

УДК 535.4+681.7

В. В. Румянцев, А. Е. Рыбалка

Государственное учреждение «Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина»  
283114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 72

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОГО СОСТОЯНИЯ СТРУКТУРНЫХ ЕДИНИЦ МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛЛА И ПОРОЖДАЕМОГО ИМИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

V. V. Rumyantsev, A. Ye. Rybalka

Public institution «A. A. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering»  
283114, Donetsk, R. Luxembourg str., 72

## MATHEMATICAL MODELING OF THE UNSTEADY STATE OF STRUCTURAL UNITS OF A MOLECULAR CRYSTAL AND THE ELECTROMAGNETIC FIELD GENERATED BY THEM

В. В. Румянцев, О. Е. Рибалка

Державна установа «Донецкий физико-технічний інститут ім. О. О. Галкіна»  
283114, м. Донецьк, вул. Р. Люксембург, 72

## МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НЕСТАЦІОНАРНОГО СТАНУ СТРУКТУРНИХ ОДИНИЦЬ МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛА І ПОРОДЖУВАНОВОГО НИМИ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО ПОЛЯ

В работе выполнено математическое моделирование особенностей распространения электромагнитного возбуждения в криокристалле в окрестности частоты дипольно разрешенного перехода. Рассмотрен механизм образования нестационарного состояния структурных единиц молекулярного кристалла и порождаемого ими электромагнитного поля. Получен соответствующий закон дисперсии, характеризующий экситонные поляритоны в исследуемой кристаллической структуре.

**Ключевые слова:** экситонные поляритоны, криокристалл, электромагнитное возбуждение, дипольно разрешенный переход.

The paper presents a mathematical modeling of the features of the propagation of electromagnetic excitation in a cryocrystal in the vicinity of the frequency of a dipole-resolved transition. The mechanism of formation of a non-stationary state of structural units of a molecular crystal and the electromagnetic field generated by them is considered. The corresponding dispersion law characterizing exciton polaritons in the studied crystal structure is obtained.

**Key words:** exciton polaritons, cryocrystal, electromagnetic excitation, dipole resolved transition.

У роботі виконано математичне моделювання особливостей поширення електромагнітного збудження в криокристалі в околиці частоти дипольно дозволеного переходу. Розглянуто механізм утворення нестационарного стану структурних одиниць молекулярного кристала і породжуваного ними електромагнітного поля. Отримано відповідний закон дисперсії, що характеризує екситонні поляритони в досліджуваній кристалічній структурі.

**Ключові слова:** екситонні поляритони, криокристал, електромагнітне збудження, дипольно дозволений перехід.

## Введение

В настоящее время в физике твердого тела выделяются два способа теоретического описания свойств кристаллических структур и явлений в них:

1. Кристалл считают совокупностью отдельных атомов с заданными свойствами. А различные явления, протекающие в нем, рассматривают, исходя из атомных локальных процессов, «подправленных» за счет размещения атомов в кристаллической решетке. Каждый атом испытывает поляризацию во внешнем по отношению к нему поле. Вследствие взаимодействия атомов локальные возбуждения распространяются по твердому телу.

2. Важнейшей особенностью кристалла считают объединение атомов в решетку с заданной структурой. И различные явления в кристалле рассматривают на основе коллективных свойств твердого тела, его элементарных возбуждений. Общим для коллективных возбуждений кристалла является тот факт, что каждому состоянию в их энергетическом спектре соответствует определенное значение волнового вектора, тогда как местоположение состояния является неопределенным. В этом смысле они делокализованы. Такое (делокализованное) описание находим в зонной теории.

В данной работе использован первый подход, в соответствии с которым кристалл считают состоящим из отдельных структурных единиц (СЕ). Причем на каждую СЕ кристалла действует внутрискристаллическое нестационарное электромагнитное поле (которое иногда называют локальным, эффективным или действующим), отождествляемое с полем излучения остальных СЕ, расположенных определенным образом вокруг данной. Связанные в нейтральных СЕ заряды, осциллируя с малыми амплитудами вокруг положений равновесия, излучают поле, поляризующее прочие СЕ. С точки зрения квантовой теории, поляризация молекулы представляет собой возбуждение ее электронной оболочки (однако электроны по-прежнему остаются локализованными в окрестности данного узла кристаллической решетки). Самосогласованный процесс распространения возбуждения (реального и виртуального) СЕ кристалла и электромагнитного поля, создаваемого этими СЕ, называют движением поляритонов.

