УДК 51-7+517.925

В. А. Савва, д-р физ.-мат. наук, проф. (БГТУ, г. Минск);
С. Банжак, асп. (Ливанский университет, г. Бейрут)

ТОЧНЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ МЕТОДАМИ ДИСКРЕТНОЙ МАТЕМАТИКИ

Изучение когерентных квантовых состояний молекулярных сред в настоящее время актуально с целью использования их для лазерного управления химическими реакциями, создания квантовой связи, квантовых вычислений и др. Для решения уравнений, описывающих взаимодействие таких сред с излучением, наряду с традиционными методами матанализа и дифференциальных уравнений можно также использовать методы дискретной математики, воплощенные в системах компьютерной алгебры.

В работе представлен и реализован алгоритм построения точного аналитического решения дифференциальных уравнений, описывающих когерентное возбуждение квантовой системы (модели молекулы) лазерным излучением, на примере трехуровневой модели. Для систем с большим числом переходов можно использовать систему компьютерной алгебры, реализующей символьные вычисления.

Уравнения в безразмерных переменных, описывающие возбуждение,

$$-i\frac{da_n(t)}{dt} = f_{n+1}e^{-i\varepsilon_{n+1}t}a_{n+1}(t) + f_n e^{+i\varepsilon_n t}a_{n-1}(t);\, a_n(t=0)=\delta_{n,0};\, n=\overline{0,N}. \quad (1)$$

содержат искомые функции $a_n(t)$ – амплитуды вероятности обнаружить систему на уровне n с энергией E_n пока действует излучение $\mathbf{E}_\ell \cos(\omega_\ell \tau)$, включаемое в момент $\tau = 0$. Населенности $\rho_n(t) = a_n(t)a_n^*(t)$ уровней образуют экспериментально определяемую дискретную функцию распределения молекул по энергии в любой момент времени. Здесь $t = \Omega_R \tau$ – время, $f_n = \mu_{n-1,1} / \mu_{0,1}$ – отношение дипольных моментов переходов, ε_n – частотные отстройки на переходах, $\Omega_R = \mu_{0,1}\mathbf{E}_\ell / 2\hbar$ – частота Раби нижнего перехода. При $t = 0$ молекулы находятся на нижнем уровне, под действием излучения они расселяются по другим уровням. Излучение воздействует на два перехода $0 \leftrightarrow 1$ и $1 \leftrightarrow 2$, т.е. $N = 2$.

Наша цель – построить решение для систем с неэквидистантными уровнями энергии, более близких к реальным молекулам, в то время как используемые ранее классические ортогональные полиномы приводили к решению для систем с эквидистантными уровнями. Это удалось сделать.

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

$$a_n(t) = e^{is_n t}\sum\nolimits_{\omega=0}^{N} F_n(\omega)e^{ir\omega t};\ F_n(\omega) = \sigma(\omega)\hat{p}_0\hat{p}_n(\omega);\ \omega = \overline{0,N} \tag{2}$$

Спектры Фурье $F_n(\omega)$, то есть Фурье-образы амплитуд вероятности $a_n(t)$ квантовой системы, выражаются через некоторую последовательность ортонормированных полиномов $\{\hat{p}_n(\omega)\}_{n=0}^{N}$ дискретного аргумента ω и их весовую функцию $\sigma(\omega)$. Дискретность пространства Фурье функций $a_n(t)$ продиктована физическими соображениями, и пусть это пространство имеет эквидистантно расположенный набор частот ω.

Известно, что любая последовательность ортогональных полиномов удовлетворяет трехчленному рекуррентному соотношению, которое мы записываем в удобном для задачи виде

$$\bar{f}_{n+1}\hat{p}_{n+1}(\omega) + \bar{f}_n\hat{p}_{n-1}(\omega) = \{r\omega + s_n\}\hat{p}_n(\omega);\ n,\omega = \overline{0,N};\ \bar{f}_0 = 0,\ \bar{f}_1 = 1, \tag{3}$$

его коэффициенты $\bar{f}_n, r, s_n$ известны, если известны сами полиномы.

