

УДК 621.373.826+544.53+517.912

**В. А. Савва**

Белорусский государственный технологический университет

**ЛАЗЕРЫ, СЕЛЕКТИВНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ МОЛЕКУЛ  
И УПРАВЛЕНИЕ ХИМИЧЕСКИМИ РЕАКЦИЯМИ – ФЕМТОХИМИЯ**

Статья содержит физические принципы работы и этапы создания уникальных приборов – мазеров и лазеров, изменивших жизнь и широко используемых в разнообразных технологиях. Кратко перечислены уникальные свойства лазерного излучения, обеспечивающие его широкое применение. Большой прогресс в создании сверхкоротких лазерных импульсов позволил когерентно и селективно возбуждать молекулы, создавая в них особые когерентные состояния, осуществлять управление химическими реакциями и открыл путь к созданию квантовых компьютеров. С применением сверхкоротких лазерных и электронных импульсов удалось «увидеть» в деталях ход химических реакций. В статье представлен метод построения точного решения уравнений когерентной динамики молекул (многоуровневых квантовых систем), использующий преобразование и спектры Фурье, ортогональные полиномы дискретной переменной в Фурье-пространстве, статистические функции распределения вероятностей. Показано, что решение сложных проблем требует специалистов с широким арсеналом знаний и методов из различных областей науки.

Предназначена для преподавателей и всех, кто использует лазеры в технологиях, для студентов, желающих расширить сведения о разных разделах знаний, для тех, кто понимает современную потребность не только быть высококвалифицированным специалистом, но и иметь широкий научный кругозор, ибо крупные достижения возникают на стыке наук, на границах наук и технологий.

**Ключевые слова:** вынужденное испускание, мазер, лазер, фемтохимия, когерентная динамика возбуждения квантовых систем, точные решения, ортогональные полиномы в пространствах Фурье.

**V. A. Savva**

Belarusian State Technological University

**LASERS, SELECTIVE EXCITATION OF ATOMS AND MOLECULES  
AND CONTROL OF CHEMICAL REACTIONS – FEMTOCHEMISTRY**

The article contains physical principles of work and stages of creating unique sources of coherent radiation (masers and lasers). They have changed life and are used in diverse technologies widely. This paper contains description of the unique properties of laser radiation which provided its various applications. Great progress in the creation of ultrashort laser pulses made it possible to excite molecules coherently and selectively, creating special coherent states in them to control chemical reactions and opened the way to the creation of quantum computers. The method described allowed one "to see" the dynamics of chemical reactions in details with the use of laser and electronic pulses. Also a new way of construction of exact solution of coherent dynamics equations is stated for multilevel quantum systems. It uses the Fourier transform and spectra, orthogonal polynomials of a discrete variable in Fourier space, and statistical distribution functions. The examples show that the solution of complex problems requires specialists with a wide range of knowledge and methods from different fields of science.

For teachers and all those who use lasers and chemical reactions in technologies, for students wanting to expand knowledge, for those who understand the modern need to be not only a narrow specialist, but also to be more open minded, because major achievements occur at the intersection of fields of science, at the boundaries of science and technologies.

**Key words:** stimulated emission, maser, laser, femtochemistry, coherent dynamics of excitation of quantum systems, exact solutions, orthogonal polynomials in a Fourier space.

**Введение.** Свет – электромагнитное излучение оптического диапазона, играет огромную роль в природе и в жизни. Мы видим мир благодаря способности воспринимать свет. До создания лазера *световая волна* была разве что в учебниках, но не в природе, не в устройствах, созданных человеком. Костер, свеча, лампа (накаливания, люминесцентная) – это *шумовые*

*источники света.* Причина в том, что физический процесс производства света в них – *спонтанное испускание* оптического излучения. Это статистический (случайный, шумовой) процесс. В лазере «работает» иной процесс создания света – *вынужденное испускание* излучения. Существование его было предсказано А. Эйнштейном в 1917 г., экспериментально

подтверждено примерно через 30 лет и в 1960 г. впервые реализовано в оптическом диапазоне в устройстве, которое называют *лазер*.

**Новый тип генераторов электромагнитного излучения сверхвысоких радиочастот и света – мазеры и лазеры.** Название LASER происходит от первых букв фразы: Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation – усиление света посредством вынужденного испускания излучения.

Человек долго шел к постижению сущности спонтанного и вынужденного испускания, того, что представляет собой свет, как его использовать. Линзы, очки, микроскоп, телескоп известны давно. Сначала люди поняли электрические и магнитные явления, установили их тесную связь, когда они изменяются во времени. Майкл Фарадей открыл закон электромагнитной индукции, что позволило создать электрогенераторы и электромоторы, а также привело к формированию цивилизации нового уровня. Дж. Максвелл сформулировал знаменитые уравнения, предсказал существование электромагнитного излучения, показал, что это волновой процесс, причем электромагнитные волны обладают огромной скоростью и в отличие от звуковых волн могут распространяться в пустоте.

