

СПЕКТРЫ ФУРЬЕ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ, ВОЗБУЖДАЕМЫХ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ, И ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ИХ ДИНАМИКИ БЕЗ ИНТЕГРИРОВАНИЯ

В. А. Савва*, С. Банжак

УДК 535.33+517.925+621.373.8

Белорусский государственный технологический университет,
220006, Минск, Беларусь; e-mail: vadimsavva@yandex.by

(Поступила 31 марта 2020)

Проведены расчеты когерентного возбуждения молекул лазерным излучением, основанные на простых моделях, $(N+1)$ -уровневых квантовых системах, и приводящие к построению точного решения соответствующей системы дифференциальных уравнений, которые относятся к полуклассической модели Раби. Решение выполнено без интегрирования с применением дискретной математики. Дискретное преобразование Фурье осуществляет переход от функций $a_n(t)$ -амплитуд вероятности квантовой системы в их дискретное пространство Фурье, где спектры Фурье $F_n(\omega)$ — спектральные образы амплитуд. Спектры можно выразить через некоторую последовательность дискретных ортогональных полиномов, соответствующих квантовой системе. На примере показано, как с использованием специально построенных полиномов можно вычислить спектры Фурье и найти амплитуды $a_n(t)$, описывающие возбуждение квантовой системы. Установленное взаимно однозначное соответствие между характеристиками полиномов и коэффициентами уравнений позволяет вычислить все характеристики квантовых систем, возбуждение которых описывается решением. Переход в спектральное пространство позволяет обойтись без интегрирования уравнений, сведя задачу к вычислению конечной суммы от 0 до N .

Ключевые слова: когерентное лазерное возбуждение квантовых систем, полуклассическая модель Раби, Фурье-спектры, дискретные ортогональные полиномы в Фурье-пространстве, точные решения дифференциальных уравнений.

Simulation of the coherent excitation of molecules by laser radiation is carried out. It is based on simple models, i. e., quantum systems with $N+1$ energy level. The exact solution of differential equations describing the process in terms of the simplest semi-classical Rabi model is obtained without integration of differential equations but discrete mathematics with Fourier transform and discrete orthogonal polynomials is used. The Fourier transform realizes the transition from continuum t -space with time-dependent probability amplitudes $a_n(t)$ of a quantum system to discrete Fourier space where Fourier spectra $F_n(\omega)$ are spectral images of $a_n(t)$. The spectra are shown to be described by some discrete orthogonal polynomial sequence corresponding to the quantum system. The example shows how using specially constructed polynomials one can calculate the Fourier spectra and find the probability amplitudes $a_n(t)$ describing the excitation of a quantum system. The established one-to-one correspondence between the polynomial characteristics and the coefficients of differential equations allows us to calculate all the characteristics of quantum systems whose excitation is described by the solution. Thus, the transition from functions $a_n(t)$ to their spectral space allows one to solve some dynamical equations without integration reducing the problem to calculating the finite sum from 0 to N .

Keywords: coherent laser excitation of quantum systems, semi-classical Rabi model, Fourier spectra, discrete orthogonal polynomials in Fourier space, exact solutions of differential equations.

FOURIER SPECTRA OF QUANTUM SYSTEMS EXCITED BY LASER RADIATION AND THE EXACT SOLUTION OF THEIR DYNAMICS EQUATIONS WITHOUT INTEGRATION

V. A. Savva*, S. Banjak (Belarusian State Technological University, Minsk, 220006, Belarus; e-mail: vadimsavva@yandex.by)

Введение. Фундаментальная модель Раби, описывающая взаимодействия молекулы, атома и т. д. с когерентным (лазерным) излучением, является предметом многочисленных исследований (см., например, [1, 2] и ссылки там). Модель стала особенно востребованной после реализации и применения сверхкоротких лазерных импульсов, переводящих среды в состояния квантовой когерентности. Это порождает надежды на многообещающее использование таких состояний сред в лазерной химии для управления химическими реакциями (фемтохимии) [3, 4], в спектроскопии для достижения высоких уровней селективного возбуждения молекул с целью исследования скоростей внутримолекулярного перераспределения энергии в них [5], создания квантовых компьютеров [6]. Подобные применения связаны с полуклассической моделью Раби. С квантовым вариантом модели, где основной интерес переносится на состояния поля в резонаторе и квантовые свойства излучения, связаны прогнозы и попытки создания квантовой связи, надежных способов передачи и обработки информации [7, 8]. Большое внимание уделяется динамике процесса, которая не сводится к синусоидальным пульсациям Раби, а может быть достаточно сложной [8]. Из недавних отметим работы, связанные с полуклассической проблемой [9—12] и квантовой задачей Раби [13—16].

