

КВАНТОВЫЕ СЛУЧАЙНЫЕ ПРОЦЕССЫ

Б. А. Гришанин

1996 г.



Данная книга обязана своим появлением специальному курсу, который читался автором на физическом факультете МГУ, начиная с 1973 г. Она содержит систематическое изложение методов квантовой теории случайных процессов в том виде, как они используются в теоретических расчетах квантовых открытых систем.

Наибольшее применение эти методы нашли при решении задач лазерной физики, в связи с чем рассматриваемые физические системы относятся, в основном, к этой области приложений квантовой теории. Помимо этого, необходимо отметить новейшую сферу приложения квантовой теории случайных процессов — создание квантовых компьютеров которое в результате наблюдавшейся в последние несколько лет бурной активизации исследований перешло из разряда абстрактной идеи в многообещающую технологическую проблему. Специфика данной книги состоит в том, что, будучи рассчитанной по содержанию и характеру изложения, главным образом, на читателя-физика, она, тем не менее, базируется на идеологии и наиболее важных понятиях математической теории случайных процессов. Это позволяет использовать принятую в математической теории систематизацию описываемых методов, которая является наиболее общей и компактной. Изложение сопровождается обсуждением наиболее существенного качественного содержания рассматриваемых процессов с физической точки зрения. В частности, подробно обсуждается модель двухуровневого атома с акцентом на таких вопросах как пределы применимости марковского описания, структура и качественные особенности спектра флуоресценции и роль упругой дефазировки. В книге содержится значительный объем оригинального материала как в части математического описания, так и физических приложений, однако, его использование полностью согласовано с основной целью — дать замкнутое изложение теории и ее наиболее важных приложений к задачам лазерной физики.

Хотя существует значительное количество ориентированных на физиков книг, в которых излагаются математические методы описания квантовых случайных процессов, в данной книге имеется элемент качественной новизны. Он связан с базовой концепцией, естественным образом объединяющей все рассматриваемые приложения в единую теорию, для которой различные типы рассматриваемых физических систем являются просто специальными случаями, исследуемыми с помощью единых методов.

Если ранее данный подход имел в качестве обоснования лишь соображения методического порядка, то за период развития лазерной физики и компьютерной техники в течение 80–90-х годов появились еще более убедительные аргументы. За эти годы эксперименты с отдельными атомами и молекулами, охлаждение атомов ниже доплеровского предела, создание квантово-интерферирующих атомных ансамблей и квантово-сжатых состояний светового поля, а также большое разнообразие других существенно квантовых эффектов вошли в арсенал регулярных методов лазерной физики, в результате чего полностью осознана необходимость развития практических методов расчета, которые

позволяли бы оперировать с разнообразными квантовыми моделями столь же свободно, как и с классическими. В этом плане можно особо выделить проблему квантовых компьютеров, которая связана с обсуждением неограниченного набора физических моделей с самыми разнообразными физическими механизмами как взаимодействий, используемых для реализации квантовых вычислений, так и взаимодействий, обуславливающих возникновение шумов. За указанный период произошло внедрение аналитических методов выполнения компьютерных расчетов, таких, как пакет *Mathematica*. Благодаря им наиболее общая математическая техника квантовой теории случайных процессов, ранее рассматриваемая многими физиками просто как необязательный математический прием компактного описания, доказала свою эффективность для выполнения конкретных расчетов при исследовании самых разнообразных задач. Это обеспечивается адекватной математической конкретизацией общих понятий, что, наряду с рассмотрением некоторых приложений к наиболее фундаментальным проблемам лазерной физики, и составляет содержание данной книги.

Книга рассчитана на научных работников, студентов старших курсов и аспирантов, специализирующихся в различных областях приложений квантовой физики, и должна представить интерес и для математиков, соприкасающихся с проблемами квантовой теории.

Оглавление

1	Квантовая теория вероятностей — составная часть квантовой механики	9
1.1	Необходимость привлечения новых методов и представлений квантовой теории в задачах квантовой радиофизики	9
1.2	Представление логики физических событий	11
1.3	Представление случайных физических величин	14
1.4	Единообразное представление квантовой и классической динамики	16
2	Алгебра супероператоров и ее представления	19
2.1	Символическое представление супероператоров	19
2.2	Матричные представления	24
3	Важнейшие примеры супероператоров замкнутых квантовых систем	31
3.1	Двухуровневая система	31
3.2	Представление Вигнера	37
3.3	Представления, основанные на комплексных амплитудах	41
4	Открытые системы и квантовые случайные процессы	43
4.1	Определение открытой системы и квантового случайного процесса	43
4.2	Переходные супероператоры ОС	44
4.3	Представление взаимодействия	49
5	Марковские квантовые случайные процессы	53
5.1	Формальное определение квантового марковского случайного процесса	53
5.2	Многомоментные матрицы плотности	54
5.2.1	Немарковский случай	54
5.2.2	Марковский случай	55
6	Марковские открытые системы	61
6.1	Физические условия марковости	61
6.2	Процессы диффузионного и скачкообразного типа	64
6.3	Физический смысл квантового описания	67
6.4	Качественные особенности немарковской релаксации	69
7	Релаксация в системе квантовых линейных осцилляторов	71
7.1	Качественные особенности динамики	71
7.2	Расчет лиувиллиана	74
7.3	Одномерный случай	77