Генрих Герц создал первое в мире устройство (вibrator, колебательный контур), производящее электромагнитное излучение – радиоволны. Максвелл предположил, что свет такое же излучение, только очень малых длин волн и высоких частот. Радиодиапазон осваивался многие десятилетия: радио, телевидение, радиотелескопы. Были разработаны методы модуляции радиоволн, на них записывают речь, музыку, изображение. Пришло понимание, что диапазон этого излучения огромен, простирается от километровых радиоволн к волнам все меньших длин и более высоким частот. В этом гигантском диапазоне есть «узенькое окошко» – такие волны и есть свет, который мы способны видеть! Природа скупко одарила нас способностью непосредственно ощущать лишь «крохотный кусочек» электромагнитного диапазона. Но она не поскупилась, дав человеку уникальный интеллект, способный развиваться, совершенствоваться, обучаться, не только ощущать явления природы, но и познавать их сущность. Человек создал огромную разветвленную систему образования, мощную науку и художественную культуру. Много веков он идет этим трудным путем, все убыстряющимся темпом, не утрачивая любопытства познавать мир Природы, постигать тайны Вселенной, жизни, себя самого, искать ответы на вопросы: зачем он здесь, в чем смысл его жизни и деяний. Стрем-

ление человека познать все возможное, продвигаться вглубь и вширь побудило перейти от генерации радиоволн в оптическую область и далее к рентгеновскому и гамма-излучению.

Важным достижением на этом пути было освоение СВЧ (сверхвысоких частот), т. е. микроволнового (по-английски) излучения. Это волны сантиметрового диапазона. Далее стало ясно, что продвигаться в сторону малых длин волн с колебательным контуром, пластинами и проволочками, с радиолампами и потоком электронов в них, с резонаторами в виде металлических коробочек уже невозможно. Нужен иной принцип. И родилась новая идея: генераторами могут быть сами *атомы и молекулы* – квантовые объекты. Их описывает квантовая физика. Они хорошо излучают свет в широком диапазоне частот, правда, это шумовое излучение. Как заставить их испускать короткие радио- и световые когерентные волны? Так возникла идея квантовой радиофизики (теперь почти забытый термин), или квантовой электроники. Радиофизики «вспомнили», что Альберт Эйнштейн в работе 1917 г. предсказал существование иного процесса излучения света квантовыми системами – *вынужденное испускание*. Но как его реализовать, сделать доминирующим? Оно почти не наблюдается в оптической области, где господствует спонтанное испускание света. В радиодиапазоне спонтанное испускание ничтожно, но при переходе к более высоким частотам оно резко растет, пропорционально кубу частоты! Как сделать, чтобы вынужденное испускание усилило затравочные шумы с помощью обратной связи – резонатора, как в радиофизике, и создавало бы когерентную волну? И такой способ был найден и осуществлен!

**Мазер – молекулярный/атомный генератор излучения ультракоротких длин радиоволн, работающий на новом принципе.** Этот принцип генерации электромагнитных волн малых длин порядка 1 см осуществлен был в 1954 г., когда одновременно в СССР и США появились первые МАЗЕРЫ – генераторы микроволнового (сверхвысокочастотного) излучения сантиметрового диапазона. Это еще не свет, но настоящая, не шумовая волна. Мазер – первый в мире квантовый генератор, где волну создают молекулы, объекты квантовой физики. Это принципиальная новизна. Второе новшество, воплощенное в устройстве, в том, что физический процесс создания света не спонтанное, а вынужденное испускание, чего не было в атомной физике и оптике. Первые квантовые генераторы, мазеры, были созданы в США и СССР, работают они на пучке молекул аммиака. Осуществили их независимо Ч. Таунс (Колум-

бийский университет), а также А. М. Прохоров и Н. Г. Басов (Физический институт АН СССР).

Название генератора MASER – МАЗЕР складывается из первых букв английской фразы, точно описывающей существо дела, – Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation – усилитель микроволнового излучения посредством процесса вынужденного испускания. Название указывает спектральный диапазон излучения, физическое явление, лежащее в основе его работы, и основное свойство любого генератора – усиливать затравочные шумы, превращая их в когерентную волну благодаря обратной связи.

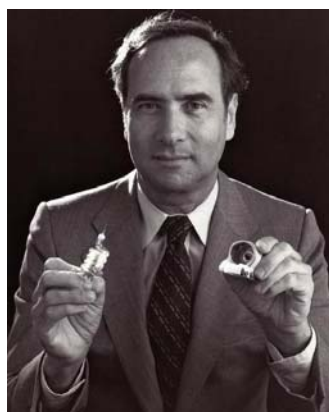
В 1960 г. был создан мазер на пучке летящих атомов водорода  $H$ ,  $\lambda \approx 21$  см. За реализацию нового принципа генерации, позволившего создавать когерентную волну излучения высоких частот, упомянутые физики были удостоены Нобелевской премии в 1964 г. Мазеры широко используются в космической связи, они позволили создать сверхточные атомные часы, обеспечить работу навигаторов (GPS, ГЛОНАСС) при движении автомобилей на земле. Они определяют положения спутников и кораблей в космосе, ракет, подводных лодок. Мазеры – это служба точного времени. Не менее важным является и то, что реализованный в них принцип работы долгие годы считали очень сложным, едва ли возможным в осуществлении. Потому мазер – великое достижение, огромный прорыв в познании природы. Он открыл путь к освоению оптического диапазона, на что были выделены огромные средства в США. Исследования велись и в СССР, и в других странах.

**Лазер – источник света нового типа.** Идея создать генератор света была весьма привлекательной, увлекла многие научные коллективы, университеты и фирмы мира, радиофизиков, электронщиков, оптиков, спектроскопистов. Возникло новое направление – квантовая электроника. И вот 16 мая 1960 г. – свершилось! В Калифорнии, США был создан первый в мире лазер на кристалле рубина, длина волны 694.3 нм. Это красный луч света. Лазер, безусловно, изменил мир, это одно из десяти самых выдающихся технологических достижений в XX в.