При изучении оптических явлений в кристаллах в окрестности частот экситонных переходов, как справедливо отмечает С. И. Пекар [1], возникает необходимость учитывать явление пространственной дисперсии (ПД), то есть зависимость диэлектрической проницаемости  $\hat{\epsilon}$  как от частоты  $\omega$ , так и от волнового вектора  $\mathbf{k}$  электромагнитной волны, и такое ее проявление, как добавочные световые волны (ДСВ). Рассмотрим подробнее особенности дисперсии экситонных поляритонов, отражающие наличие ДСВ в окрестности частот экситонного дипольно разрешенного перехода в атомарном кристалле.

## Теоретическая модель

В соответствии с обозначенным выше способом описания кристаллических структур (см., в частности, [2], [3–5]) используем полуклассический подход. В рамках этого подхода нестационарное состояние  $\Psi_s^l$  каждой СЕ ( $l$  – номер ячейки кристалла,  $s$  – номер СЕ в ячейке) с соответствующей плотностью заряда и тока описывается квантово-механически, исходя из теории возмущений, зависящих от времени. В то же время действующее на СЕ электромагнитное поле описываем классически. Волновую функцию  $\Psi_s^l$ , которая удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_s^l}{\partial t} = (\hat{H}_s^l + \hat{W}_s^l) \Psi_s^l, \quad (1)$$

будем искать в виде:

$$\Psi_s^l = \sum_i c_{si}^l(t) \Psi_{si}^l(t) \exp(-i \frac{E_{si}}{\hbar} t), \tag{2}$$

В уравнении (1)  $\hat{H}_s^l$  – гамильтониан ( $s$ )-й СЕ, включающий и суммарный кулоновский потенциал остальных СЕ, находящихся в основном состоянии  $\Psi_{s_0}^l$ . Малое

возмущение  $W_s^l = W_{s+}^l \exp(i\omega t) + W_{s-}^l \exp(-i\omega t)$ , действующее на ( $s$ )-ю СЕ со стороны электромагнитной волны, порождаемой остальными СЕ, обязано частичному виртуальному их возбуждению.  $\Psi_{s_i}^l, E_{s_i}$  – соответственно волновые функции и собственные значения энергии СЕ в отсутствии возмущения. Каждая СЕ находится главным образом в основном состоянии (поскольку поле полагаем слабым), то есть

$c_{s_i}^l \ll 1$  (для  $i \neq 0$ ), из условия нормировки  $\sum_i |c_{s_i}^l|^2 = 1$  следует, что  $c_{s_0}^l \approx 1$ .

Перекрытием электронных оболочек, а следовательно, и обменным взаимодействием в данном случае можно пренебречь.

Подставляя (2) в (1), получим в первом порядке теории возмущений явный вид коэффициентов  $c_{s_i}^l(t)$  в выражении (2), определяющем волновую функцию  $\Psi_s^l$ :

$$c_{s_i}^l(t) = \frac{\langle is | W_{s+}^l | 0s \rangle}{E_{s_i} - E_{s_0} + \hbar\omega} \exp(i \frac{E_{si} - E_{s_0} + \hbar\omega}{\hbar} t) - \frac{\langle is | W_{s-}^l | 0s \rangle}{E_{si} - E_{s_0} - \hbar\omega} \exp(i \frac{E_{si} - E_{s_0} - \hbar\omega}{\hbar} t) \tag{3}$$

Считаем, что в пределах СЕ взаимодействие осуществляется мгновенно, но взаимодействие различных СЕ – запаздывающее. Поле, как и его источники (возбужденные СЕ) – в вакууме (то есть введение понятия «среда» становится излишним). Таким образом, электромагнитное поле описывается уравнениями Максвелла, которые при выполнении условия Лоренца принимают вид:

$$\square \vec{A} \equiv \Delta \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = - \sum_{s'l'} \frac{4\pi}{c} \vec{j}_{s'l'}, \quad \square \varphi \equiv \Delta \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = - \sum_{s'l'} 4\pi \rho_{s'l'}, \tag{4}$$

