

Аннотация

Вероятность квантовых переходов молекулы между ее состояниями под действием электромагнитного поля представляется как интеграл по траекториям от действительного знакопеременного функционала. Предложен метод вычисления интеграла с использованием рекуррентных соотношений. Исследовано поведение двухатомной молекулы под действием импульсов лазерного излучения вне рамок теории возмущений.

Ключевые слова: Квантовая система; Квантовый переход; Функциональный интеграл; Знакопеременный действительный функционал

Введение

В настоящее время активно изучаются нелинейные процессы взаимодействия микросистем с лазерным излучением различной конфигурации и различной степени интенсивности (возбуждение и диссоциация молекул, ионизация атомов под действием лазерного излучения и др.). Представляется актуальным исследовать вероятности переходов в многоуровневых квантовых системах вне рамок теории возмущений и приближений, которые накладывают ограничения на структуру лазерного излучения – как по интенсивности, так и по форме импульсов.

Изучение процессов взаимодействия наносистем с электромагнитным излучением основано на применении функционального интегрирования. Представление вероятностей квантовых переходов интегралами по траекториям от действительного знакопеременного функционала впервые было предложено Г. В. Рязановым [1]. Однако на практике вычисление вероятностей по данному методу сопряжено с рядом трудностей из-за большой размерности входящих в выражение интегралов. Поэтому актуальной задачей является поиск метода расчета предложенных интегралов, который позволит проводить вычисления на персональных компьютерах за ограниченное время.

1. Модель квантовой системы

Рассмотрим квантовую систему, взаимодействующую с внешним электромагнитным полем. В качестве системы мы можем рассматривать валентный электрон в атоме или молекуле или молекулу, состоящую из двух и более атомов. Квантовая система имеет определенный дискретный спектр энергии. Значения энергии и соответствующие волновые функции определяются конкретной структурой исследуемой системы. Будем описывать систему с гамильтонианом \hat{H}_{syst} , энергетический уровень и состояние системы определяются уравнением

$$\hat{H}_{syst}|n\rangle = E_n|n\rangle, \langle n'|n\rangle = \delta_{nn'}, \sum_n |n\rangle\langle n| = 1, n = 1, 2, \dots \quad (1)$$

где E_n – значение энергии в квантовом состоянии $|n\rangle$, \hat{H}_{syst} – гамильтониан системы, который не зависит явно от времени t . Заметим, что, учитывая (1), гамильтониан системы можно представить в виде

$$\hat{H}_{syst} = \sum_n E_n |n\rangle\langle n|. \quad (2)$$

Рассмотрим воздействие электромагнитного поля на данную квантовую систему, которое будет характеризоваться оператором $\hat{V}_{inf}(t)$:

$$\hat{V}_{inf}(\tau) = qx E_0 V(\tau), \quad (3)$$

где q – заряд частицы, x – координата частицы, E_0 – амплитуда электромагнитного поля, $V(\tau)$ – скалярная функция, определяющая зависимость поля от времени τ .

Удобно представить (3) в виде

$$\hat{V}_{inf}(\tau) = \sum_{n',n} \hbar \Omega_{n'n}^R E_0 V(\tau) |n'\rangle\langle n|, \quad (4)$$

где

$$\Omega_{n'n}^R = \frac{qx_{n'n} E_0}{\hbar}, \quad (5)$$

– частота Раби; $x_{n'n} = |\langle n'|\hat{x}|n\rangle|$ – абсолютная величина матричного элемента оператора координаты.

Полный гамильтониан системы, взаимодействующей с внешним полем, имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{sys}} + \hat{V}_{\text{inf}}(t). \quad (6)$$

Будем описывать состояние системы в каждый момент времени статистическим оператором $\hat{\rho}(t)$, эволюция которого определяется уравнением Дирака

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}_D(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}_D^\dagger(t), \quad (7)$$

где $\hat{\rho}(0)$ – оператор в начальный момент времени, оператор эволюции представляется как

$$\hat{U}_D(t, t_0) = T \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}_D(\tau) d\tau\right], \quad (8)$$

где

$$\hat{V}_D(\tau) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{\text{sys}} \tau\right] \hat{V}_{\text{inf}}(\tau) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{\text{sys}} \tau\right]. \quad (9)$$