Подставляя (2) в (1), нетрудно получить, что (2) является решением системы уравнений при условиях

$$f_n = \bar{f}_n, \quad \varepsilon_n = s_n - s_{n-1}. \tag{4}$$

Эта взаимно-однозначная связь характеристик полиномов с коэффициентами уравнений (1) показывает, какая система полиномов согласуется с уравнениями (1) и адекватна квантовой системе, верно описывая ее Фурье спектры.

Рассмотрим пример. Начнем с пространства Фурье функций $a_n(t)$ некоторой квантовой системы. Пусть оно будет дискретным и однородным $\omega = \{0,1,2 = N\}$, а спектры Фурье задаются функцией, которую возьмем в виде $\sigma(\omega) = \{0.2; 0.3; 0.5\}$, и примем ее в качестве весовой функции соответствующей системы ортогональных полиномов $\{\hat{p}_n(\omega)\}_{n=0}^{N=2}$. По известной стандартной процедуре строим систему полиномов $p_0(\omega) \equiv 1$; $p_1(\omega) = \omega - 1.3$; $p_2(\omega) = 0.61\omega^2 - 1.31\omega + 0.3$. Квадраты норм таковы:

$$d_n^2 = \sum\nolimits_{\omega=0}^{2} \sigma(\omega) p_n^2(\omega) = \{1; 0.61; 0.0732\}.$$

Нормированные полиномы $\tilde{p}_n(\omega) = p_n(\omega) / d_n$ вычислены точно. Из рекуррентного соотношения (3) находим все его коэффициенты: $r = 1 / d_1$; $\quad \overline{f}_2 = d_2 / d_1^4$; $\quad s_0 = -1.3 / d_1$; $\quad s_1 = -0.517 / d_1^3$; $\quad s_2 = -0.52 / d_1^3$. Согласно (2) спектры Фурье как и амплитуды вероятности $a_n(t)$ могут быть вычислены точно:

$$\begin{aligned} a_0 &= e^{is_0 t}\left\{0.2 + 0.3e^{irt} + 0.5e^{i2rt}\right\}; \\ a_1 &= e^{is_1 t}\left(\tfrac{1}{d_1}\right)\left\{-0.26 - 0.09e^{irt} + 0.35e^{i2rt}\right\}; \\ a_2 &= e^{is_2 t}\left(\tfrac{1}{d_2}\right)\left\{0.06 - 0.12e^{irt} + 0.06e^{i2rt}\right\}. \end{aligned} \tag{5}$$

Остается определить, динамику какой квантовой системы описывает решение (5). Согласно (4) коэффициенты уравнений (1) имеют вид $f_1 = 1; f_2 = d_2 / d_1^4 \approx 0.727$; $\varepsilon_1 = +0.276\, r / d_1^2; \varepsilon_2 = -0.003\, r / d_1^2$. Видно, что соответствующая решению квантовая система такова, что второй ее переход в сравнении с первым имеет несколько меньший дипольный момент, т.е. слабее взаимодействует с излучением. Однако его собственная частота ω_2 почти совпадает с несущей частотой ω_ℓ излучения. Частотные отстройки не равны $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$, т.е. собственные частоты переходов различны, значит уровни расположены неэквидистантно. Все характеристики системы определены.

Населенности уровней

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 0.38 + 0.42\cos rt + 0.2\cos 2rt; \\ \rho_1 &= \left(\tfrac{1}{0.61}\right)\left\{0.1982 - 0.0162\cos rt - 0.1820\cos 2rt\right\}; \\ \rho_2 &= \left(\tfrac{1}{0.0732}\right)\left\{0.0216 - 0.0288\cos rt + 0.0072\cos 2rt\right\} \end{aligned} \tag{6}$$

Таким образом, представленный алгоритм позволил получить точное решение системы дифференциальных уравнений, описывающих возбуждение квантовой системы с неэквидистантным расположением энергетических уровней и неравными дипольными моментами ее радиационных переходов. При этом не потребовалось интегрирования уравнений.

Алгоритм позволяет, используя разнообразные весовые функции дискретного аргумента и соответствующие им структуры ортонормированных полиномов, строить аналитическое описание когерентной динамики разнообразных квантовых систем в лазерных полях.