8	Теория релаксации двухуровневого атома	81
8.1	Общие соотношения	81
8.2	Зависимость релаксационного супероператора от спектральной плотности шумов	84
8.2.1	Случай одночастотной прецессии	86
8.2.2	Случай двухчастотной прецессии	88
8.3	Релаксация свободного двухуровневого атома	89
8.4	Супероператор фазовой релаксации	93
8.4.1	Марковская упругая дефазировка	94
8.4.2	Немарковская упругая дефазировка свободного ДА	96
8.4.3	Связь с теорией квантового измерения	98
9	Кинетика и флуоресценция двухуровневого атома	101
9.1	Общие соотношения для двухуровневого атома	101
9.2	Равновесное состояние ДА в лазерном поле	105
9.3	Энергетические потоки в системе атом — электромагнитное поле	108
9.4	Кинетика поляризации и населенностей	110
9.5	Спектр флуоресценции	113
9.5.1	Случай точного резонанса	115
9.5.2	Спектр флуоресценции двухуровневого атома в слабом лазерном поле	118
9.5.3	Спектральная структура Апанасевича-Моллоу	120
10	Эффекты преобразования упругой релаксации ДА сильным лазерным полем	125
10.1	Общие соотношения для параметров релаксационного супероператора	125
10.2	Спектры флуоресценции с учетом эффектов преобразования релаксации	128
10.3	Инверсия двухуровневого атома монохроматическим полем	131
11	Некоторые приложения к N-уровневому атому	135
11.1	Расчет лиувиллиана N -уровневого атома с использованием символического представления	135
11.2	Резонансные свойства Λ -систем	137
12	Квантовые флуктуации в квазиклассических системах	143
12.1	Квазиклассический расчет обобщенного лиувиллиана	143
12.2	Стохастические квантовые уравнения	144
12.3	Квантовые флуктуации электронов в ускорителях	146
13	Квантово-полевые открытые системы: релаксация и флуктуации фононных возбуждений	149
13.1	Специфика квантово-полевых ОС	149
13.2	Роль линейных и нелинейных процессов в фононной системе	150
13.3	Квазиклассичность затухания и теплосопrotivления	152
13.4	Спектроскопические проявления фононного ангармонизма	153

14	Статистическое и динамическое описание процесса квантового измерения	157
14.1	Система объект—прибор и переходной супероператор квантового измерения	157
14.2	Динамическая модель неразрушающего квантового измерения	159
A	Возможное обобщение квантовых физических величин	165
B	Ланжевеновский шум в ДА	167
	Литература	168
	Предметный указатель	173
	Список иллюстраций	175

Глава 1

Квантовая теория вероятностей — составная часть квантовой механики

1.1 Необходимость привлечения новых методов и представлений квантовой теории в задачах квантовой радиофизики

Применение квантовой механики к задачам квантовой радиофизики требует существенного выхода за рамки излагаемых в ней понятий и подходов. Наиболее фундаментальное обобщение состоит в перенесении методов описания замкнутых квантовых систем на системы с шумами. Убедиться в этом можно уже на примере простейшей квантовой системы — *двухуровневого атома (ДА)*.

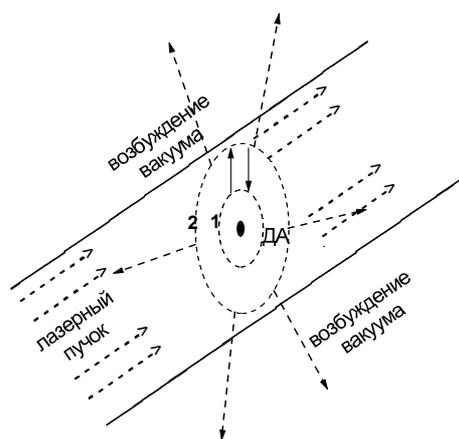


Рис. 1.1: Взаимодействие двухуровневого атома (ДА), возбуждаемого излучением лазера, с электромагнитным полем вакуума, воспринимающим излучение двухуровневого перехода и оказывающим на него реакционное воздействие.