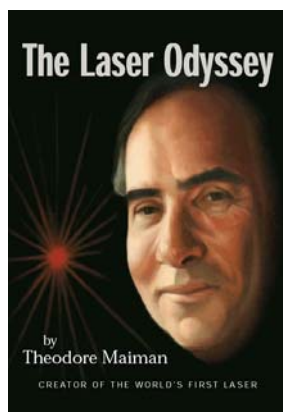
Интересен и поучителен драматический момент в этой гонке за первенство в создании лазера. На западном побережье США, где много университетов и промышленных фирм, лучшие научные школы по спектроскопии, электронике, оптике, обладающие гигантским финансированием, стремились создать лазер. На восточном побережье в Калифорнии энтузиаст-одиночка Теодор Мейман, работавший в не-

большой фирме и публикующий исследования об оптических свойствах рубина, также загорелся этой идеей. Его коллеги посмеивались – включился в гонку с «гигантами». Он не сдавался, сумел достать небольшой кусочек рубина, одолжил спектрометр, сделал зеркала. И лазер заработал! Тогда фирма поняла, что это событие важное для ее престижа. В Нью-Йорке устроили презентацию. Газеты бешено отреагировали – создан «луч смерти». Т. Мейман отправил в научный журнал *Phys. Rev. Letters* статью о своем выдающемся результате и быстро получил отказ редактора опубликовать ее. Но другой знаменитый престижный журнал *Nature* незамедлительно 6 августа опубликовал статью [1]. Можно представить «разочарование» ученых с западного побережья. Вскоре и у них в Нью Джерси также был создан рубиновый лазер. Их статья тут же была опубликована 1 октября 1960 г. [2]. В ней авторы ссылаются на приоритетную статью Меймана, указывая, что «недавно он наблюдал уменьшение времени жизни и сужение линии флуоресценции рубина. Наши эксперименты расширяют эту работу и подтверждают когерентность и направленность излучения». Их образец – стержень 0.5 см в диаметре и 4.0 см длиной. Они приводят осциллограмму, показывающую динамику свечения лазера – известную пиковую генерацию. Вскоре был создан газовый лазер и другие квантовые генераторы света, работающие в видимом диапазоне. Вначале их называли оптическими мазерами. Термин лазер появился позднее и прочно закрепился. Мейман выиграл лазерную гонку, соревнуясь с ведущими научными и промышленными лабораториями и университетами восточного побережья США, ученые которого много лет пытались приуменьшить значение его достижения.

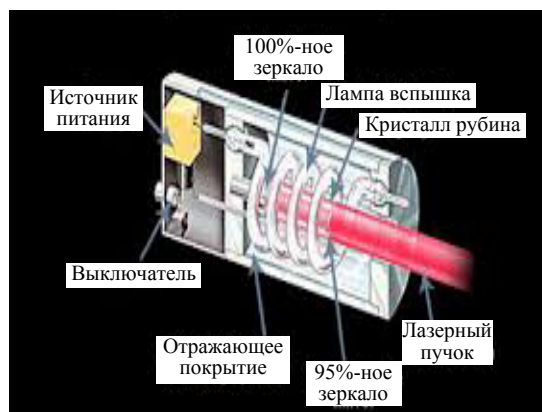
Началась новая эра невиданно быстрого развития квантовой электроники, нелинейной оптики, лазерной физики, оптики и спектроскопии, а также не менее впечатляющих применений лазера в различных видах человеческой деятельности: голография, лазерная печать, резка и сварка материалов, запись и воспроизведение звука и изображения – компакт-диски, лазерная связь, применение в химии, биологии, медицине и т. д. Многие исследователи в области лазерной физики и спектроскопии, нелинейной оптики стали лауреатами Нобелевской премии. Теодор Мейман, создавший первый в мире лазер, не был отмечен за это выдающееся достижение практически ничем (не считая японской награды). На рис. 1 представлен автор со своим прибором, компоненты его лазера и книга его воспоминаний об этом периоде деятельности.



Теодор Мейман  
(1927–2007)



Лазерная одиссея  
(2000, США, 2010, Россия)



Компоненты первого  
рубинового лазера

Рис. 1. Теодор Мейман – создатель первого в мире лазера

Новое научное направление – квантовая электроника – сформировалось осенью 1959 г. на первой Международной конференции, ее доклады опубликованы в начале 1960 г. в книге под редакцией Чарлза Таунса. Он, ее председатель, один из создателей первого в мире мазера, Нобелевский лауреат, отмечал: «Главная тема Конференции лежит на границе между двумя высокоразвитыми дисциплинами – электроникой и спектроскопией». Это направление развивалось стремительно, так что уже весной 1961 г. в США состоялась вторая Международная конференция по квантовой электронике, собравшая 450 участников – физиков со всего мира. Увесистый том в 650 страниц «Достижения в квантовой электронике» содержал ее доклады [3]. Первая часть книги «Оптические мазеры» открывалась докладом Ч. Таунса «Некоторые применения оптических и инфракрасных мазеров», а заканчивалась кратким сообщением создателя первого в мире лазера Т. Меймана – «Реализация оптического мазера на рубине». Его сообщение содержит всего 8 строк + название + автор и излагает основные факты: импульсный режим генерации, длина волны излучения 694 нм, объем рубина 1.25 см<sup>3</sup>, пиковая мощность 5 кВт, общая энергия 1 Дж, расходимость пучка 10<sup>-2</sup> рад.