$\varphi(\vec{r}, t), \vec{A}(\vec{r}, t)$  – скалярный и векторный потенциалы, порождаемые в точке  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$  окружающими ее СЕ. Нестационарные состояния  $\Psi_s^l$  СЕ определяют соответствующие плотности  $\rho_s^l, \vec{j}_s^l$  зарядов и токов:

$$\rho_s^l(\vec{r}, t) = \rho_{s0}^l + 2 \operatorname{Re} \sum_i^l c_i^l(t) \exp(-i \frac{E_{si} - E_{s0}}{\hbar} t) \sum_{j=1}^N \int \Psi_{s0}^l * \Psi_{si}^l \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \Pi d\vec{r}_j \quad (5)$$

$$\vec{j}_s^l(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2mc} \sum_i^l \left\{ c_i^l(t) \exp(-i \frac{E_{si} - E_{s0}}{\hbar} t) \sum_{j=1}^N \int \left( \Psi_{si}^l \nabla_j \Psi_{s0}^l * - \Psi_{s0}^l * \nabla_j \Psi_{si}^l \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \Pi d\vec{r}_j \right\} + \text{к. с.}, \quad (6)$$

где  $\mathbf{r}_j$  – координата  $j$ -го электрона в  $(\vec{r}_s^l)$ -й СЕ. Решениями уравнений (4) являются соответственно выражения:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \sum_{s'l'} \int \frac{\vec{j}_{s'l'}^l(\vec{r}', t - \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{c})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}', \quad \varphi(\vec{r}, t) = \sum_{s'l'} \int \frac{\rho_{s'l'}^l(\vec{r}', t - \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{c})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'. \quad (7)$$

Используя формулы (7), получаем возмущение  $W_s^l$  СЕ, расположенной в точке  $\vec{r}_s^l$ , со стороны электромагнитного поля:

$$W_s^l(t) = \sum_{j=1}^N \left[ e \varphi_s^l(\vec{r}_j, t) - \frac{1}{c} \vec{A}_s^l(\vec{r}_j, t) \cdot \vec{j}_s^l \right]. \quad (8)$$

Заметим, что в (8)  $\varphi_s^l, \vec{A}_s^l$  отличаются от соответствующих величин в (7) отсутствием в суммах слагаемых с  $s=s', l=l'$  (таким образом, исключается «самодействия» СЕ). Описание процесса распространения электромагнитной волны в немагнитном кристалле в рамках представленной модели сводится к задаче самосогласованного решения уравнений (1) – (8). Зная  $\Psi_s^l$ , находим плотности зарядов  $\rho_s^l$  и токов  $\vec{j}_s^l$ , которые создают в окрестности  $(\vec{r}_s^l)$ -й молекулы электрическое поле с потенциалами (7). Применение метода Эвальда [6] для вычисления решеточных сумм приводит к системе уравнений относительно Фурье-компонент действующего поля  $\vec{E}_s^l(\omega, \vec{k}$  (или электрических моментов молекул). Из условия разрешимости этой системы следует закон дисперсии, характеризующий экситонные поляритоны в кристалле.

## Результаты и обсуждение

Рассмотрим подробнее в молекулярном кристалле с центрально-симметричной кубической решеткой электромагнитную волну с частотой  $\omega$  вблизи дипольно разрешенного перехода. Фотопереход полагаем истинно сильным (по терминологии [7]) –

это позволит пренебречь затуханием «бегущего» от узла к узлу возбуждения. При этом Фурье-компоненты среднего дипольного момента  $\hat{P}_s^{\omega, \vec{k}}$  СЕ определяет выражение:

$$\hat{P}_s^{\omega, \vec{k}} = \hat{\alpha}^s(\omega) \cdot \vec{E}_s^{\omega, \vec{k}}, \quad \hat{\alpha}^s = \sum_i \frac{2(E_{si} - E_{s0}) \langle 0 | \vec{P}_s | i \rangle \langle i | \vec{P}_s | 0 \rangle}{(E_{si} - E_{s0})^2 - (\hbar\omega)^2}, \quad (9)$$

где  $\hat{\alpha}^s$  – дипольная поляризуемость СЕ,  $(E_{si} - E_{s0})$  – энергия дипольного ее возбуждения. Считаем, что изменяется лишь состояние электронов при неизменном положении ядер атомов, поскольку в рассматриваемом диапазоне частот движением ядер можно пренебречь