Цель настоящей работы — показать, как с использованием дискретной математики, дискретного преобразования Фурье и дискретных ортогональных полиномов, описывающих Фурье-спектры искомым функций времени, удастся построить точное аналитическое решение системы дифференциальных уравнений. В силу вышеизложенного фундаментальная проблема Раби в ее “простом” полуклассическом варианте взята в качестве примера. Обычно при теоретическом описании и исследовании процессов природы решают дифференциальные уравнения разного типа, которые более 300 лет оставались единственным средством описания процессов с целью оптимизации и управления. С середины XX в. ситуация стала меняться благодаря разработанной теории алгоритмов, символьных вычислений, программированию и, конечно, мощным компьютерам. Дискретная математика достигла расцвета, потеснила высшую математику, сформировала, по существу, новый вид науки. С ее помощью успешно решаются аналитически (не только численно!) многие типы дифференциальных уравнений и более сложные задачи, она успешно “работает” с разнообразной информацией, делает возможным создание и внедрение “умных” роботов, систем автоматического перевода. Стало возможным приступить к моделированию работы мозга, созданию сложных систем искусственного интеллекта.

В настоящей работе на примере полуклассической проблемы Раби изложен нетрадиционный подход к построению точного решения уравнений, описывающих процесс когерентного возбуждения квантовых систем, происходящий под действием излучения заданного лазерного импульса постоянной амплитуды. Метод не требует интегрирования, использует дискретную математику, спектры Фурье, выражаемые через дискретные ортогональные полиномы, и позволяет получить аналитическое решение для динамики разнообразных квантовых систем, в том числе обладающих неэквидистантным расположением энергетических уровней и при возбуждении излучением с несущей частотой, не находящейся в точном резонансе с собственными частотами переходов квантовой системы. Алгоритм решения проиллюстрирован на примере системы с несколькими уровнями энергии, он допускает естественное обобщение. Метод является “спектральным”. В его основе лежит переход от искомым функций времени $\{a_n(t)\}_0^N$ -амплитуд вероятности $(N+1)$ -уровневой квантовой системы к их

Фурье-образам $\{F_n(\omega)\}_0^N$ — спектрам Фурье. При этом использовано дискретное преобразование Фурье, т. е. спектральное пространство дискретно. Это естественно, поскольку амплитуды $a_n(t)$ при $N < \infty$ — периодические функции времени. Рассмотрены системы, обладающие однородным Фурье-пространством, т. е. спектры $F_n(\omega)$ являются функциями дискретного аргумента ω , заданного на равномерной сетке. Это ограничение не принципиально. Показано также, что Фурье-спектры выражаются через ортогональные полиномы и используются для построения решения системы дифференциальных уравнений рассматриваемого типа. Полиномы заданы в пространстве Фурье амплитуд вероятности квантовой системы. Алгоритм построения решения прост. Выбрав некоторую последовательность дискретных ортогональных полиномов, соответствующую квантовой системе, строим спектры, вычисляем амплитуды вероятности, находим распределение квантовой системы по уровням энергии. Используя связи между характеристиками полиномов и коэффициентами дифференциальных уравнений, находим эти коэффициенты и определяем характеристики возбуждаемых квантовых систем, для которых построено решение, описывающее их когерентную динамику.

Модель возбуждаемой среды и динамические уравнения. Среда моделируется квантовой системой, содержащей $(N+1)$ -уровень энергии E_0, E_1, \dots, E_N (N — натуральное число). Излучение $E_\ell \cos(\omega_\ell \tau)$, имеющее неизменные амплитуду E_ℓ и частоту ω_ℓ , включается в момент $\tau = 0$, вызывает переходы между соседними уровнями. На рис. 1 представлены нижние уровни квантовой системы, показаны два перехода $0 \leftrightarrow 1$ и $1 \leftrightarrow 2$, с которыми взаимодействует излучение, матричные элементы переходов, частотные отстройки. Каждый переход $E_{n-1} \leftrightarrow E_n$ характеризуется собственной частотой $\omega_n = (E_n - E_{n-1})/\hbar$ и дипольным моментом $\mu_{n-1,n} \equiv \mu_n$, отражающим интенсивность взаимодействия перехода с излучением. Частота излучения ω_ℓ может не совпадать с собственной частотой ω_n перехода, поэтому переход может иметь также отстройку частоты $\Delta\omega_n = \omega_n - \omega_\ell$. Таким образом, каждый n -й переход описывается величинами $\mu_n, \omega_n, \Delta\omega_n$.