Даже советская компактная и содержательная книга «Квантовая электроника. Маленькая энциклопедия» 1969 г. умалчивает имя создателя первого в мире лазера: «вскоре после появления молекулярных генераторов начались работы по осуществлению принципов квантового усиления и генерации электромагнитных волн в оптическом диапазоне, которые привели в 1960 г. к созданию первого оптического лазера на рубине» [4, с. 34]. Прошло более 40 лет, и в 2003 г. один из создателей мазера Ч. Таунс в своей статье, наконец, сказал о достижении Т. Меймана «Статья Т. Меймана столь коротка

и имеет столь много действенных последствий, что в расчете на одно опубликованное слово является самой влиятельной среди всех статей, опубликованных в Nature в XX столетии» [5]. Правда, справедливость восторжествовала, и имя Т. Меймана по праву вошло в ряд блистательных ученых, создавших эту замечательную ветвь физики, где сочетались радиофизика, электроника, оптика, атомная физика – квантовая электроника. Она вошла в обширный каталог знаний, который называем теперь лазерная физика. И которая кардинально изменила жизнь человечества вместе с информационными цифровыми технологиями, биотехнологией, биофизикой. Так была поставлена точка в этой драматической истории. Что же касается Нобелевских премий по физике, литературе и премии мира, то подобное продолжается, ударяя по авторитету этого благородного Института. Так уж устроен человек с его страстями, эмоциями, амбициями... Список творцов, недооцененных современниками, велик: А. Чехов, А. Ахматова, В. С. Летохов (Россия, СССР), как и субъективно переоцененных персон. Подобное относится и к другим премиям и оценкам достижений людей в разных областях деятельности их современниками. Это и позволило А. Пушкину в одной из своих «Маленьких трагедий» вложить в уста Антонио Сальери слова: «Нет правды на земле, но правды нет и выше».

**Уникальные свойства лазерного излучения.** Как и радиоволны, лазерный свет – это когерентное электромагнитное излучение. Но оно попадает в узкое окно, дарованное нам природой для непосредственного восприятия. Не менее важна его очень малая длина волны. В табл. 1 перечислены лишь некоторые свойства лазерного излучения и его применения, обусловленные каждым из свойств. Благодаря этим свойствам открываются все новые разнообразные применения лазерного излучения.

Таблица 1

## Свойства лазерного излучения (слева) и некоторые его применения (справа)

Когерентность	Голография – запись объемного изображения Оптическая (волоконная) связь колоссальной емкости Запись и считывание информации (CD-диски, лазерная печать)
Монохроматичность (сверхузкий спектр)	Лазерное разделение изотопов Лазерная спектроскопия Селективное возбуждение молекул
Высочайшая мощность	Сварка, резка Лазерное оружие Лазерный термоядерный синтез
Малая расходимость луча	Способность сверхтонкой фокусировки Лазерное зондирование атмосферы, дальномеры Лазерная хирургия и терапия
Сверхкороткие импульсы	Исследование быстро протекающих процессов в природе (физика, химия, биология) Динамика химических реакций Селективная лазерная химия
Создание в среде состояния квантовой когерентности (суперпозиция, перепутывание)	Квантовые вычисления (квантовый компьютер) Телепортация информации Квантовая криптография

**Многовековое стремление человека покорить пространство-время: ультракороткие лазерные импульсы.** Веками шел человек к преодолению пространства и познанию времени, хотел ускорить или замедлить его ход. Хорошо известны современные проблемы, как замедлить старение, повысить производительность труда.

Потому человек от собирательства перешел к земледелию, от охоты – к животноводству, от ручного труда к мануфактурам, заводам, конвейеру, автоматическим линиям, роботам и идет далее к созданию искусственного интеллекта, т. е. к «механизации» умственной деятельности. Кратко напомним шаги к достиже-

нию и покорению пространства-времени. Это, прежде всего, способность овладевать все большими скоростями (табл. 2).

Потребность исследовать быстрые процессы в природе (физике, технике, химии, биологии) побудила физиков создать сложные технологии генерации сверхкоротких лазерных импульсов. Эти достижения перечислены в табл. 3.

Каждый шаг потребовал создания сложной, изобретательной техники. На рис. 2 представлены световые импульсы все меньшей длительности, т. е. содержащие все меньшее число периодов световой волны. В импульсе фемтосекундной длительности укладывается примерно три периода световой волны.

Таблица 2

## Достижимые скорости движения

Лошадь	10–60 км/ч
Железнодорожный транспорт	60–450 км/ч
Автомобиль	60–250 км/ч
Самолет	1000–3000 км/ч
Ракета: первая космическая скорость	$28 \cdot 10^3$ км/ч = $0.25 \cdot 10^{-4}$ с
Скорость света (мировая константа), предельная скорость в природе	$c = 3 \cdot 10^8$ м/с = $10.828 \cdot 10^8$ км/ч

Таблица 3

## Сверхкороткие лазерные импульсы и их длительность

Гигантские импульсы, 1961	Наносекунды
Пикосекундные импульсы, 1966	Пикосекунды
Субпикосекундные импульсы, 197	Доли пикосекунд
Фемтосекундные импульсы, 1987	Фемтосекунды
Аттосекундные импульсы, 2001 (это уже УФ- и рентгеновский диапазоны)	Аттосекунды

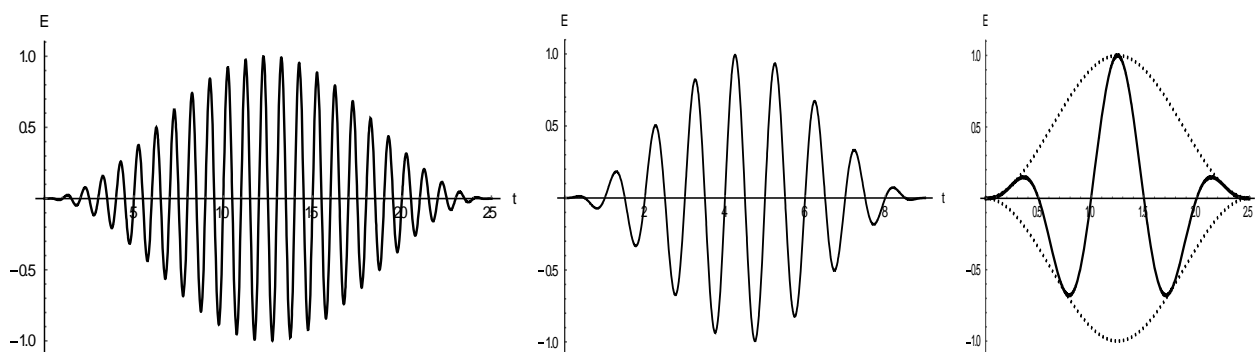
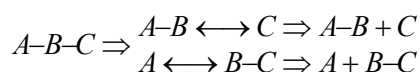