В общем случае при таких обстоятельствах Фурье-амплитуда действующего на каждую СЕ кристалла поля, как следует из (1.2.12) в работе [8], равна:

$$\vec{E}_s^{\omega, \vec{k}} = \frac{2}{\Delta_{s'}} \sum_{ss'} \hat{\varphi}^{ss'}(\omega, \vec{k}) \cdot \vec{P}_{s'}^{\omega, \vec{k}}. \quad (10)$$

Используя представление матрицы  $\hat{\varphi}^{ss'}$  в длинноволновом приближении [8], [9], а

также вводя безразмерную поляризуемость СЕ  $\hat{A}^s(\omega) \equiv \frac{2}{\Delta} \hat{\alpha}^s(\omega)$ , из (10) получаем

уравнение относительно Фурье-амплитуд  $\vec{P}_{s'}^{\omega, \vec{k}}$ :

$$\sum_{s'} \left( \begin{array}{c} \hat{A}_{s'}^{-1} \delta_{ss'} - \left( \frac{2\pi}{3} \hat{I} + 2\pi \frac{\vec{K}\vec{K} - \frac{\omega^2 a^2}{c^2} \hat{I}}{K^2 - \frac{\omega^2 a^2}{c^2}} \right) \theta - a_{ss'}^{(1)} K^2 \hat{I} - a_{ss'}^{(2)} \vec{K}\vec{K} - a_{ss'}^{(3)} \vec{K}\vec{K}; \end{array} \right) \cdot \vec{P}_{s'}^{\omega, \vec{k}} = 0. \quad (11)$$

Параметр  $\theta$  равен 1 для простой кубической решетки, 2 – для ОЦК и 3 – для ГЦК. Символическая запись  $\vec{K}\vec{K}; \vec{P}$  обозначает вектор  $P_1 K_1^2 \vec{e}_1 + P_2 K_2^2 \vec{e}_2 + P_3 K_3^2 \vec{e}_3 \equiv K^2 \hat{M} \cdot \vec{P}$ , где

$$M_{ij} = \sum_{ij} \left( e_1^i e_1^j e_1^m e_1^n + e_2^i e_2^j e_2^m e_2^n + e_3^i e_3^j e_3^m e_3^n \right) s_m s_n, \quad (12)$$

$\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$  – декартовы орты,  $\vec{s} = \vec{k} / k$ , значения коэффициентов  $a_{ss'}^{(i)}$  для кристаллических решеток кубической сингонии соответственно равны для  $s=l$ :

$$a^{(1)} = -0,2391, a^{(2)} = 0,2900, a^{(3)} = 0,2107.$$

В случае кристаллов инертных элементов, имеющих простую ГЦК решетку ( $s=1$ ), выражение (11) с помощью проекционных тензоров  $\hat{\Pi}_{\parallel} = \frac{\vec{k}\vec{k}}{k^2}$ ,  $\hat{\Pi}_{\perp} = \hat{I} - \frac{\vec{k}\vec{k}}{k^2}$  преобразуется в систему уравнений:

$$\begin{cases} \left[ A^{-1}(\omega) + \frac{4\pi}{3}\theta - (a^{(1)} + a^{(2)})K^2 \right] \bar{P}_{\parallel} - a^{(3)}K^2 (\hat{M}_{\parallel,\parallel} \cdot \bar{P}_{\parallel} + \hat{M}_{\parallel,\perp} \cdot \bar{P}_{\perp}) = 0, \\ \left[ A^{-1}(\omega) - \left( \frac{2\pi}{3} - 2\pi \frac{K_0}{K^2 - K_0^2} \right) \theta - a^{(1)}K^2 \right] \bar{P}_{\perp} - a^{(3)}K^2 (\hat{M}_{\perp,\parallel} \cdot \bar{P}_{\parallel} + \hat{M}_{\perp,\perp} \cdot \bar{P}_{\perp}) = 0, \end{cases} \quad (13)$$

где  $\bar{P}_{\parallel} = \hat{\Pi}_{\parallel} \cdot \vec{P}_s \omega, \vec{k}$ ,  $\bar{P}_{\perp} = \hat{\Pi}_{\perp} \cdot \vec{P}_s \omega, \vec{k}$  – соответственно продольная и поперечная составляющие Фурье-амплитуды системы линейных однородных уравнений (13) следует дисперсионное соотношение:

$$A_1(\omega, \vec{K}) A_2(\omega, K) \left[ A_2(\omega, K) - a^{(3)}K^2 (1 - s_1^4 - s_2^4 - s_3^4) \right] = 0 \quad (14)$$