В то время как в обычной квантовой механике он рассматривается как замкнутая система, описываемая соответствующим гамильтонианом \hat{H} , в квантовой радиофизике необходимо также рассмотреть динамику процесса его излучения. Это требует привлечения к рассмотрению дополнительных физических степеней свободы — электромаг-

нитного поля, с которым рассматриваемый атом взаимодействует по законам электродинамики. В результате атом должен описываться не как замкнутая, а как так называемая *открытая система* (ОС). Это взаимодействие проиллюстрировано на рис. ДДА. Для описания таких систем методы обычной квантовой механики непригодны, и необходимо привлечение понятий и *методов квантовых случайных процессов* (КСП), которые, в свою очередь, требуют существенной модификации изложения самой квантовой теории. Такое обобщение особенно актуально для широкого спектра задач лазерной физики [1]– [3] и для проблематики квантового компьютера [4], хотя, разумеется, для любой реальной квантовой системы с конечным числом степеней свободы всегда можно указать физический механизм, выводящий ее описание за рамки обратимой квантовой динамики и приводящий к возникновению квантовых шумов.

Общепринятые схемы изложения квантовой теории диктуются, как правило, сложившимися традициями обучения студентов и, в основном, следуют истории развития квантовой механики. В качестве примеров можно привести наиболее популярные учебники по квантовой механике, используемые в традиционных общих курсах квантовой физики [5]– [8], а также базовые руководства по проблемам взаимодействия излучения с атомами [2, 3]. За основу принимается представление, использующее волновую функцию как исходное понятие квантовой механики, и лишь на стадии перехода к гейзенберговским уравнениям движения восстанавливается единство квантовой механики и классической. Плюсом такого подхода является максимальная преемственность с исторически наиболее важным этапом становления квантовой механики, на котором возникло уравнение Шредингера и с его использованием был решен ряд фундаментальных задач атомной физики. Основным минусом, который, в чем можно не сомневаться, остро воспринимается каждым физиком в процессе изучения квантовой механики, является невозможность изложения в рамках одних и тех же терминов основ как квантовой, так и классической механики. Это связано с отсутствием в классической теории физического аналога волновой функции, вследствие чего квантовая динамика прямо не представима в терминах классической механики и квантовая механика выглядит неожиданным и искусственным построением. Общеизвестно, что вокруг проблемы интерпретации квантовой механики возникали очень серьезные дискуссии [9] (знаменитый пример — дискуссия Бор — Эйнштейн на Сольвеевском конгрессе 1927 г.) и многие исследователи испытывали большие трудности в использовании ее методов в тот период, когда ее логическое обоснование было далеко от совершенства (наиболее драматический пример — восприятие квантовой механики Эренфестом [10]). Теперь, однако, после осознания логического смысла различия между квантовой и классической теориями (см. п. 1.2), можно по-настоящему понять, как совмещается принципиальная “непознаваемость” квантовой системы в терминах классических понятий с детерминированным характером самих квантовых уравнений. Особенно “понятной” специфика квантовой теории становится, если выйти за рамки физико-математического подхода и рассмотреть ситуацию с точки зрения ее возможного высшего смысла, т. е. “божественного промысла”, к которому с неизбежностью в той или иной форме приходят многие исследователи в различных областях науки при обсуждении ее наиболее фундаментальных проблем.¹ В

¹Разумеется, при таком обсуждении необходимо учитывать деликатность темы и правомочность ее рассмотрения с богословской точки зрения только служителями церкви. В то же время очевидна и необходимость, по крайней мере, начального обсуждения специалистами в конкретных областях, в данном случае физиками, обладающими соответствующей узко-профессиональной подготовкой, поскольку явление соображений подобного рода, например, в духовной академии, в силу естественных причин невоз-

противоположность Эйнштейну, который видел в квантовой теории противоречие с его представлением о Боге — “бог математик, а не азартный игрок в кости!”, теперь становится понятным, что, наоборот, более естественно рассматривать квантовую теорию как математическую модель, дающую представление о том, как могут совмещаться непознаваемость божественного промысла и свобода познания, т. е. отсутствие ограничений на познание любых его конкретных проявлений. В квантовой теории “непознаваемость в целом” отображается невозможностью одновременного обсуждения в терминах классического описания всех квантовых событий, а свобода познания отображается возможностью классического рассмотрения событий, связанных с любой произвольно выбранной физической величиной, или несколькими, описываемыми набором коммутирующих операторов.