Рис. 2. Лазерные импульсы все меньших длительностей: все меньшее число периодов световых колебаний укладывается в пределах длительности импульса

**Лазерные импульсы для исследования хода химической реакции.** Идея лазерной химии возникла сразу, в 60-х годах XX в. Узкий спектр излучения, высокая мощность дают надежду селективно и быстро «раскачать» любую связь в молекуле, а не только слабейшую, как раньше. Возникла заманчивая цель – научиться управлять реакцией, получать желаемые продукты. На схеме показано, как, подбирая частоту излучения и воздействуя им на разные химические связи, можно получить различные продукты реакции:



Вскоре осознали преграду на этом пути. Энергия «вкачивается» быстро в нужную связь, но очень быстро растекается по всей молекуле,

возбуждаются иные связи, и в результате снова разрушается самая слабая связь. Стало ясно, чтобы изучить/увидеть ход самой реакции, нужны сверхкороткие лазерные импульсы. Лучшие результаты на пути их применения в химии, освоения и создания новых физических методов регистрации были достигнуты школой, основатель которой Ахмед Зевейл (США) был удостоен Нобелевской премии 1999 г. по химии «За исследование химических реакций в реальном масштабе времени с помощью фемтосекундной спектроскопии и дифракции электронов», рис. 3 [6]. Благодаря этому человек впервые смог увидеть динамику химической реакции, формирование, эволюцию, распад переходного состояния и образование продуктов. Процесс очень быстрый. Чтобы его видеть, нужны фемтосекундные импульсы.

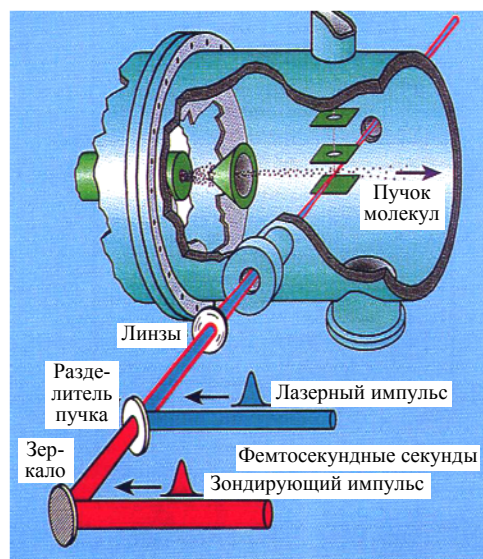
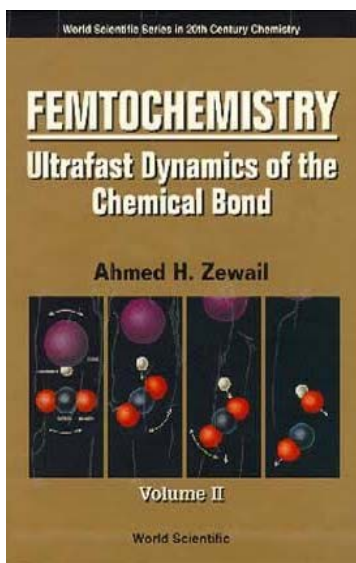
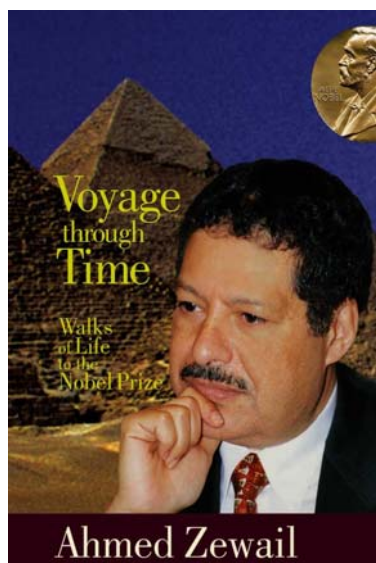


Рис. 3. Ахмед Зевейл (1946–2014).

Его книги: «Путешествие сквозь время: Жизненные дороги к Нобелевской премии» [7], «Фемтохимия: Сверхбыстрая динамика химической связи» [8] и схема установки для возбуждения молекул и исследования хода управляемой химической реакции [9]

**Ахмед Зевейл – основатель нового направления: фемтохимии.** Фемтохимия – раздел физической химии, где изучают химические реакции на коротких временных интервалах порядка фемтосекунд  $\sim 10^{-15}$  с. Это прорыв в химии, переход от кинетики к химической динамике реакций. На сложнейшей экспериментальной установке молекулярный пучок освещается двумя сверхкороткими лазерными импульсами с изменяемой задержкой. Один импульс когерентно возбуждает реагенты, другой порождает пучок электронов, сканируя движущиеся атомы. Разработана также сложнейшая техника зондирования и обработки данных. По дифракции и рассеянию электронов на атомах восстанавливаются межатомные расстояния, углы поворотов, энергия реагентов и продуктов.