Первый сомножитель в (14)

$$A_1(\omega, \vec{K}) = A^{-1}(\omega) + \frac{4\pi}{3}\theta - K^2 \left[ a^{(1)} + a^{(2)} + a^{(3)}(s_1^4 + s_2^4 + s_3^4) \right]$$

определяет спектр продольных экситонов в окрестности частоты  $\omega_{f_0}$   $f$ -го изолированного дипольно разрешенного перехода в спектре СЕ (рис. 1):

$$\Omega_{\parallel}^2(\vec{k}) = 1 + \frac{A_0 - A_{\infty}}{1 + \frac{4\pi}{3}\theta A_{\infty}} \left\{ \frac{4\pi}{3}\theta - \frac{K^2}{1 + \frac{4\pi}{3}\theta A_{\infty}} \left[ a^{(1)} + a^{(2)} + a^{(3)}(s_1^4 + s_2^4 + s_3^4) \right] \right\} \quad (15).$$

$\Omega \equiv \omega / \omega_{f_0}$ ,  $A_0, A_{\infty}$  – в однорезонансном приближении соответственно статическая и высокочастотная безразмерные атомарные поляризуемости. В окрестности одной из резонансных частот  $\omega_{f_0}$  общее выражение для поляризуемости  $A(\omega)$

может быть приближенно представлено в виде:  $A(\Omega) = A_{\infty} + (A_0 - A_{\infty}) \left( 1 - \Omega^2 \right)^{-1}$ , то

есть  $A_{\infty}$  – значение  $A(\omega)$  на плато справа от резонанса, а  $A_0$  – слева. Заметим, что статическая  $\varepsilon_0$  и высокочастотная  $\varepsilon_{\infty}$  диэлектрические проницаемости кристалла

$$\text{связаны с } A_0, A_{\infty} \text{ соотношением Лорентц-Лоренца } A_{0(\infty)} = \frac{3 \varepsilon_{0(\infty)} - 1}{2\pi \varepsilon_{0(\infty)} + 2}.$$

При пренебрежении пространственной дисперсией (ПД) групповая скорость  $\frac{d\omega_{\parallel}}{d\vec{k}} = 0$  (см. рис.1.1 в [8]), следовательно, в этом случае нужно говорить «скорее о

колебаниях, чем о бегущих волнах» [10]. Второй и третий множители уравнения (14) при  $A_2(\omega) = A^{-1}(\omega) - \left(\frac{2\pi}{3} - 2\pi \frac{K_0^2}{K^2 - K_0^2}\right)\theta - a^{(1)}K^2$  определяют в криокристаллах инертных элементов в окрестности частоты  $\omega_{f0}$  спектр поперечных (дипольных) экситонных поляритонов (рис. 1):

$$\Omega_{\pm}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left[ \Omega_{\perp 1(2)}^2(\vec{k}) \frac{\epsilon_0}{\epsilon_{\infty}} + \frac{c^2 k^2}{\omega_{f0}^2 \epsilon_{\infty}} \right] \pm \sqrt{[\dots]^2 - \frac{4c^2 k^2 \Omega_{\perp 1(2)}^2(\vec{k})}{\omega_{f0}^2 \epsilon_{\infty}}} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (16)$$

В правой части равенства (16) под знаком корня символ [...] обозначает выражение, стоящее в квадратных скобках перед корнем. В предельных случаях дисперсионные кривые (рис. 1) близки к спектрам невзаимодействующих между собой систем: экситонов и поперечных фотонов.