Используя выражения (4), (5), оператор взаимодействия (9) представим в виде, который удобен для конкретизации оператора эволюции:

$$\hat{V}_D(\tau) = \sum_{n', n} X_{n', n} |n'\rangle \langle n|, \quad (10)$$

где

$$X_{n', n}(\tau) = \hbar \Omega_{n', n}^R V(\tau) \exp[i\omega_{n', n} \tau], \quad (11)$$

$\omega_{n', n}$ – частота квантового перехода системы между стационарными состояниями с энергиями $E_{n'}$ и E_n :

$$\omega_{n', n} = \frac{E_{n'} - E_n}{\hbar}. \quad (12)$$

Запишем уравнение эволюции статистической матрицы плотности (7) в энергетическом представлении:

$$\rho_{n_f m_f}(t) = \sum_{n_0, m_0} \langle n_f | \hat{U}_D(t) | n_0 \rangle \rho_{n_0, m_0} \langle m_0 | \hat{U}_D^\dagger(t) | m_f \rangle, \quad (13)$$

где

$$\rho_{n_f m_f}(t) = \langle n_f | \hat{\rho}(t) | m_f \rangle, \quad \rho_{n_0, m_0} = \langle n_0 | \hat{\rho}(0) | m_0 \rangle. \quad (14)$$

Вектора $|n\rangle$, $|m\rangle$ являются собственными векторами гамильтониана системы H_{sys} .

Ядро оператора эволюции $\langle n_f | \hat{U}_D(t, 0) | n_0 \rangle$ представим в виде произведения элементарных ядер, используя групповые свойства оператора \hat{U}_D и полноту векторов-состояний $|n_k\rangle$:

$$\langle n_f | \hat{U}_D(t, 0) | n_0 \rangle = \sum_{n_1, \dots, n_K=1}^N \prod_{k=1}^{K+1} \langle n_k | \hat{U}_D(t_k, t_{k-1}) | n_{k-1} \rangle, \quad (15)$$

где $t_{K+1} = t$, $n_{K+1} = n_f$, $t_0 = 0$ и

$$\langle n_k | \hat{U}_D(t_k, t_{k-1}) | n_{k-1} \rangle = \langle n_k | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \hat{V}_D(\tau) d\tau\right] | n_{k-1} \rangle, \quad (16)$$

где $t_k > t_{k-1}$.

В работе [17] доказано, что для малых интервалов времени ($(t_k - t_{k-1}) \rightarrow 0$) ядро оператора эволюции $\langle n_k | \hat{U}_D(t_k, t_{k-1}) | n_{k-1} \rangle$ имеет вид

$$\langle n_k | \hat{U}_D(t_k, t_{k-1}) | n_{k-1} \rangle = \int_0^1 \exp[-i\Delta S[n_k, t_k; n_{k-1}, t_{k-1}; \xi_{k-1}]] d\xi_{k-1}, \quad (17)$$

где

$$\Delta S[n_k, t_k; n_{k-1}, t_{k-1}; \xi_{k-1}] = 2\pi(n_k - n_{k-1})\xi_{k-1} + 2\Omega_{n_k n_{k-1}}^R V(t_k) (\cos(2\pi(n_k - n_{k-1})\xi_{k-1} + \omega_{n_k, n_{k-1}} t_k)(t_k - t_{k-1})). \quad (18)$$

– безразмерное действие (в единицах \hbar) в энергетическом представлении.

Полная амплитуда перехода (15) с учетом (17) примет вид

$$\langle n_f | \hat{U}_D(t, 0) | n_0 \rangle = \sum_{n_1, \dots, n_K} \int_0^1 \dots \int_0^1 \exp[-iS[n_f, n_K, \xi_K; \dots; n_k, n_{k-1}, \xi_{k-1}; \dots; n_1, n_0, \xi_0]] d\xi_0 \dots d\xi_K \quad (19)$$

где действие S является функционалом на континууме траекторий, определяемых в дискретном пространстве переменных n_k , размеры которого определяются числом квантовых уровней исследуемой системы, и непрерывном ограниченном на $[0, 1]$ пространстве действительных переменных ξ_k :

$$S[n_f, n_K, \xi_K; \dots; n_k, n_{k-1}, \xi_{k-1}; \dots; n_1, n_0, \xi_0] = \sum_{k=1}^{K+1} \Delta S[n_k, n_{k-1}, \xi_{k-1}] \quad (20)$$

с условиями: $t_{K+1} = t$, $n_{K+1} = n_f$, $t_0 = 0$.