Ахмет Зевейл родился в Египте, окончил университет, переехал в США и там выполнил выдающиеся физико-химические исследования. Он первый осознал, что химические реакции происходят чрезвычайно быстро, и управлять ими можно только в фемтосекундной временной шкале. Поэтому лазерная химия как управление реакциями – это *фемтохимия*. Его термин прочно закрепился в науке. А. Зевейл совершил ряд прорывов, визуализируя в реальном времени ядерное движение простых молекул, затем более сложных – белков. Большим достижением явилось то, что его научной группе удалось генерировать и использовать короткие импульсы электронов. Он осуществил сверхбыструю дифракцию электронов, основав тем самым новый физический метод – четырехмерную электронную микроскопию (в пространстве и времени) [10]. Эта работа является шедевром, ибо позволяет увидеть динамические явления в химии, биологии, науке о материалах и нанонауке. А. Зевейл основал и реализовал новые физические методы – сверхбыструю электронную сканирующую микроскопию и сверхбыструю дифракцию электронов. Мнение многих – он получил бы вторую Нобелевскую премию (по физике) за выдающиеся прорывы в электронике. «В науке и в мире наследие А. Зевейла будет длиться в течение нескольких поколений» (М. Чергуй. Швейцарский федеральный технологический институт, Лозанна. 2016 г.).

Зевейл не забыл родину. Понимая значение фундаментальной науки и образования в жизни человечества и своего народа, он осуществил свою мечту – построил Египетский университет мирового класса. При поддержке государства современный научный центр «Город науки и техники Зевейла» (Zewail City of Science and Technology) был открыт в 2011 г. в Гизе. «Если поиски человечества – это прогресс и процветание, нам нужно развивать рациональ-

ный научный подход – основу наших цивилизаций. Тогда наука и технологии станут космическим кораблем для успешных путешествий наших потомков» – А. Зевейл.

**Когерентное селективное возбуждение атомов и молекул лазерным излучением.** Лазерное излучение, обладающее высочайшей когерентностью и огромной мощностью способно быстро создать особое когерентное состояние в среде (молекуле, атоме), воздействуя на нее. Описание динамики такого процесса возбуждения сводится к решению фундаментального уравнения квантовой механики – уравнения Шредингера. Моделью молекулы служит квантовая система с заданным расположением уровней энергии и радиационными переходами между уровнями, представленная на рис. 4.

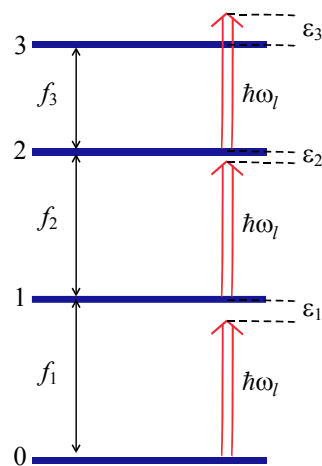


Рис. 4. Квантовая система (модель молекулы), возбуждаемая когерентным излучением, и ее характеристики

Уравнения динамики квантовой системы имеют вид:

$$-i \frac{da_n(t)}{dt} = f_{n+1} e^{-i\epsilon_{n+1}t} a_{n+1}(t) + f_n e^{+i\epsilon_n t} a_{n-1}(t);$$

$$a_n(t=0) = \delta_{n,0}; \quad n = 0, 1, \dots, N. \quad (1)$$

Здесь все переменные и параметры безразмерны:  $a_n(t)$  – искомые комплексные функции вещественного аргумента – амплитуды вероятности обнаружить квантовую систему на уровне  $E_n$  в момент времени  $t$ ;  $\epsilon_n$  – безразмерная частотная отстройка на  $n$ -м переходе.

Связь между безразмерными величинами и физическими характеристиками системы таковы: уровни энергии  $E_n = \sum_{k=0}^n \hbar\omega_k$ , матричные элементы  $\mu_{n-1,n} = \mu_{0,1} f_n$ ,  $f_0 = 0$ ,  $f_1 = 1$  дипольных переходов. Излучение – прямоугольный импульс  $E_\ell \cos(\omega_\ell \tau)$ ,  $0 \leq \tau \leq T$ , включается в момент

$\tau = 0$ , где  $\tau$  – время, с;  $\omega_\ell$  – частота излучения;  $E_\ell$  – амплитуда излучения. Частотные отстройки на переходах –  $\varepsilon_n = (\omega_n - \omega_\ell) / \Omega_R$ , где  $\Omega_R = \mu_{0,1} E_\ell / 2\hbar$  – частота Раби.

Особенно сложно получить точное решение такой системы  $N + 1$  уравнений, если это число, равное числу уровней, взаимодействующих с излучением, велико. Еще сложнее анализировать решения с целью поиска оптимальных условий возбуждения. Нами был разработан и осуществлен алгоритм построения точного решения этой задачи, основанный на совместном использовании ряда различных математических методов и структур [11, 12]. Это преобразование Фурье, вычисление спектров Фурье амплитуд вероятности. Доказано, что эти спектры выражаются через соответствующую систему ортогональных полиномов, определенных в непрерывном или дискретном пространстве Фурье. Установлена однозначная связь между характеристиками системы полиномов и коэффициентами уравнений динамики (т. е. характеристиками квантовой системы). С использованием известных ортогональных полиномов [13] построены точные решения для некоторых многоуровневых квантовых систем.

Кратко алгоритм построения точного решения описанных выше динамических уравнений (1) можно представить в следующем виде:

- дифференциальные уравнения;
- преобразование Фурье амплитуд вероятности;
- спектры Фурье;
- ортогональные полиномы в пространстве Фурье;
- точное решение для амплитуд вероятности;
- выражение для населенности уровней энергии квантовых систем, статистические функции распределения (дискретные, с параметром, зависящим от времени).