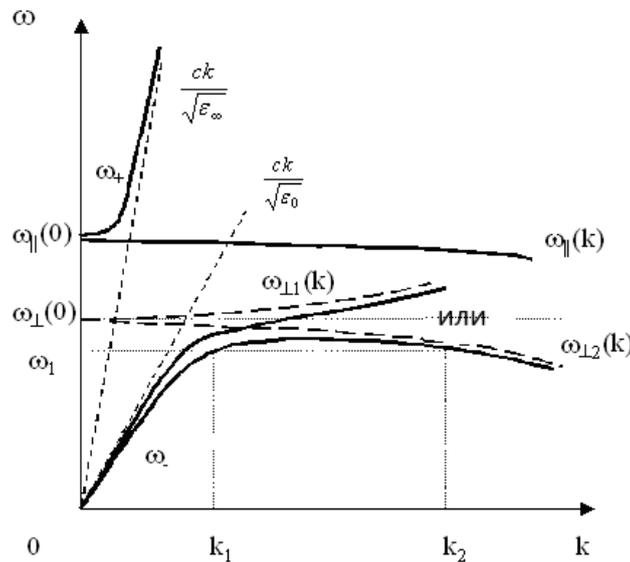


Рисунок 1 – Дисперсионные кривые  $\omega(\vec{k})$  поляритонов в атомарных криокристаллах

Нижняя поляритонная кривая  $\Omega_{(-)}(\vec{k})$  переходит от характерной (в области малых  $k$ ) для низкочастотных фотонов линейной зависимости  $\omega = ck / \sqrt{\epsilon_0}$  к спектральной области невзаимодействующих с электромагнитным полем поперечных экситонов  $\Omega = \Omega_{\perp 1}(\vec{k})$  или  $\Omega = \Omega_{\perp 2}(\vec{k})$  в области больших  $k$ :

$$\Omega_{\perp 1}^2(\vec{k}) = 1 - \frac{A_0 - A_{\infty}}{1 - \frac{2\pi}{3} \theta A_{\infty}} \left( \frac{2\pi}{3} + \frac{K^2}{1 - A_{\infty} \theta 2\pi/3} a^{(1)} \right), \quad (17)$$

$$\Omega_{\perp 2}^2(\vec{k}) = 1 - \frac{A_0 - A_{\infty}}{1 - \frac{2\pi}{3} \theta A_{\infty}} \left\{ \frac{2\pi}{3} + \frac{K^2}{1 - A_{\infty} \theta 2\pi/3} \left[ a^{(1)} + a^{(3)} \left( 1 - s_1^4 + s_2^4 + s_3^4 \right) \right] \right\}.$$

Верхняя поляритонная кривая  $\Omega_{(+)}(\vec{k})$  вначале совпадает с частотой продольного экситона  $\Omega_{\parallel}(0)$ , а затем, в области больших  $k$ , трансформируется в линейную зависимость  $\omega = ck / \sqrt{\varepsilon_{\infty}}$ , описывающую спектр высокочастотных фотонов. В промежуточной области «бутылочного горла» ( $c^2 k^2 / \omega_{f_0}^2 \varepsilon_{\infty}$ )  $\sim \Omega_{\perp}^2(k)$  в результате запаздывающего взаимодействия осуществляются связанные колебания этих систем. Как видно из закона дисперсии экситонных поляритонов (16), некоторой частоте  $\omega_1$  из окрестности  $\omega_{\perp}(0)$  (см. рис. 1) при учете ПД в (17) соответствуют две волны (обычная и добавочная). Эти волны имеют одинаковую поляризацию и направление распространения  $\vec{s}$ , но отличаются величиной волнового вектора:  $k_1 \neq k_2$ .

## Заключение

В рамках микроскопического подхода [8], [11] представлено математическое моделирование проявления пространственной дисперсии света в атомарном кристалле в модели запаздывающей передачи энергии возбуждения между отдельными его атомами. В частности, изучены особенности дисперсии экситонных поляритонов, отражающие наличие добавочных световых волн в исследуемой окрестности частот экситонного дипольно разрешенного перехода. Оказалось возможным ответить на вопрос, как сказывается на законах дисперсии элементарных возбуждений дискретность структуры кристалла. Представленный в работе микроскопический подход получил дальнейшее развитие в работах по оптической анизотропии алмазоподобных полупроводников [12] в окрестности частоты экситонного резонанса.