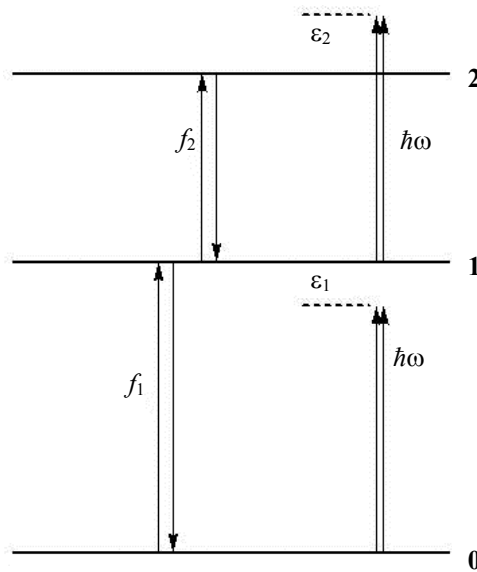


Рис. 1. Схема уровней квантовой системы, возбуждаемой излучением: $\hbar\omega$ — квант излучения, ϵ_1, ϵ_2 — частотные отстройки на переходах; f_1, f_2 — матричные элементы радиационных переходов

Для комплекснозначных $a_n(\tau)$ -амплитуд вероятности обнаружить систему на уровне n в момент τ уравнение Шрёдингера, описывающее динамику когерентного возбуждения, в безразмерных переменных имеет вид

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

Этот широко применяемый метод полуклассического описания процесса уравнениями (1) называют резонансным приближением, или методом вращающегося поля. Здесь опущены члены, содержащие суммарные частоты $\omega_n + \omega_\ell$, что практически не влияет на динамику. В уравнениях (1) содержится безразмерная функция дипольных моментов f_n ; $f_1 = 1$ относительно момента первого перехода $0 \leftrightarrow 1$, а именно $\mu_n = \mu_1 f_n$. Она характеризует все переходы, взаимодействующие с излучением. Введение частоты Раби $\Omega_R = \mu_1 E_\ell / 2\hbar$ первого перехода позволяет перейти к безразмерным величинам: времени $t = \Omega_R \tau$ и частотным отстройкам $\epsilon_n = (\omega_n - \omega_\ell) / \Omega_R$ на переходах. В итоге квантовая система характеризуется параметром N — количеством взаимодействующих с излучением переходов и двумя наборами величин f_n, ϵ_n ; это коэффициенты уравнений (1); число уравнений (1) есть $N+1$. Экспериментально измеряемыми величинами являются населенности энергетических уровней $\rho_n(t) = a_n^*(t) a_n(t) = D(n, t; N, f_n, \epsilon_n)$, образующие дискретное статистическое распределение, построение которого — конечная цель расчетов. Исследование его зависимости от характеристик процесса, свойств квантовой системы и излучения открывает пути к управлению процессом когерентного возбуждения молекул и атомов и его технологическому использованию.

Алгоритм решения системы дифференциальных уравнений прост и физически нагляден. Дискретное преобразование Фурье осуществляет переход от функций $a_n(t)$ непрерывного аргумента в Фурье-пространство этих функций, т. е. к их спектрам $F_n(\omega)$ — функциям дискретного аргумента ω . Действительно, $a_n(t)$ являются периодическими функциями времени, если $N < \infty$. Решение системы дифференциальных уравнений (1) ищем в виде

$$a_n(t) = e^{is_n t} \sum_{\omega=\omega_0}^{\omega_N} \tilde{F}_n(\omega) e^{i\omega t} = e^{is_n t} \sum_{x=0}^N F_n(x) e^{irxt}. \quad (2)$$

Далее рассмотрим простейший случай — однородное пространство Фурье, где $\omega = rx$, $x = 0, 1, \dots, N$, т. е. частоты Фурье расположены эквидистантно. Константы s_n и r определены ниже.