Уравнение эволюции матрицы плотности (13), с учетом (19), принимает вид:

$$\begin{aligned} \rho_{m_f, n_f}(t) = & \sum_{n_0, \dots, n_K} \sum_{m_0, \dots, m_K} \int_0^1 \dots \int_0^1 d\xi_0 \dots d\xi_K d\zeta_0 \dots d\zeta_K \rho_{n_0, m_0}(0) \times \\ & \times \exp[-i(S[n_f, n_K, \xi_K; \dots; n_k, n_{k-1}, \xi_{k-1}; \dots; n_1, n_0, \xi_0] - \\ & - S[m_f, m_K, \zeta_K; \dots; m_k, m_{k-1}, \zeta_{k-1}; \dots; m_1, m_0, \zeta_0])], \end{aligned} \quad (21)$$

где функционал $S[m_f, m_K, \zeta_K; \dots; m_1, m_0, \zeta_0]$ имеет точно такую же структуру, что и $S[n_f, n_K, \xi_K; \dots; n_1, n_0, \xi_0]$ с заменой n_i, ξ_i на m_i, ζ_i .

Вероятность квантового перехода из чистого квантового состояния $\hat{\rho}(0) = |n_{in}\rangle\langle n_{in}|$, когда

$$\rho_{n_0, m_0}(0) = \delta(n_0 - n_{in})\delta(m_0 - n_{in})$$

в начальный момент времени $t = 0$, в конечное чистое квантовое состояние

$$\hat{\rho}(t) = |n_f\rangle\langle n_f|$$

в момент времени t в соответствии с уравнением (21) принимает вид:

$$\begin{aligned} P(n_f, t | n_{in}, 0) = & \sum_{n_1, \dots, n_K} \sum_{m_1, \dots, m_K} \int_0^1 \dots \int_0^1 d\xi_0 \dots d\xi_K d\zeta_0 \dots d\zeta_K \times \\ & \times \exp[-i(S[n_f, \dots, n_k, \dots, n_{in}; \xi_K, \dots, \xi_k, \dots, \xi_0] - S[n_f, \dots, m_k, \dots, n_{in}; \zeta_K, \dots, \zeta_k, \dots, \zeta_0])]. \end{aligned} \quad (22)$$

В работе [17] доказано, что вероятность квантового перехода (22) может быть представлена в виде функционального интеграла с действительным подынтегральным функционалом:

$$\begin{aligned} P(n_f, t_f | n_{in}, 0) = & A_{norm} \sum_{n_1, \dots, n_K} \sum_{m_1, \dots, m_K} \int_0^1 \dots \int_0^1 \times \\ & \times \cos[S[n_f, n_K, \xi_K, m_K, \zeta_K; \dots; n_{k-1}, \xi_{k-1}, m_{k-1}, \zeta_{k-1}; \dots; n_{in}, \xi_0, \zeta_0]] d\xi_0 \dots d\xi_K d\zeta_0 \dots d\zeta_K, \end{aligned} \quad (23)$$

где

$$S[n_f, n_K, \xi_K, m_K, \zeta_K; \dots; n_{k-1}, \xi_{k-1}, m_{k-1}, \zeta_{k-1}; \dots; n_{in}, \xi_0, \zeta_0] = \sum_{k=1}^{K+1} \Delta S(n_k, m_k, m_{k-1}, n_{k-1}, \xi_{k-1}, \zeta_{k-1}), \quad (24)$$

действие в энергетическом представлении имеет вид (24); A_{norm} – константа, сохраняющая нормировочное условие $\sum_{n_f} P(n_f, t_f | n_{in}, 0) = 1$.

2. Алгоритм вычисления функционального интеграла

Вычисление вероятности квантовых переходов численными методами по формуле (23) приводит к правильным результатам в согласии с экспериментом. Однако практически расчеты можно проводить лишь для малых интервалов времени t . Для больших интервалов t резко возрастают требования к ресурсам вычислительной машины и ошибки вычислений. Поэтому для численных расчетов вероятностей в соответствии с формулой (23) предлагается метод рекуррентных соотношений, который позволит сократить время счета для больших t и повысить точность расчетов.