Приведем пример точного решения, описывающего когерентную динамику огромного семейства квантовых многоуровневых систем, спектры Фурье амплитуд вероятностей которых выражаются через ортогональные полиномы Кравчука.

**Когерентная динамика квантовых систем – осцилляторов Кравчука, возбуждаемых лазерным излучением.** Полиномы Кравчука

$$K(x; N, p); \quad n = 0, 1, \dots, N; \quad x = 0, 1, \dots, N$$

дискретной переменной  $x$  содержат два параметра –  $N, p$ . Мы трактуем полиномы как структуры, заданные в дискретном Фурье-пространстве. Они определяют спектры Фурье амплитуд вероятности  $a_n(t)$  некоторой  $N + 1$ -уровневой квантовой системы, характеризующейся коэффициентами ее динамических уравнений:

$$f_n = \sqrt{\frac{n(N+1-n)}{N}}; \quad \varepsilon_n \equiv \varepsilon = r(p-q).$$

Решение уравнений (1) ищем в виде дискретного преобразования Фурье:

$$a_n(t) = e^{i\varepsilon_n t} \sum_{\omega=0}^N \sigma(\omega) p_0 p_n(\omega) e^{ir\omega t},$$

где  $\sigma(\omega) p_0 p_n(\omega) e^{ir\omega t} = F_n(\omega)$  – дискретные спектры Фурье амплитуд  $a_n(t)$ ;  $\sigma(\omega)$  – известная весовая функция полиномов  $p_n(\omega)$ . Вычисление суммы приводит к решению для амплитуд вероятности. Приведем сразу выражение для населенностей энергетических уровней:

$$\rho_n(t) = \binom{N}{n} [1 - y(t)]^{N-n} y(t);$$

$$y(t) = \frac{1}{N} \left( \frac{2}{r} \right)^2 \sin^2 \left( \frac{r}{2} t \right), \quad r = \sqrt{\varepsilon^2 + \frac{4}{N}}.$$

Динамика такова, что населенности уровней описываются *биномиальным распределением*, параметр которого  $y(t)$  зависит от времени, числа переходов, взаимодействующих с излучением, и отстройки частоты излучения от частот квантовых переходов. Решение описывает динамику семейства  $N + 1$ -уровневых квантовых систем с эквидистантно расположенными уровнями энергии. В семейство входят: при  $N \rightarrow \infty$  гармонический осциллятор – фундаментальная базовая квантовая модель, двухуровневая (при  $N=2$ ) квантовая система – базовая модель резонансных сред в лазерной физике и нелинейной оптике, трехуровневая система с равными дипольными моментами переходов, а также многие другие многоуровневые осцилляторы Кравчука. Таким образом, две базовые модели физики – гармонический осциллятор и двухуровневая модель квантовой резонансной среды есть предельные представители семейства осцилляторов Кравчука.

Единое описание столь различных квантовых систем (с математической и физической точек зрения) стало возможным благодаря тому, что полиномы Кравчука содержат два параметра и что спектры Фурье всех этих систем описываются этими же полиномами.

В рассмотренном примере ярко проявилось, что математические структуры различных разделов математики конструктивно дополняют друг друга, согласованно «взаимодействуя» ради единой цели – решения дифференциальных уравнений, описывающих когерентную динамику квантовых систем. Это еще раз подтверждает идею, высказанную Н. Бурбаки, о глубоком внутреннем единстве разделов математики, казалось бы, не связанных друг с другом [14]. Внутреннее единство всего научного знания следует максимально



учитывать и в научных исследованиях, и в системах образования, как точного естественного, так и гуманитарного, особенно теперь.

**Заключение.** Три рассмотренных в статье примера (лазеры и мазеры; управление химической реакцией – фемтохимия; построение точного решения уравнений когерентной динамики квантовых систем) иллюстрируют не новую, но ценную мысль – результаты получаются с использованием не одного средства, метода, приема, а требуют знания нескольких различных ветвей науки. Так, освоение генерации когерентного излучения микроволнового и оптического диапазонов потребовало знаний радиофизики, электроники, спектроскопии, оптики, атомной физики. Создание фемтохимии, позволяющей «увидеть» формирование переходного комплекса, его эволюцию и распад с образованием продуктов, не только предполагало знание химической кинетики, ее разнообразных методов, но и требовало освоения ряда глубоких разделов физики – генерации сверхкоротких импульсов, электронной спектроскопии, сложнейших систем регистрации и даже

создания «четырёхмерного электронного микроскопа». При решении уравнений когерентной динамики квантовых систем были использованы разные разделы математики: не только теория дифференциальных уравнений, но и преобразование Фурье и Фурье-спектры, ортогональные полиномы непрерывной и дискретной переменной, определенные в Фурье-пространстве, и их свойства, а также знание статистических функций распределения – предмет теории вероятностей и математической статистики. Что уж говорить о задачах в области биофизики, исследования работы мозга или проблем, связанных с созданием искусственного интеллекта. Время настоятельно требует специалистов не узкоспециального профиля, но обладающих широким спектром знаний в нескольких областях. Это в равной степени относится и к научной работе, и к образованию, вузовскому и даже школьному. Образованный человек в наше время – это носитель фундаментальных глубоких и разносторонних знаний о природе и культуре.

Автор признателен Н. Н. Круку за обсуждение результатов работы и конструктивную критику.

