Equation Chapter 1 Section 1УДК 51-7+517.925

[1]В.А. Савва, проф., д-р. физ.-мат. наук; [1,2]С. Банжак, асп.;
([1]БГТУ, г. Минск; [2] Ливанский университет, г. Бейрут)

О СУЩЕСТВОВАНИИ ДИСКРЕТНОЙ ФУНКЦИИ С ПОЛНОЙ ИНФОРМАЦИЕЙ О ДИНАМИЧЕСКИХ И СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВАХ ВОЗБУЖДЕНИЯ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ, ВКЛЮЧАЯ АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ

Пусть даны $N+1$ уравнений, описывающих квантовые системы (модели молекул), возбуждаемые лазерным излучением:

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

Безразмерные коэффициенты уравнений характеризуют свойства квантовых систем и излучения. Решение уравнений (1) – набор функций $\{a_n(t)\}\big|_0^N$ в непрерывном t - пространстве.

В работе на примере квантовых систем с тремя энергетическими уровнями $E_0, E_1, E_{2=N}$ реализован нестандартный способ построения решения уравнений (1). В его основе лежит задаваемая функция s (x) дискретного аргумента x в Фурье пространстве искомых функций $a_n(t)$, она «порождает» решение , спектры Фурье и статистическое распределение частиц по уровням. При этом используется дискретная математика,

Рассмотрим простейший случай однородного пространства Фурье $x = \{0; 1; 2\}$, зададим три величины s (0);s (1);s (2). Чтобы построить решение, описывающее динамику семейства разнообразных квантовых систем, возбуждаемых в разных условиях, введем в функцию s (x) дополнительные параметры:

$$\text{s }(x) = \{1 - a - b; \quad a; \quad b\}; \quad 0 < a < 1; \quad 0 < b < 1 - a. \qquad (2)$$

Функция содержит два параметра и нормирована: $\text{e}_{x=0}^{2=N}\text{s }(x) = 1$. Условия на параметры связаны с тем, что функция будет использована в качестве весовой для построения системы дискретных ортогональных полиномов $\{\hat{p}_n(x)\}_{x=0}^{2=N}$. Их строим по стандартной процедуре, дискретная переменная x в Фурье пространстве имеет смысл частоты. Полиномы и квадраты их норм таковы:

$$\hat{p}_0 \in 1; \quad \hat{p}_1(x) = \{x - (a+2b)\}\frac{1}{d_1};$$

$$\hat{p}_2(x) = \{x^2[a+4b-(a+2b)^2] - x[a+8b-(a+2b)(a+4b)] + 2ab\}\frac{1}{d_2}; \quad (3)$$

$$d_0^2 = 1; \quad d_1^2 = a+4b-(a+2b)^2; \quad d_2^2 = 4abc[ab+(a+4b)c]; \quad c = 1-a-b.$$

Связь между $a_n(t)$ и их спектрами $F_n(x)$ записываем в виде Фурье преобразования

$$a_n(t) = e^{is_nt}\sum_{x=0}^{2} F_n(x)\,e^{irxt}. \quad (4)$$

Предполагаем, что спектры описываются построенными полиномами (3):

$$F_n(x) = \sigma(x)\hat{p}_0\hat{p}_n(x). \quad (5)$$

Подставив (4), (5) в уравнения (1), приходим к выражению

$$\sum_{x=0}^{2}\sigma(x)e^{irxt}\left\{e^{-i(\Delta_{n+1}-(s_{n+1}-s_n))t}f_{n+1}\hat{p}_{n+1}(x)+e^{i(\Delta_n-(s_n-s_{n-1}))t}f_n\hat{p}_{n-1}(x)-(rx+s_n)\hat{p}_n(x)\right\}=0. \quad (6)$$

В теории ортогональных полиномов известно, что они удовлетворяют трехчленному рекуррентному соотношению

$$\bar{f}_{n+1}\hat{p}_{n+1}(x)+\bar{f}_n\hat{p}_{n-1}(x)=(rx+s_n)\hat{p}_n(x), \quad (7)$$