Предполагаем, что дискретные спектры Фурье выражаются как

$$F_n(x) = \sigma(x) \hat{p}_0 \hat{p}_n(x), \quad n, x = 0, 1, \dots, N, \quad (3)$$

через некоторую последовательность дискретных полиномов $\{\hat{p}_n(x)\}_{n=0}^N$ в этом пространстве, соответствующих/адекватных рассматриваемой квантовой системе, так же как и уравнениям (1). Наличие \hat{p}_0 в (3) обусловлено начальными условиями для уравнений (1) — в момент $t = 0$ система находится в основном энергетическом состоянии. Полиномы ортогональны

$$\sum_{x=0}^N \sigma(x) \hat{p}_m(x) \hat{p}_n(x) = \delta_{m,n} \quad (4)$$

с дискретной весовой функцией $\sigma(x)$ и нормированы.

Важнейшее свойство ортогональных полиномов — трехчленное рекуррентное соотношение

$$\bar{f}_{n+1} \hat{p}_{n+1}(x) + \bar{f}_n \hat{p}_{n-1}(x) = (rx + s_n) \hat{p}_n(x), \quad (5)$$

которому удовлетворяют полиномы как непрерывного, так и дискретного аргумента [17—19]. Здесь оно записано в нетрадиционной, но эквивалентной форме с нормировкой $\bar{f}_1 = 1$. В настоящее время создано многообразие ортогональных полиномов, классических и новых [19]. Непрерывные полиномы широко используют в различных разделах естествознания и техники, дискретные полиномы — гораздо реже.

Ранее мы применяли классические полиномы непрерывного и дискретного аргумента для построения аналитических решений уравнений процесса когерентного возбуждения многоуровневых квантовых систем [20—22]. Получен ряд результатов, интересных для физических приложений. Особенно содержательными оказались классические дискретные полиномы (Шарлье, Кравчука) по сравнению с полиномами непрерывного аргумента. Так, решения, описывающие возбуждение обеих базовых моделей квантовой физики — гармонического осциллятора ($N \rightarrow \infty$) и двухуровневой системы ($N = 1$), построены с использованием полиномов Кравчука. Динамика этих систем описывается единым статистическим (биномиальным) распределением населенностей энергетических уровней в любой момент времени, пока действует излучение, и при любой отстройке частоты излучения от собственной частоты квантовой системы [22].

Недостатком в использовании классических полиномов для обсуждаемой задачи стало то, что они приводили к решениям, описывающим возбуждение квантовых систем с эквидистантно расположенными энергетическими уровнями. Актуально попытаться построить точные решения для динамики более реальных моделей, обладающих уровнями, расположенными неэквидистантно.

Можно использовать полиномы с известными весовой функцией $\sigma(x)$ и коэффициентами \bar{f}_n, r, s_n рекуррентного соотношения (5). Поскольку обычно излучение взаимодействует с небольшим числом переходов, нетрудно построить новые дискретные полиномы, задавая, например, весовую функцию, и по известной процедуре определять коэффициенты рекуррентного соотношения [17—19]. Амплитуды вероятности $a_n(t)$ находим, вычисляя конечную сумму (2). Решение получается без интегрирования, суммированием с использованием конечной дискретной математики. Таким образом, задавая дискретный набор Фурье-частот, весовую функцию, строим последовательность полиномов $\hat{p}_n(x)$, вычисляем спектры Фурье $F_n(x)$ по формуле (3) и находим решение $a_n(t)$ уравнений (1) по формуле (2). Видно, что амплитуды вероятности являются спектрально ограниченными функциями, если $N < \infty$. Построенное решение описывает когерентную динамику некоторых $(N+1)$ -уровневых квантовых систем.

Коэффициенты уравнений динамики и характеристики квантовых систем. Несложно определить коэффициенты уравнений (1), решение которых будет построено (см. ниже), и характеристики систем, динамика которых точно описывается этим решением, т. е. обосновать предположение (3). Подставляя (2), (3) в систему уравнений (1), получаем

$$\sum_{x=0}^N \sigma(x) \hat{p}_0 e^{ixt} \left\{ e^{-i(\varepsilon_{n+1} - (s_{n+1} - s_n))t} f_{n+1} \hat{p}_{n+1}(x) + e^{i(\varepsilon_n - (s_n - s_{n-1}))t} f_n \hat{p}_{n-1}(x) - (rx + s_n) \hat{p}_n(x) \right\} = 0. \quad (6)$$