В случае динамически замкнутых квантовых систем, представляющих основной объект изучения традиционной квантовой механики, описанная выше трудность в понимании фундаментального смысла квантовой специфики не является, однако, препятствием для вполне адекватного изложения квантовой динамики, задаваемой уравнением Шредингера

$$\frac{d\psi}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}\psi \quad (1.1)$$

с оператором Гамильтона $\hat{\mathcal{H}}$. При рассмотрении же случайных процессов состояние случайной квантовой системы в общем случае не может быть описано волновой функцией, поскольку волновая функция описывает так называемое “чистое” состояние, которое в классической теории отвечает в некотором смысле детерминированному, а не случайному состоянию (последнему в квантовой теории соответствует смешанное состояние, описываемое матрицей плотности). Поэтому для построения квантовой теории случайных процессов необходимо представить саму квантовую теорию в новой форме, которая, после необходимого перехода от волновой функции к матрице плотности, может быть единой как для квантовых, так и для классических систем.

1.2 Представление логики физических событий

Обычно при изложении как классической, так и квантовой теории описание ее общей структуры использует только определение *физических величин*. Поэтому может создаться впечатление, что именно физическая величина является первичным и простейшим понятием физики. Однако, это не так. Сами правила оперирования с физическими величинами подчиняются наиболее общим принципам, закладываемым в теорию как первичные. В классической механике эти принципы принимаются “по умолчанию”, и только в теории вероятностей они вводятся в виде самостоятельной математической модели — σ -алгебры событий. В квантовой же теории они постулируются в форме аксиомы, описывающей структуру пространства квантовых состояний в виде гильбертова пространства волновых функций. Напомним соответствующие определения и выявим соответствие между ними.

Более первичным понятием по сравнению с физической величиной является понятие физического события в рассматриваемой физической системе. В классической теории совокупность всех физических событий образует *алгебру событий* \mathcal{B} , т. е. множество

всех возможных событий, которые описываются как подмножества $A \subseteq \Omega$ множества элементарных событий Ω с элементами ω . На алгебре \mathcal{B} определены две операции — объединение подмножеств $A_1 \cup A_2$ и их пересечение $A_1 \cap A_2$, которые аналогичны, соответственно, операциям сложения и умножения чисел, соответственно, “+” и “·”. Алгебра \mathcal{B} носит название σ -алгебры и является *представлением* классической логики событий, которая в абстрактных математических моделях вводится в самом общем виде посредством абстрактной алгебры логики безотносительно к описанному здесь ее специальному представлению с помощью σ -алгебры. Отметим, что возможность математической формализации логики была осознана еще в древности и ее представление в виде σ -алгебры было предложено Аристотелем, который рассматривал частный случай σ -алгебры — набор подмножеств геометрического множества на плоскости — так называемые “круги Аристотеля”. В этой логике существенным свойством, выражающим ее “классичность”, является закон дистрибутивности:

$$(A_1 + A_2) \cdot A_3 = (A_1 \cdot A_3) + (A_2 \cdot A_3). \quad (1.2)$$

Это соотношение легко проверяется хотя бы с помощью геометрических построений на плоскости, как это показано на рис. 1.2а.

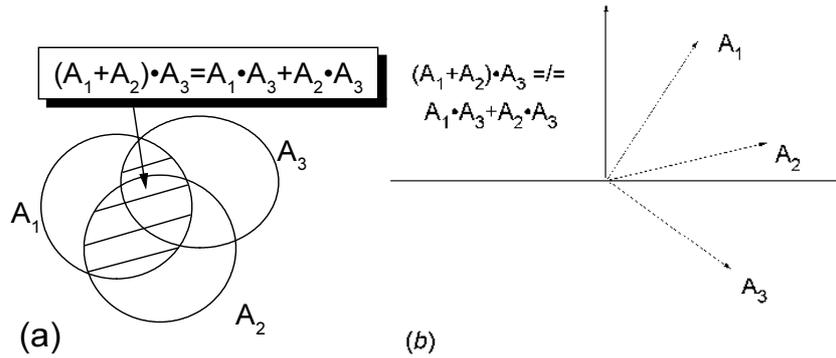


Рис. 1.2: (а) — Иллюстрация закона дистрибутивности классической алгебры логики с помощью кругов Аристотеля. Комбинирование подмножеств в соответствии с обеими частями приведенного равенства дает один и тот же результат. (б) — Недистрибутивность в квантовой логике. Для изображенных элементарных событий имеет место приведенное неравенство.