Для построения алгоритма численного расчета вероятности квантового перехода удобно ввести функцию вероятности, представленную выражением

$$\widetilde{P}_{cos}(n_{K+1}, m_{K+1}, t_{K+1}; n_{in}, t_0) = \widehat{R}_K \dots \widehat{R}_0 \{A^{-1} \cos[S[n_f, n_K, \xi_K, m_K, \zeta_K; \dots; n_k, n_{k-1}, \xi_{k-1}, m_{k-1}, \zeta_{k-1}; \dots; n_{in}, \xi_0, \zeta_0]]\}, \quad (25)$$

где $[S[n_f, n_K, \xi_K, m_K, \zeta_K; \dots; n_k, n_{k-1}, \xi_{k-1}, m_{k-1}, \zeta_{k-1}; \dots; n_{in}, \xi_0, \zeta_0]]$ представляется выражением (24).

Для упрощения записи выражения и математических преобразований введены операторы:

$$\widehat{R}_k = \sum_{n_k=1}^N \sum_{m_k=1}^N \int_0^1 d\xi_k \int_0^1 d\zeta_k, \quad k = 1, 2, \dots \quad (26)$$

Для фиксированных $m_0 = n_0 = n_{in}$ в начальный момент времени $t_0 = 0$

$$\widehat{R}_0 = \int_0^1 d\xi_0 \int_0^1 d\zeta_0. \quad (27)$$

Вероятность квантового перехода из состояния $|n_{in}\rangle$ в состояние $|n_{K+1}\rangle$ получаем из функции (25), полагая $m_{K+1} = n_{K+1}$:

$$P(n_{K+1}, t_{K+1}; n_{in}, 0) = \widetilde{P}_{cos}(n_{K+1}, m_{K+1}, t_{K+1}; n_{in}, 0) \delta(n_{K+1} - m_{K+1}), \quad (28)$$

где $\delta(n_{K+1} - m_{K+1})$ – символ Кронекера. нормировочная константа A определяется из условия:

$$\sum_{n_{K+1}=1}^N P(n_{K+1}, t_{K+1}; n_{in}, 0) = 1.$$

В формуле (25) разложим косинус суммы по рекуррентной формуле, то есть представим ее в виде (для простоты опустим нормировочный множитель):

$$\begin{aligned} \widetilde{P}_{cos}(n_{K+1}, m_{K+1}, t_{K+1}; n_{in}, t_0) &= \widehat{R}_K \dots \widehat{R}_0 \times \\ &\times \{ \cos[\Delta S(n_{K+1}, m_{K+1}, n_K, m_K, \xi_K, \zeta_K)] \cos[\sum_{k=1}^K \Delta S(n_k, n_{k-1}, m_k, m_{k-1}, \xi_k, \zeta_k)] - \\ &- \sin[\Delta S(n_{K+1}, m_{K+1}, n_K, m_K, \xi_K, \zeta_K)] \sin[\sum_{k=1}^K \Delta S(n_k, n_{k-1}, m_k, m_{k-1}, \xi_k, \zeta_k)] \}. \quad (29) \end{aligned}$$

С учетом свойств операторов $\widehat{R}_0 \dots \widehat{R}_K$ уравнение (29) представим в виде

$$\begin{aligned} \widetilde{P}_{cos}(n_{K+1}, m_{K+1}, t_{K+1}; n_{in}, 0) &= \\ &= \widehat{R}_K \cos[\Delta S(n_K, n_{K-1}, m_K, m_{K-1}, \xi_{K-1}, \zeta_{K-1})] \times \widehat{R}_{K-1} \dots \widehat{R}_0 \cos[\sum_{k=1}^K \Delta S(n_k, n_{k-1}, \xi_k, m_k, m_{k-1}, \zeta_k)] - \\ &- \widehat{R}_K \sin[\Delta S(n_K, m_K, n_{K-1}, m_{K-1}, \xi_{K-1}, \zeta_{K-1})] \times \widehat{R}_{K-1} \dots \widehat{R}_0 \sin[\sum_{k=1}^K \Delta S(n_k, n_{k-1}, \xi_k, m_k, m_{k-1}, \zeta_k)]. \quad (30) \end{aligned}$$