При $\varepsilon_n = s_n - s_{n-1}$, $\varepsilon_{n+1} = s_{n+1} - s_n$ выражение (6) удовлетворяется, если

$$f_{n+1} \hat{p}_{n+1}(x) + f_n \hat{p}_{n-1}(x) = (rx + s_n) \hat{p}_n(x). \quad (7)$$

Сравнение рекуррентных соотношений (7) и (5) показывает, что (2), (3) есть решение уравнений (1), если полиномы в (3), определяющие спектры Фурье, связаны с коэффициентами f_n, s_n уравнений (1) следующим образом:

$$f_n = \bar{f}_n, \quad \varepsilon_n = s_n - s_{n-1}, \quad (8)$$

где \bar{f}_n, s_n , как и r , входящий в (2), — коэффициенты рекуррентного соотношения для полиномов. Взаимно однозначное соответствие между коэффициентами уравнений и характеристиками полиномов показывает, что системе уравнений соответствует определенная последовательность полиномов со своей весовой функцией и рекуррентным соотношением. Это позволяет решать обратную задачу: исходя из полиномов, строить решение, описывающее когерентное возбуждение соответствующих квантовых систем, динамика которых описывается уравнениями (1). Поскольку коэффициенты уравнений (1) связаны с характеристиками квантовой системы и с параметрами, определяющими условия ее возбуждения (частотой, амплитудой излучения), можно их найти. Далее показано, как работает этот алгоритм построения решения, использующий дискретные ортогональные полиномы и не требующий интегрирования квантовых динамических уравнений (1).

Пример. Рассмотрим простейший случай — трехуровневую квантовую систему $N = 2$. Строим последовательность ортогональных полиномов по задаваемой весовой функции. Пусть весовая функция полиномов имеет вид:

$$\sigma(x) = \{\sigma(0) = 0.2, \sigma(1) = 0.3; \sigma(2) = 0.5\}, \quad \sum_{x=0}^{N=2} \sigma(x) = 1. \quad (9)$$

Моменты $c_k = \sum_{x=0}^{N=2} x^k \sigma(x)$ весовой функции $\{c_0, c_1, c_2, c_3\} = \{1; 1.3; 2.3; 4.3\}$ как элементы специальных определителей позволяют точно вычислить ненормированные полиномы

$$\{p_0 \equiv 1; \quad p_1(x) = x - 1.3; \quad p_2(x) = 0.61x^2 - 1.31x + 0.3\}.$$

Квадраты их норм $d_n^2 = \sum_{x=0}^{N=2} \sigma(x) p_n^2(x)$ (точные результаты):

$$\{d_0^2 = 1; \quad d_1^2 = 0.61; \quad d_2^2 = 0.0732\}.$$

Нормированные полиномы имеют вид $\hat{p}_n(x) = p_n(x) / d_n$. Вычисляем коэффициенты рекуррентного соотношения (5):

$$r = \frac{1}{d_1}, \quad \bar{f}_2 = \frac{d_2}{d_1^4}, \quad s_0 = -\frac{1.3}{d_1}, \quad s_1 = -\frac{0.517}{d_1^3}, \quad s_2 = -\frac{0.52}{d_1^3}. \quad (10)$$

Эти данные определяют параметры квантовых систем: $f_1 = 1; f_2 = \sqrt{0.0732} / 0.3721 \approx 0.727$, т. е. второй переход слабее взаимодействует с излучением. Частотные отстройки на переходах различаются:

$$\varepsilon_1 = s_1 - s_0 = +\frac{0.276}{d_1^3}, \quad \varepsilon_2 = s_2 - s_1 = -\frac{0.003}{d_1^3}. \quad (11)$$

Частота излучения почти совпадает с собственной частотой второго перехода и заметно отличается от частоты первого перехода. Видим, что энергетические уровни расположены неэквидистантно, причем отстройки обладают разными знаками.