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

С учетом (7) очевидно, что при

$$\Delta_n = s_n - s_{n-1}; \quad f_n = \bar{f}_n; \quad n = 1;2; \quad (8)$$

(6) удовлетворяется. Выражения (8) представляют взаимно однозначное соответствие между коэффициентами (слева) уравнений (1), т. е. параметрами квантовых систем и излучения, и коэффициентами (справа) рекуррентного соотношения для полиномов. Последние в рассматриваемом примере таковы:

$$\bar{f}_1 = 1; \quad \bar{f}_2 = \frac{d_2}{d_1^4}; \quad r = \frac{1}{d_1};$$
$$s_0 = -r(a+2b); \quad s_1 = -\frac{r}{d_1^2}\frac{d_1^4+2ab}{a+2b}; \quad s_2 = -\frac{r}{d_1^4}\frac{d_2^2+2ab}{2ab}. \quad (9)$$

Находим отстройки частоты ω_1 излучения от частот ω_1, ω_2 переходов $0 \leftrightarrow 1$ и $1 \leftrightarrow 2$, взаимодействующих с излучением:

$$\Delta_1 = s_1 - s_0 = -\frac{r}{d_1^2(a+2b)}[d_1^4 - d_1^2(a+2b)^2 + 2ab]; \quad (10)$$

$$\Delta_2 = s_2 - s_1 = -\frac{r}{d_1^2(a+2b)}\left[-\frac{d_1^6 2ab - d_1^2(2ab)^2 + d_2^2(a+2b)^2}{d_1^2 2ab}\right]. \quad (11)$$

Таким образом, найдены все характеристики квантовых систем и излучения, для которых построено решение, приводимое ниже.

Спектры $F_n(x)$ и решение $a_n(t)$ находим по формулам (5) и (4), как и наблюдаемое в эксперименте дискретное статистическое распределение $\rho_n(t) = a_n^*(t)\, a_n(t)$ квантовых систем по энергетическим уровням:

$$
\begin{gathered}
\rho_0(t) = \{1 - 2(a+b) + 2(a^2+ab+b^2)\} + 2a(1-a)\cos(rt) + 2bc\cos(2rt); \\
\rho_1(t) = 2d_1^{-2}\{(-a - b + a^2 + ab + b^2)d_1^2 - 3abc\} + \\
+ 2ad_1^{-2}\left\{(1-a)d_1^2 - 4bc\right\}\cos(rt) + 2bcd_1^{-2}\left\{d_1^2 + a\right\}\cos(2rt); \\
\rho_2(t) = 2abcd_1^{-2}\{3 - 4\cos(rt) + \cos(2rt)\}.
\end{gathered}
\tag{12}
$$

Распределение зависит от времени и описывает когерентный процесс, происходящий с участием двухпараметрического (a, b) семейства квантовых систем с разными дипольными моментами переходов, взаимодействующих с излучением и с различным расположением уровней, в том числе неэквидистантным. Анализ распределения $\rho_n(t; a, b)$ дает полную информацию о возбуждении квантовых систем. в зависимости от их характеристик, частоты и амплитуды электромагнитного излучения.

В работе показано, что алгоритм с использованием дискретных функций позволяет просто вводить дополнительные параметры и строить точное решение некоторых дифференциальных уравнений рассмотренного типа. Решение описывает когерентную динамику семейства систем с разнообразными характеристиками в условиях возбуждения излучением разных частот и амплитуд. В семействе содержатся системы с неэквидистантным расположением уровней, что соответствует более реальным моделям молекул. Отметим особую роль функции $\sigma(x)$ в алгоритме; она «порождает» дискретные полиномы, спектры Фурье, решение и ведет к дискретному вероятностному распределению.

Продемонстрировано также, что различные разделы математики: дифференциальные уравнения; редко используемые дискретные ортогональные полиномы, построенные в пространстве Фурье; вероятностные распределения; и связанные с ними математические структуры тесно взаимодействуют в рассмотренной задаче. Это подтверждает справедливость давних слов (1881 г.) американского философа Ч. С. Пирса: «Математика есть изучение идеальных построений (часто применимых к реальным проблемам) и выявление посредством этого отношений, прежде скрытых, между частями этих конструкций». (Цит. по: Г. Лолли. Философия математики. Нижний Новгород. Изд.-во ННУ. 2012. С. 49).