Введем вспомогательные функции вероятности в уравнении (30)

$$\widetilde{P}_{cos}(n_K, m_K, t_K; n_{in}, t_0) = \widehat{R}_{K-1} \widehat{R}_{K-2} \dots \widehat{R}_0 \cos[\Delta S(n_K, n_{K-1}, m_K, m_{K-1}, \xi_{K-1}, \zeta_{K-1})], \quad (31)$$

$$\widetilde{P}_{sin}(n_K, m_K, t_K; n_{in}, t_0) = \widehat{R}_{K-1} \widehat{R}_{K-2} \dots \widehat{R}_0 \sin[\Delta S(n_K, m_K, n_{K-1}, m_{K-1}, \xi_{K-1}, \zeta_{K-1})]. \quad (32)$$

Тогда (30) примет вид:

$$\begin{aligned} \widetilde{P}_{cos}(n_{K+1}, m_{K+1}, t_{K+1}; n_{in}, t_0) &= \widehat{R}_K \{ \cos[\Delta S(n_{K+1}, n_K, m_{K+1}, m_K, \xi_K, \zeta_K)] \widetilde{P}_{cos}(n_K, m_K, t_K; n_{in}, t_0) \} - \\ &- \widehat{R}_K \{ \sin[\Delta S(n_{K+1}, n_K, m_K, \xi_K, \zeta_K)] \widetilde{P}_{sin}(n_K, m_K, t_K; n_{in}, t_0) \} \quad (33) \end{aligned}$$

Формула (33) представляет собой рекуррентное соотношение между $\widetilde{P}_{cos}(n_{K+1}, m_{K+1}, t_{K+1}; n_{in}, t_0)$ и функциями, определенными на пространстве переменных меньшей размерности $\widetilde{P}_{cos}(n_K, m_K, t_K; n_{in}, t_0)$, $\widetilde{P}_{sin}(n_K, m_K, t_K; n_{in}, t_0)$. Для вычисления функций $\widetilde{P}_{cos}(n_k, m_k, t_k; n_{in}, t_0)$, $\widetilde{P}_{sin}(n_k, m_k, t_k; n_{in}, t_0)$ на k -м шаге используем аналогичные рекуррентные соотношения:

$$\begin{aligned} \widetilde{P}_{cos}(n_k, m_k, t_k; n_{in}, t_0) &= \widehat{R}_{k-1} \{ \cos[\Delta S(n_k, m_k, n_{k-1}, m_{k-1}, \xi_{k-1}, \zeta_{k-1})] \widetilde{P}_{cos}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n_{in}, t_0) \} - \\ &- \widehat{R}_{k-1} \{ \sin[\Delta S(n_k, m_k, n_{k-1}, m_{k-1}, \xi_{k-1}, \zeta_{k-1})] \widetilde{P}_{sin}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n_{in}, t_0) \}; \quad (34) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \widetilde{P}_{sin}(n_k, m_k, t_k; n_{in}, t_0) &= \widehat{R}_{k-1} \{ \sin[\Delta S(n_k, m_k, n_{k-1}, m_{k-1}, \xi_{k-1}, \zeta_{k-1})] \widetilde{P}_{cos}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n_{in}, t_0) \} + \\ &+ \widehat{R}_{k-1} \{ \cos[\Delta S(n_k, m_k, n_{k-1}, m_{k-1}, \xi_{k-1}, \zeta_{k-1})] \widetilde{P}_{sin}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n_{in}, t_0) \}. \quad (35) \end{aligned}$$

Таким образом, мы получаем цепочку уравнений, в которых на каждом шаге по k определяем значения функций $\widetilde{P}_{cos}(n_k, m_k, t_k; n_{in}, t_0)$, $\widetilde{P}_{sin}(n_k, m_k, t_k; n_{in}, t_0)$ через функции $\widetilde{P}_{cos}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n_{in}, t_0)$ и $\widetilde{P}_{sin}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n_{in}, t_0)$, которые мы определяем на $(k-1)$ -м шаге по рекуррентным формулам:

$$\begin{aligned} \widetilde{P}_{cos}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n_{in}, t_0) &= \widehat{R}_{k-2} \{ \cos[\Delta S(n_{k-1}, m_{k-1}, n_{k-2}, m_{k-2}, \xi_{k-2}, \zeta_{k-2})] \widetilde{P}_{cos}(n_{k-2}, m_{k-2}, t_{k-2}; n_{in}, t_0) \} - \\ &- \widehat{R}_{k-2} \{ \sin[\Delta S(n_{k-1}, m_{k-1}, n_{k-2}, m_{k-2}, \xi_{k-2}, \zeta_{k-2})] \widetilde{P}_{sin}(n_{k-2}, m_{k-2}, t_{k-2}; n_{in}, t_0) \}, \quad (36) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \widetilde{P}_{sin}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n_{in}, t_0) &= \widehat{R}_{k-2} \{ \sin[\Delta S(n_{k-1}, m_{k-1}, n_{k-2}, m_{k-2}, \xi_{k-2}, \zeta_{k-2})] \widetilde{P}_{cos}(n_{k-2}, m_{k-2}, t_{k-2}; n_{in}, t_0) \} + \\ &+ \widehat{R}_{k-2} \{ \cos[\Delta S(n_{k-1}, m_{k-1}, n_{k-2}, m_{k-2}, \xi_{k-2}, \zeta_{k-2})] \widetilde{P}_{sin}(n_{k-2}, m_{k-2}, t_{k-2}; n_{in}, t_0) \}. \quad (37) \end{aligned}$$

Для вычисления функций вероятности по предложенной схеме необходимо задать начальные условия. В начальный момент времени $t = 0$ система находится в состоянии $|n_{in}\rangle$, поэтому

$$\widetilde{P}_{cos}(n_{in}, m_{in}, 0; n_{in}, 0) = 1, \quad \widetilde{P}_{sin}(n_{in}, m_{in}, 0; n_{in}, 0) = 0.$$

Поэтому при $K = 1$ функции вероятности, согласно (33) и (35), имеют вид:

$$\widetilde{P}_{cos}(n_1, m_1, t_1; n_{in}, 0) = \widehat{R}_0[\cos\{\Delta S(n_1, m_1, n_{in}, \xi_0, \zeta_0)\}],$$

$$\widetilde{P}_{sin}(n_1, m_1, t_1; n_{in}, 0) = \widehat{R}_0\{\sin[\Delta S(n_1, m_1, n_{in}, \xi_0, \zeta_0)]\}.$$

Далее вычисления проводим по указанной схеме.

Вычислив значения $\widetilde{P}_{cos}(n_K, m_K, t_K; n_{in}, 0)$ и $\widetilde{P}_{sin}(n_K, m_K, t_K; n_{in}, 0)$ и нормировочную постоянную A , мы находим вероятность квантового перехода из состояния $|n_{in}\rangle$ в состояние $|n_K\rangle$:

$$P(n_K, t_K; n_{in}, 0) = \widetilde{P}_{cos}(n_K, m_K, t_K; n_{in}, 0)\delta(n_{K+1} - m_{K+1}).$$