Решение уравнений и дискретная функция распределения частиц по уровням. По формулам (3) и (2) вычислим спектры Фурье и амплитуды вероятности, т. е. получим решение уравнений (1):

$$\begin{aligned} a_0 &= e^{i s_0 t} \{1 / d_0\} \{0.2 + 0.3 e^{i r t} + 0.5 e^{i 2 r t}\}, \\ a_1 &= e^{i s_1 t} \{1 / d_1\} \{-0.26 - 0.09 e^{i r t} + 0.35 e^{i 2 r t}\}, \\ a_2 &= e^{i s_2 t} \{1 / d_2\} \{0.06 - 0.12 e^{i r t} + 0.06 e^{i 2 r t}\}. \end{aligned} \quad (12)$$

Это точное аналитическое решение. Населенности энергетических уровней:

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 0.38 + 0.42 \cos r t + 0.2 \cos 2 r t, \\ \rho_1 &= (1 / 0.61) \{0.1982 - 0.0162 \cos r t - 0.1820 \cos 2 r t\}, \\ \rho_2 &= (1 / 0.0732) \{0.0216 - 0.0288 \cos r t + 0.0072 \cos 2 r t\}, \end{aligned} \quad (13)$$

т. е. функцию распределения можно записать в более удобном эквивалентном виде

$$\begin{aligned} \rho_0(t) &= 0.2 r^2 0.61 (0.9 + 2.1 \varphi + 2 \varphi^2), \\ \rho_1(t) &= 0.2 r^2 (1 - \varphi) (1.901 + 1.82 \varphi), \\ \rho_2(t) &= 0.2 r^2 0.6 (1 - \varphi)^2, \\ \varphi &= \cos r t. \end{aligned} \quad (14)$$

Временная зависимость населенностей энергетических уровней представлена на рис. 2.

Рассмотрим, что дает предложенный алгоритм и динамику каких трехуровневых систем он описывает при конкретно заданной функции $\sigma(x)$, не содержащей параметров. Пусть некоторая система (#1) с дипольными моментами $\mu_1^{(\#1)}$ и $\mu_2^{(\#1)} = f_2 \mu_1^{(\#1)}$ и собственными частотами $\omega_1^{(\#1)}$ и $\omega_2^{(\#1)}$ переходов возбуждается излучением с амплитудой $E_\ell^{(\#1)}$ и несущей частотой $\omega_\ell^{(\#1)}$ и динамика этой системы описывается функцией распределения (14). Воспользуемся излучением другой амплитуды $E_\ell^{(\#2)} = k E_\ell^{(\#1)}$, измененной в k раз. Какими должны быть характеристики системы (#2), чтобы ее динамика была тождественна динамике системы (#1)? Ответ очевиден: система (#2) должна иметь дипольные моменты $\mu_1^{(\#2)} = \mu_1^{(\#1)} / k$, $\mu_2^{(\#2)} = \mu_2^{(\#1)} / k$. Действительно, тогда частота Раби $\Omega_R = \mu_1 E_\ell / 2\hbar$ систем (#1) и (#2) одинаковая, как и “собственное” время $r t = r \Omega_R \tau$ (τ — время, с), и скорости процессов одинаковы. Населенность ρ_2 достигает максимума в один и тот же момент τ_{\max} в обоих процессах, когда $r \Omega_R \tau_{\max} = \pi$; $(\rho_2)_{\max} = 0.48 r^2 = 0.48 / 0.61 = 0.7869$ также одинаковое. Таких систем бесконечно много. Они имеют различные μ_1 , каждая возбуждается излучением соответствующей амплитуды, имеют одинаковые частоты Раби, одинаковую (тождественную) динамику. Алгоритм, реализованный с заданной функцией $\sigma(x)$, не содержащей свободных параметров, “выбирает” множество систем с тождественной динамикой.

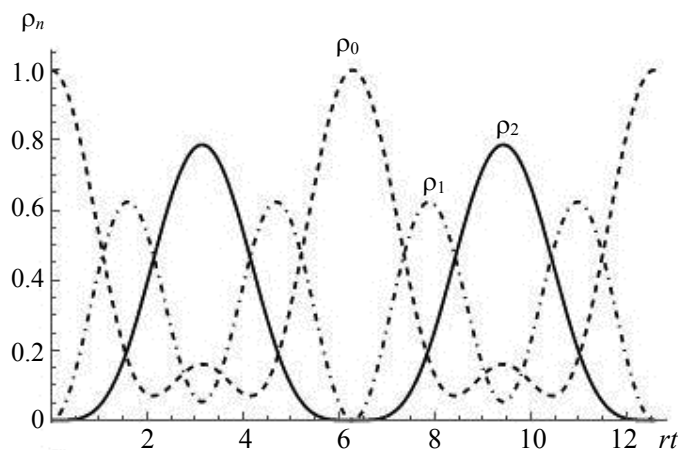


Рис. 2. Зависимость населенностей трехуровневых квантовых систем от времени rt

Помимо дипольных, силовых характеристик все системы и излучение имеют частотные характеристики $\omega_1, \omega_2, \omega_\ell$. Они образуют две безразмерные величины

$$\frac{\omega_1 - \omega_\ell}{\Omega_R} = \varepsilon_1, \quad \frac{\omega_2 - \omega_\ell}{\Omega_R} = \varepsilon_2, \quad (15)$$