### Литература

1. Maiman T. Stimulated Optical Radiation in Ruby // *Nature*. 1960. Vol. 187. P. 494–495.
2. Coherence, Narrowing, Directionality, and Relaxation Oscillations in the Light Emission from Ruby / R. J. Collins [et al.] // *Phys. Rev. Letters*. 1960. Vol. 5, no. 7. P. 303–307.
3. *Advances in Quantum Electronics* / Ed. by J. R. Singer. New York and London: Columbia University Press, 1961. 659 p.
4. Квантовая электроника. Маленькая энциклопедия. М.: Сов. энцикл., 1969. 432 с.
5. Townes Ch. H. The first laser: 1960 “Stimulated optical radiation in ruby” by T. H. Maiman // *A Century of Nature: Twenty-One Discoveries that Changed Science and the World*. University of Chicago Press, 2003. P. 107–112.
6. Zewail Ahmed H. Femtochemistry // *J. Phys. Chem.* 1993. Vol. 97. P. 12427–12446.
7. Зевайл Ахмед Х. Путешествие сквозь время. Шаги к Нобелевской премии. М.: Нобелистика, 2004. 278 с.
8. Zewail Ahmed H. Femtochemistry. Vol. 2. Ultrafast Dynamics of the Chemical Bond. World Scientific Publ., 1994. 915 p.
9. Zewail Ahmed H. Femtochemistry. Atomic-Scale Dynamics of the Chemical Bond Using Ultrafast Lasers. Nobel Lecture. December 8, 1999 // *The Nobel Prize in Chemistry*. 1999. P. 274–367.
10. Zewail Ahmed H., Thomas J. M. 4D Electron Microscopy: Imaging in Space and Time. London: Imperial College Press, 2010. 346 p.
11. Savva Vadim A. and Zelenkov Vadim I. Integrable models for quantum media excited by laser radiation: a method, physical interpretation, and examples. arXiv:1404.1248 v1 [quant-ph] 31 Mar 2014, pp. 1–11.
12. Savva V. A. Orthogonal Polynomials in the Fourier Space for Solving Non-steady-state Quantum Problems // *Nonlinear Dynamics and Applications: Proceeding of the Twenty-first Annual Seminar NPCS*. 2014. Vol. 20. P. 187–195.
13. Никифоров А. Ф., Суслов С. К., Уваров В. Б. Классические ортогональные полиномы дискретной переменной. М.: Наука, 1985. 216 с.
14. Бурбаки Н. Очерки по истории математики / пер. с фр. М.: Либроком, 2010. 296 с.

### References

1. Maiman T. Stimulated Optical Radiation in Ruby. *Nature*, 1960, vol. 187, pp. 494–495.
2. Collins R. J., Nelson D. F., Schawlow A. L., Bond W., Garrett C. G. B., Kaiser W. Coherence, Narrowing, Directionality, and Relaxation Oscillations in the Light Emission from Ruby. *Phys. Rev. Letters*, 1960, vol. 5, no. 7, pp. 303–307.

3. Advances in Quantum Electronics. Ed. by J. R. Singer. New York and London, Columbia University Press, 1961. 659 p.
4. *Kvantovaya elektronika. Malen'kaya entsiklopediya* [Quantum Electronics. Small encyclopedia] Moscow, Sovetskaya entsiklopediya Publ., 1969. 432 p.
5. Townes Ch. H. The first laser: 1960 “Stimulated optical radiation in ruby” by T. H. Maiman. *A Century of Nature: Twenty-One Discoveries that Changed Science and the World*. University of Chicago Press, 2003. 378 p.
6. Zewail Ahmed H. Femtochemistry. *J. Phys. Chem.*, 1993, vol. 97, pp. 12427–12446.
7. Zewail Ahmed H. *Puteshestvie skvoz' vremya. Shagi k Nobelevskoy premii* [Voyage through Time. Walks of Life to the Nobel Prize]. Moscow, Nobelistika Publ., 2003. 278 p.
8. Zewail Ahmed H. Femtochemistry. Vol. 2. Ultrafast Dynamics of the Chemical Bond. World Scientific Publ., 1994. 915 p.
9. Zewail Ahmed H. Femtochemistry. Atomic-Scale Dynamics of the Chemical Bond Using Ultrafast Lasers. Nobel Lecture. December 8, 1999. *The Nobel Prize in Chemistry*, 1999, pp. 274–367.
10. Zewail Ahmed H., Thomas J. M. 4D Electron Microscopy: Imaging in Space and Time. London, Imperial College Press, 2010. 346 p.
11. Savva Vadim A. and Zelenkov Vadim I. Integrable models for quantum media excited by laser radiation: a method, physical interpretation, and examples. arXiv:1404.1248v1 [quant-ph] 31 Mar 2014. pp. 1–11.
12. Savva V. A. Orthogonal Polynomials in the Fourier Space for Solving Non-steady-state Quantum Problems. *Nonlinear Dynamics and Applications*, 2014, vol. 20, pp. 187–195.
13. Nikiforov A. F., Suslov S. K., Uvarov V. B. *Klassicheskie ortogonal'nye polinomy diskretnoy peremennoy* [Classical Orthogonal Polynomials of a Discrete Variable]. Moscow, Nauka Publ., 1991. 216 p.
14. Bourbaki N. *Elements d'histoire des mathematiques*. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 1994. 301 p. (Russ. ed.: Burbaki N. *Ocherki po istorii matematiki*. Moscow, Librokom Publ., 2010. 296 p.).

#### Информация об авторе

**Савва Вадим Александрович** – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры высшей математики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: savva@belstu.by

#### Information about the author

**Savva Vadim Alexandrovich** – DSc (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor, the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: savva@belstu.by

Поступила 31.05.2018