3. Моделирование двухфотонных осцилляций Раби в трехуровневой системе

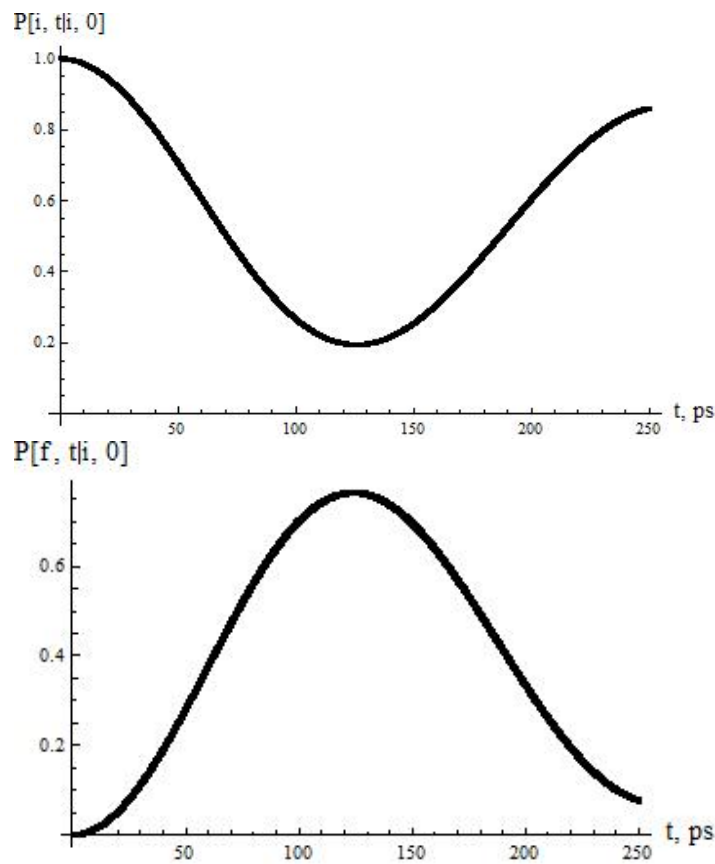


Рис. 1: Вероятности квантовых переходов между основным и возбужденным состояниями

В экспериментах Gentile и соавторов [18] исследовались двухфотонные переходы в кальции между ридберговскими (высоковозбужденными) состояниями $52p$ и $51p$. В экспериментальной установке валентный электрон в атомах кальция из своего основного состояния возбуждается в ридберговское состояние $52p$, которое мы обозначим $|i\rangle$. Из этого состояния атом может путем однофотонного излучения перейти в состояние $51d$, которое мы обозначим $|a\rangle$. С уровня $|a\rangle$ электрон с излучением одного фотона может перейти на уровень $|f\rangle$.

Частоты квантовых переходов между уровнями атомов определяются выражениями:

$$\nu_{ia} = \frac{E_i - E_a}{h} = 33.7 \text{ ГГц}, \quad \nu_{af} = \frac{E_a - E_f}{h} = 20.18 \text{ ГГц}, \quad \nu_{if} = \frac{E_i - E_f}{h} = 53.88 \text{ ГГц}.$$

Параметры осцилляций Раби задаются следующими выражениями:

$$\Omega_{ia}^R = 1319.47 \text{ МГц}, \quad \Omega_{af}^R = 1822.12 \text{ МГц}.$$

Атомы облучались электромагнитным полем частотой $\Omega = 169.27$ ГГц. Эксперимент позволял определить частоту Раби между уровнями $|i\rangle$ и $|f\rangle$ $\Omega_{if}^{R2} = 25.45$ МГц. Осцилляции Раби наблюдаются в результате двухфотонных переходов между уровнями $|i\rangle$ и $|f\rangle$.

Теоретическое объяснение наблюдаемых двухфотонных осцилляций Раби представляет большие трудности, так как данное явление является нелинейным процессом. Авторы эксперимента предложили объяснение на основании уравнения Шредингера, в котором делалось много упрощений в модели, так что формулы для оценки частоты Раби получились весьма приближенными. Проведенное численное моделирование на основании предложенного метода с использованием параметров, изложенных выше, привело к графикам, изображенным на рисунке 1. На рисунке 1 график (а) представляет вероятность пребывания атома в квантовом состоянии $|i\rangle$, (б) – $|f\rangle$. Из графиков видно, что период осцилляций Раби равен 250 пс, что соответствует наблюдаемой на опыте величине.

В данной статье проведены численные расчеты эволюции трехуровневой системы через функциональные интегралы (23) с использованием рекуррентных соотношений (33) – (35). На рисунке 1 представлены экспериментальные результаты численных расчетов временных зависимостей вероятностей квантовых переходов с шагом по временной оси $\Delta t = 0.001$.

Заключение

Полученные результаты показали, что выбранный метод численного моделирования дает результаты, позволяющие описать нелинейные процессы в атомной физике с высокой точностью. Достоинством предложенного метода является его сравнительно малая ресурсоемкость, что позволяет применять его для решения более сложных задач за приемлемое время.