причем $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — заданные постоянные. Покажем, что в алгоритме и решении (14) содержится множество систем, динамика которых подобна с коэффициентом подобия k динамике системы (#1). Это системы с частотой Раби $\Omega_R^{(\#2)} = k\Omega_R^{(\#1)}$. Частоты Раби системы (#2) изменены в k раз вследствие изменения амплитуды поля, но дипольные моменты совпадают с моментами системы (#1). Таких систем также бесконечно много, выражение (14) по-прежнему описывает их функцию распределения, а ее зависимость в координатах населенности сжата ($k > 1$) или растянута ($k < 1$) по сравнению с представленной на рис. 2. Каковы же характеристики этих систем с k -подобной динамикой? Это системы с измененными собственными частотами ω_1 и ω_2 переходов. Поскольку $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — константы, при изменении частоты Раби условие (15) может быть выполнено. Например, для ε_1 получаем

$$\varepsilon_1^{(\#1)} = \frac{\omega_1^{(\#1)} - \omega_\ell}{\Omega_R^{(\#1)}} = \varepsilon_1^{(\#2)} = \frac{\omega_1^{(\#2)} - \omega_\ell}{\Omega_R^{(\#2)}} = \frac{\omega_1^{(\#2)} - \omega_\ell}{k\Omega_R^{(\#1)}},$$

отсюда

$$\omega_1^{(\#2)} = \omega_1^{(\#1)} + (k-1)(\omega_1^{(\#1)} - \omega_\ell), \quad \omega_2^{(\#2)} = \omega_2^{(\#1)} + (k-1)(\omega_2^{(\#1)} - \omega_\ell). \quad (16)$$

Второе выражение в (16) получено аналогично. Системы (#2) с таким изменением частот переходов имеют k -подобную динамику независимо от того, каким из двух способов изменяется частота Раби. Коэффициент подобия может быть любым положительным числом $0 < k < \infty$, если при этом выполняются условия (15) и (16). Возможны и более сложные случаи, когда системы имеют k -подобную динамику, а условие (15) выполняется при одновременном изменении собственных частот переходов и частоты излучения.

Таким образом, предлагаемый алгоритм приводит к рассмотрению квантовых систем, “одетых” полем излучения, поскольку коэффициенты уравнений (1) включают в себя физические параметры, характеризующие как квантовую систему, так и электромагнитное излучение. Алгоритм позволяет построить решение, определить системы, обладающие подобной динамикой, и показывает, что таких систем бесконечно много, их динамика описывается решением (12) и функцией распределения (14). Существует обширное семейство, содержащее квантовые системы, имеющие разные дипольные моменты, расположения уровней, возбуждаемые излучением различных частот и амплитуд, обладающие подобной (универсальной) когерентной динамикой. Алгоритм позволяет обнаружить свойство подобия динамики, выделить такие семейства, построить единое аналитическое решение для их динамики. Алгоритм можно обобщить, используя другие дискретные функции в качестве весовой или вводя в $\sigma(x)$ дополнительные параметры. В работе [23] впервые введен дополнительный параметр a в весовую функцию. Построено соответствующее аналитическое решение, описывающее динамику однопараметрического семейства квантовых трехуровневых систем, куда входят системы с неэквидистантно расположенными уровнями и три системы с эквидистантными уровнями энергии при $a = \{0; \pm 1 / (2\sqrt{3})\}$.