## Список литературы

1. Пекар С. И. Кристаллооптика и добавочные световые волны [Текст] / Пекар С. И. – Киев : Наукова думка, 1982.
2. Толпыго К. Б. Распространение света в кристалле как самосогласованный процесс передачи возбуждения с запаздыванием [Текст] / К. Б. Толпыго // Одиннадцатое совещание по теории полупроводников (Ужгород, октябрь, 1983). – Ужгород : Изд-во Ужгородского ун-та, 1983. – С. 425–426.
3. Боргардт А. А. Пространственно-временная дисперсия, диэлектрическая проницаемость и принцип причинности [Текст] / А. А. Боргардт, К. Б. Толпыго // УФЖ. – 1978. – Т. 23, № 4. – С. 607–615.
4. Толпыго К. Б. Распространение света в кристалле как запаздывающая передача возбуждения его атомов [Текст] / К. Б. Толпыго // УФЖ. – 1986. – Т. 31, № 2. – С. 178–187.
5. Румянцев В. В. Распространение света в кристалле в окрестности квадрупольно разрешенного перехода [Текст] / В. В. Румянцев, К. Б. Толпыго // УФЖ. – 1985. – Т. 30, № 5. – С. 699–707.
6. Ewald P. P. Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale [Текст] / Ewald P. P. // Ann. Phys. – 1921. – Bd. 64, N 4. – S. 253–287.
7. Бродин М. С. Поляритоны в кристаллооптике [Текст] / М. С. Бродин, Э. Н. Мясников, С. В. Марисова – Киев : Наукова думка, 1984.
8. Румянцев В. В. Взаимодействие электромагнитного излучения и легких частиц с несовершенными кристаллическими средами [Текст] / Румянцев В. В. – Донецк : Норд-Пресс, 2006. – 347 с.
9. Толпыго К. Б. Спектр собственных колебаний NaCl с учетом деформации ионов [Текст] / К. Б. Толпыго, И. Г. Заславская // УФЖ. – 1956. – Т. 1, № 3. – С. 226–244.
10. Агранович В. М. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов [Текст] / В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург. – М. : Наука, 1979. – 432 с.

11. Румянцев В. В. Оптическая анизотропия атомарных кристаллов в окрестности экситонного резонанса [Текст] / В. В. Румянцев // Кристаллография. – 1991. – Т. 36, Вып. 6. – С. 1346–1351.
12. Румянцев В. В. Моделирование генерации экситонных поляритонов в алмазоподобных полупроводниках полем движущейся  $\beta$ -частицы [Текст] / В. В. Румянцев // Проблемы искусственного интеллекта. – 2019. – № 1 (12). – С. 27–40.

## References

1. Pekar S. I. *Kristaloptika i dobavochnyye svetovyye volny* [Crystal optics and additional light waves]. Kiyev, Naukova dumka, 1982.
2. Tolpygo K. B. Rasprostraneniye sveta v kristalle kak samosoglasovanny protsess peredachi voz-buzhdeniya s zapazdyvaniyem [Propagation of light in a crystal as a self-consistent process of transmission of excitation with a delay]. *Odinnadtsatoye soveshchaniye po teorii poluprovodnikov* [Eleventh meeting on the theory of semiconductors] (Uzhgorod, oktyabr', 1983), Uzhgorod, Izd-vo Uzhgorodskogo un-ta, 1983, S. 425–426.
3. Borgardt A. A., Tolpygo K. B. Prostranstvenno-vremennaya dispersiya, dielektricheskaya pronitsa-yemost' i printsip prichinnosti [Spatio-temporal dispersion, dielectric constant and the principle of causality]. *UFZh* [UFZh], 1978, T. 23, No. 4, S. 607–615.
4. Tolpygo K. B. Rasprostraneniye sveta v kristalle kak zapazdyvayushchaya peredacha voz-buzhdeniya yego atomov [Propagation of light in a crystal as a delayed transfer of excitation of its atoms]. *UFZh* [UFZh], 1986, T. 31, No. 2, S. 178–187.
5. Rummyantsev V. V., Tolpygo K. B. Rasprostraneniye sveta v kristalle v okrestnosti kvadropol'no razreshennogo perekhoda [Propagation of light in a crystal in the vicinity of a quadrupole allowed transition]. *UFZh* [UFZh], 1985, T. 30, No. 5, S. 699–707.
6. Ewald P. P. Die Berechnung optischer und elektrostatischer Getterpotentiale. *Ann. Phys*, 1921, Bd. 64, N 4, S. 253–287.
7. Brodin M. S., Myasnikov E. N., Marisova S. V. *Polyaritony v kristaloptike* [Polaritons in crystal optics], Kiyev, Naukova dumka, 1984
8. Rummyantsev V. V. *Vzaimodeystviye elektromagnitnogo izlucheniya i legkikh chastits s nesovershennymi kristallicheskimy sredami* [Interaction of electromagnetic radiation and light particles with imperfect crystalline media], Donetsk, Nord-Press, 2006, 347 s.
9. Tolpygo K. B., Zaslavskaya I. G. Spektr sobstvennykh kolebaniy NaCl s uchetom deformatsii ionov [The spectrum of natural vibrations of NaCl taking into account the deformation of ions]. *UFZh* [UFZh], 1956, T. 1, No. 3, S. 226–244.
10. Agranovich V. M., Ginzburg V. L. *Kristaloptika s uchetom prostranstvennoy dispersii i teoriya eksitonov* [Crystal optics taking into account spatial dispersion and the theory of excitons], M., Nauka, 1979, 432 s.
11. Rummyantsev V. V. Opticheskaya anizotropiya atomarnykh kriokristallov v okrestnosti eksitonno-go rezonansa [Optical anisotropy of atomic cryocrystals in the vicinity of exciton resonance]. *Kristallografiya* [Crystallography], 1991, T. 36, Vyp. 6, S. 1346–1351.
12. Rummyantsev V. V. Modelirovaniye generatsii eksitonnykh polyaritonov valmazopodobnykh poluprovod-nikakh polem dvizhushcheyasya b-chastitsy [Simulation of exciton polariton generation in diamond-like semiconductors by the field of a moving b-particle]. *Problemy iskusstvennogo intellekta* [Problems of artificial intelligence]. 2019, No 1 (12), P. 27-40.

