ДИСКРЕТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ ДЛЯ РЕШЕНИЯ КВАНТОВЫХ УРАВНЕНИЙ ДИНАМИКИ МОЛЕКУЛЫ, ВОЗБУЖДАЕМОЙ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

В.А. Савва, С. Банжак

Электронная библиотека Белорусско-Российского университета
http://e.biblio.bru.by/

В настоящей работе представлен новый метод построения аналитического решения систем дифференциальных уравнений, описывающих когерентную динамику многоуровневых квантовых систем, взаимодействующих с лазерным излучением. Уравнения в безразмерных переменных имеют вид

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

Искомые величины $a_n(t)$ – амплитуды вероятности обнаружения квантовой системы на уровне n в момент t, коэффициенты $f_1 = 1$, f_n, ε_n, характеризуют свойства исследуемого объекта. Конечная цель задачи – построение дискретной функции распределения $\rho_n(t) = a_n^*(t)a_n(t)$, т.е. населенностей энергетических уровней квантовой системы. Алгоритм решения не требует интегрирования, он использует дискретное преобразование Фурье, т.е. переход от $a_n(t)$ к их Фурье-образам – спектрам $F_n(\omega)$:

$$a_n(t) = e^{is_n t}\sum_{x=0}^{N} F_n(\omega)e^{ir\omega x t}, \quad n,\omega = \overline{0,N}. \tag{2}$$

Константы r и s_n будут определены позже. Ниже мы приводим простейший случай, когда Фурье пространство однородно, т.е. спектры – функции, определенные на равномерной сетке. Это ограничение не является принципиальным. Предположим, что

$$F_n(\omega) = \sigma(\omega)\hat{p}_0\hat{p}_n(\omega), \quad n,\omega = \overline{0,N}, \tag{3}$$

т.е. спектры выражаются через последовательность ортонормированных дискретных полиномов $\{\hat{p}_n(\omega)\}_0^N$, соответствующих квантовой системе. Полиномы определены на равномерной сетке в пространстве Фурье функций $a_n(t)$; $\sigma(\omega)$ – дискретная весовая функция, с которой полиномы ортогональны. Справедливость представления (3) легко доказать, подставив (2), (3) в систему (1). Нужно лишь учесть, что ортогональные полиномы удовлетворяют рекуррентному соотношению, которое можно записать в нетрадиционном виде

$$\bar{f}_{n+1}\hat{p}_{n+1}(x) + \bar{f}_n\hat{p}_{n-1}(x) = [rx + s_n]\hat{p}_n(x), \quad \bar{f}_1 = 1, \quad \bar{f}_0 = 0. \tag{4}$$

Для известных полиномов коэффициенты известны, для новых построенных полиномов их тоже можно вычислить. Подстановка (2), (3) в систему уравнений (1) с учетом соотношения (4) показывает, что система (1) разрешима, если её коэффициенты связаны с коэффициентами из (4) следующим образом:

$$f_n = \bar{f}_n, \quad \varepsilon_n = s_n - s_{n-1}. \tag{5}$$

Эта взаимно-однозначная связь является критерием соответствия последовательности полиномов рассматриваемой квантовой системе. Амплитуды вероятности вычисляем по обратному преобразованию Фурье (2) путем суммирования и находим дискретную функцию распределения квантовой системы по уровням энергии в любой момент времени, пока действует излучение

$$D(n,t) = \rho_n(t) = a_n^*(t)a_n(t).$$

В докладе будут представлены примеры аналитических решений с использованием как известных полиномов (Кравчука, Чебышева), так и специально построенных по задаваемой весовой функции, содержащей параметры. Наличие параметров приводит к решениям для семейств квантовых систем.

Электронная библиотека Белорусско-Российского университета
http://e.biblio.bru.by/