Заключение. Впервые показано, что для решения системы рассматриваемых уравнений можно не ограничиваться известными полиномами, а строить любые дискретные ортогональные полиномы, что существенно расширяет возможности предложенного алгоритма, не требующего интегрирования, т. е. использующего дискретную математику. Дан пример построения системы дискретных полиномов, получено решение для ряда трехуровневых квантовых систем и определены их характеристики. Это решение описывает динамику квантовых систем, обладающих неэквидистантным расположением энергетических уровней. Такая модель более близка к реальным молекулам. Для квантовых систем с большим числом переходов, взаимодействующих с излучением, можно использовать систему компьютерной алгебры, например систему Mathematica. Показано, что среди всех квантовых систем, описываемых уравнениями (1), существует много квантовых систем, обладающих k -подобной динамикой.

-
- [1] **D. Braak, Q.-H. Chen, M. T. Batchelor, E. Solano.** *J. Phys. A: Math. Theor.*, **49** (2016) 300301
- [2] **Q. Xie, H. Zhong, M. T. Batchelor, C. Lee.** *J. Phys. A: Math. Theor.*, **50**, N 11 (2017) 113001
- [3] **A. H. Zewail.** *Femtochemistry. The Nobel Prize in Chemistry* (1999)
- [4] **А. А. Ищенко, С. А. Асеев, В. Н. Баграташвили, В. Я. Панченко, Е. А. Рябов.** *УФН*, **184**, № 7 (2014) 681—722
- [5] **Г. Н. Макаров.** *УФН*, **187**, № 3 (2017) 241—276
- [6] **F. Arute, K. Arya, R. Babbush.** *Nature*, **574** (2019) 505—510
- [7] **N. Gisin.** *Quantum Chance, Non-Locality, Teleportation and Other Quantum Marvels*, Springer (2014)
- [8] **Н. Жизан.** *Квантовая случайность*, АНФ, Москва (2018)]
- [9] **M. Shapiro, P. Brumer.** *Quantum Control of Molecular Processes*, Wiley-VCH (2012).
- [10] **L. O. Castañõs.** *Opt. Commun.*, **430** (2019) 176—188
- [11] **L. O. Castañõs.** *Phys. Lett. A*, **383** (2019) 1997—2003
- [12] **R. Grimaudo, A. S. M. de Castro, H. Nakazato, A. Messina.** *Ann. Phys.*, **530** (2018) 1800198
- [13] **K. Dai, H. Wu, P. Zhao, M. Li, Q. Liu, G. Xue, X. Tan, H. Yu, Y. Yu.** *Appl. Phys. Lett.*, **111** (2017) 242601
- [14] **S. Felicetti, E. Rico, C. Sabin, T. Ockenfels, J. Koch, M. Leder, C. Grossert, M. Weitz, E. Solano.** *Phys. Rev. A*, **95** (2017) 013827
- [15] **A. Dureau, Y. Meng, P. Schneeweiss, A. Rauschenbeutel.** *Phys. Rev. Lett.*, **121** (2018) 253603
- [16] **I. D. Feranchuk, A. V. Leonov, O. D. Skoromnik.** *J. Phys. A: Math. Theor.*, **49**, N 45 (2016) 454001
- [17] **P. Schneeweiss, A. Dureau, C. Sayrin.** *Phys. Rev. A*, **98** (2018) 021801(R)
- [18] **A. Erderlyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. G. Tricomi.** *Higher Transcendental Functions*, McGraw-Hill (1953)
- [19] **A. F. Nikiforov, S. K. Suslov, V. B. Uvarov.** *Classical Orthogonal Polynomials of a Discrete Variable*, Berlin-Heidelberg, Springer (2012)
- [20] **R. Koekoek, P. A. Leskey, R. F. Swarttouw.** *Hypergeometric Orthogonal Polynomials and their q -Analogues*, Heidelberg, Springer (2000)
- [21] **В. А. Савва, В. И. Зеленков, А. С. Мазуренко.** *Журн. прикл. спектр.*, **58** (1993) 256—270
- [22] **V. A. Savva, V. I. Zelenkov, A. S. Mazurenko.** *J. Appl. Spectr.*, **58** (1993) 187—200]
- [23] **V. Savva, V. Zelenkov, A. Mazurenko.** *Integral Transform. Special Funct.*, **10**, N 3–4 (2000) 299—310
- [24] **В. А. Савва, В. И. Зеленков, О. В. Хлус.** В сб. “Development of the Mathematical Ideas of Mykhailo Kravchuk (Krawtchouk)”, Kyiv–New York (2004) 242—258
- [25] **S. Banjak.** *J. Interdiscipl. Math.*, **22**, N 6 (2019) 1051—1059