## RESUME

V. V. Rummyantsev, A. Ye. Rybalka

*Mathematical Modeling of the Unsteady State of Structural Units*

*of a Molecular Crystal and the Electromagnetic Field Generated by Them*

Study of the features of the dispersion of exciton polaritons reflecting the presence of additional light waves in the vicinity of the frequencies of the exciton dipole allowed transition using the corresponding mathematical model and the Ewald method for calculating lattice sums.

Cryocrystals, a mathematical model of the exciton polariton propagation in a crystal lattice, the Ewald method for calculating lattice sums.

The mechanism of formation of a non-stationary state of structural units of a molecular crystal and the electromagnetic field generated by them is considered. The features of the dispersion of excitonic polaritons, reflecting the presence of additional light waves in the vicinity of the frequencies of the excitonic dipole-allowed transition in an atomic cryocrystal, are investigated.

Within the framework of the microscopic approach mathematical modeling of the manifestation of spatial dispersion of light in an atomic cryocrystal in the model of delayed transfer of excitation energy between its individual atoms is presented. In particular, the features of the dispersion of exciton polaritons, reflecting the presence of additional light waves in the investigated vicinity of the frequencies of the exciton dipole allowed transition, are studied. It turned out to be possible to answer the question of how the discreteness of the crystal structure affects the laws of dispersion of elementary excitations

## РЕЗЮМЕ

*В. В. Румянцев, А. Е. Рыбалка*

*Математическое моделирование нестационарного состояния структурных единиц молекулярного кристалла и порождаемого ими электромагнитного поля*

Изучение особенностей дисперсии экситонных поляритонов, отражающих наличие добавочных световых волн в окрестности частот экситонного дипольно разрешенного перехода с использованием соответствующей математической модели и метода Эвальда для расчета решеточных сумм.

Криокристаллы, математическая модель процесса распространения экситонного поляритона в кристаллической решетке, метод Эвальда для расчета решеточных сумм.

Рассмотрен механизм образования нестационарного состояния структурных единиц молекулярного кристалла и порождаемого ими электромагнитного поля. Исследованы особенности дисперсии экситонных поляритонов, отражающие наличие ДСВ в окрестности частот экситонного дипольно разрешенного перехода в атомарном криокристалле.

В рамках микроскопического подхода представлено математическое моделирование проявления пространственной дисперсии света в атомарном криокристалле в модели запаздывающей передачи энергии возбуждения между отдельными его атомами. В частности, изучены особенности дисперсии экситонных поляритонов, отражающие наличие добавочных световых волн в исследуемой окрестности частот экситонного дипольно разрешенного перехода. Оказалось возможным ответить на вопрос, как сказывается на законах дисперсии элементарных возбуждений дискретность структуры кристалла.

Статья поступила в редакцию 07.06.2021.