density in terms of the “long-range” dipole-dipole interaction between the atoms.