Литература

- [1] Ryazanov G. V. Quantum-mechanical probability as a sum over path // JETP. – 1958. – V.35, no. 1.
- [2] Sweatlock, L. A. Highly confined electromagnetic fields in arrays of strongly coupled Ag nanoparticles / L.A. Sweatlock, S.A. Maier, H.A. Atwater [et al.] // Phys.Rev. B. – 2005. – V. 71. – P. 235408.
- [3] Hao, E., Schatz G. C. Electromagnetic fields around silver nanoparticles and dimers / E. Hao, G.C. Schatz // J. Chem. Phys. – 2004. – V. 120. – P. 357–369.
- [4] Govorov, A. O. Semiconductor-metal nanoparticle molecules in a magnetic field: Spin-plasmon and exciton-plasmon interactions // Phys.Rev. B. – 2010. – V. 82. – P. 155322.
- [5] Кошляков, П.В. Инфракрасная многофотонная диссоциация метилтрифторсилана / П.В. Кошляков, Е.Н. Чесноков, С.П. Горелик [и др.] // Химическая физика. – 2006. – № 25. – С. 12–22.
- [6] Ursrey, D. Multiphoton Dissociation of HeH+ below the He+(1s) + H(1s) Threshold / D. Ursrey, F. Anis, B.D. Esry// arXiv:1112.3688v1 [physics.atom-ph].
- [7] Wellers, Ch. Resonant IR multi-photon dissociation spectroscopy of a trapped and sympathetically cooled biomolecular ion species / Ch. Wellers, A. Borodin, D. Vasilyev [et al.] // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2011. – V. 13. – P. 18799–18809.
- [8] Richter, M. Extreme Ultraviolet Laser Excites Atomic Giant Resonance / M. Richter, S.V. Amusia, T. Bobashev [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2009. – V. 102. – P. 163002.
- [9] Farrell, J.P. Strong Field Ionization to Multiple Electronic States in Water / J.P.Farrell, S. Petretti, J. Förster [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2011. № 107. P. 083001.
- [10] Goodsell, A. Field Ionization of Cold Atoms near the Wall of a Single Carbon Nanotube / A. Goodsell, T. Ristroph, J.A. Golovchenko [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2010. – V. 104. – P. 133002.
- [11] Raynaud, M. Ponderomotive effects in the femtosecond plasmon-assisted photoelectric effect in bulk metals: Evidence for coupling between surface and interface plasmons / M. Raynaud, J. Kupersztych // Phys. Rev. B. – 2007. – V. 76. – P. 2414002.
- [12] Raynaud, M. Anomalous Multiphoton Photoelectric Effect in Ultrashort Time Scales / M. Raynaud, J. Kupersztych // Phys. Rev. Lett. – 2005. – V. 95 – P. 147401.
- [13] Zhdanovich, S. Quantum Resonances in Selective Rotational Excitation of Molecules with a Sequence of Ultrashort Laser Pulses / S. Zhdanovich, C. Bloomquist, J. Floss, I. Sh. Averbukh, J. W. Hepburn, V. Milner // Phys. Rev. Lett. – 2012. – V. 109. – P. 043003.
- [14] Floss, J. Anderson localization in laser-kicked molecules / J. Floss, Shm. Fishman, I. Sh. Averbukh // Phys. Rev. A. – 2013. – V. 88. – P. 023426.
- [15] Floss, J. Quantum resonance, Anderson localization, and selective manipulations in molecular mixtures by ultrashort laser pulse / J. Floss, I. Sh. Averbukh // Phys. Rev. A. – 2013. – V. 86. – P. 021401.
- [16] Фейнман, Р. Квантовая механика и интегралы по траекториям. / Р. Фейнман, А. Хибс // М.: Мир, 1968.
- [17] Бирюков, А.А. Вычисление вероятностей переходов квантовой системы путем интегрирования вещественных функционалов / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Теоретическая физика. – 2012. – Т. 13. – С. 8–42.
- [18] Gentile, T. R. Experimental study of one- and two-photon Rabi oscillations / T. R. Gentile, B. J. Hughey, D. Kleppner [et al.] // Phys.Rev. A. – 1989. – V. 40, no 9. – P. 5103–5115.
- [19] Бирюков, А.А., Шлеенков М.А. Описание двухфотонных осцилляций Раби в формализме интегрирования по траекториям / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Теоретическая физика. – 2012. – Т. 13. – С. 43–55.
- [20] Бирюков А.А., Шлеенков М.А. Представление вероятностей квантовых переходов функциональным интегралом в пространстве энергетических состояний / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. – 2015. – Т. 19, № 2. – С. 221–240.
- [21] Biryukov, A. Path integral approach to the problem of rotational excitation of molecules by an ultrashort laser pulses sequence / A. Biryukov, M. Shleenkov // arXiv:1407.3893 [quant-ph]
- [22] Скалли, М.О. Квантовая оптика. / М.О. Скалли, М.С. Зубайри. – М.: Физматлит, 2003.