Рассмотрим частный случай, когда $A_2 = \bar{A}_1$, где \bar{A}_1 обозначает событие, дополнительное к A_1 до единичного — “максимального” — элемента E рассматриваемой алгебры: последний описывает событие, имеющее место всегда, т. е. заведомо “истинное”. При этом истинность одного из пары событий A_1, \bar{A}_1 автоматически влечет ложность другого. Из соотношения (1.2) получаем:

$$A_3 = (A_1 + \bar{A}_1) \cdot A_3 = A_1 \cdot A_3 + \bar{A}_1 \cdot A_3. \quad (1.3)$$

В этом соотношении в силу неперекрываемости A_1, \bar{A}_1 из двух слагаемых в правой части для случая атомарного — “нерасщепляемого” события $A_3 = \omega$ только одно может быть отличной от нулевого элемента, т. е. соответствующей *истинному* событию. Тем самым любое событие — “высказывание” ω — представляется в виде “либо A_1 , либо не- A_1 .”

Это логическое соотношение выражает так называемый *закон исключенного третьего*, роль которого во всех точных науках хорошо известна.

В квантовой теории роль множества элементарных событий играет гильбертово пространство H , элементами которого являются волновые функции ψ , описывающие элементарные квантовые события как соответствующие одномерные подпространства в H . При этом алгебра квантовых событий \mathcal{B} образована совокупностью подпространств $A \subseteq H$, причем теперь в качестве операций сложения и умножения возникают операции а) линейного объединения подпространств $\text{sp}(A_1, A_2)$ (sp — обозначение линейной оболочки подпространств) и б) их пересечения. Однако, в описываемой данной алгеброй квантовой логике закон дистрибутивности (1.2) уже не имеет места. В этом легко убедиться на примере двумерного гильбертова пространства, совпадающего с двумерной плоскостью, взяв в качестве элементов A_1, A_2, A_3 три неортогональных вектора ψ_1, ψ_2, ψ_3 , изображенных на рис. 1.2-б. Действительно, поскольку линейная оболочка двух векторов ψ_1, ψ_2 , совпадает со всем пространством (это “единичный” элемент алгебры), левая часть соотношения (1.2) в этом случае равна просто $A_3 = \psi_3$, в то время как правая для ψ_3 , не совпадающих ни с одним из ψ_1, ψ_2 , равна нулевому элементу. Однако, в частном случае, когда A_3 либо совпадает с ψ_1 или ψ_2 или с их линейной оболочкой — всей плоскостью, закон дистрибутивности выполняется. Этот случай можно обобщить на произвольную размерность гильбертова пространства, потребовав в общем случае, чтобы каждый новый элемент либо не принадлежал линейной оболочке предыдущих, либо совпадал с одним из них (или принадлежал ему). В этом случае подалгебра рассматриваемых подпространств эквивалентна алгебре подмножеств множества из двух точек. Таким образом, в случае рассмотрения подалгебры ортогональных подпространств квантовая логика является классической (“аристотелевой”) логикой, т. е. в алгебре квантовой логики можно всегда выделить неограниченный набор подалгебр, описывающих классические логики.

В связи с невозможностью описания квантовых событий в рамках классической логики возникает вопрос о “познаваемости” квантовых физических событий, поскольку наблюдатель может однозначно интерпретировать лишь классические наборы событий и может возникнуть предположение о необходимости постулирования некоторого специального принципа, касающегося взаимодействия квантовых и классических объектов. На эту роль может претендовать постулат квантового измерения [7, 11]. В действительности, теперь можно считать твердо установленным, что никакого специального постулата не требуется, поскольку и в рамках только квантовой теории можно детально проследить динамику процесса измерения квантовой величины классической системой, понимая под последней, разумеется, квантовую, но такую, что квантовые эффекты в ней асимптотически несутельственны (см. п. 8.4.3). При этом удастся не только проследить динамику процесса квантового измерения, но и динамически обосновать борновскую интерпретацию волновой функции ψ , описывающей чистое состояние квантовой физической системы. Формулировка Борна может быть переформулирована следующим образом — с обобщением на произвольные квантовые события: “Вероятность квантового события задается квадратом модуля волновой функции в ортогональном базисе, описывающем набор рассматриваемых событий”.

1.3 Представление случайных физических величин

Связь физической величины с элементарными событиями задается самой структурой физической величины, в которой можно выделить два базисных понятия: набор возможных значений физической величины $\lambda \in \Lambda$ и набор физических событий, заключающихся в том что физическая величина приняла определенное значение λ . В классической механике, где элементарные события ω описываются точками $X = (q, p)$ классического фазового пространства, соответствующее представление физической величины $f = F(X)$ имеет вид

$$f = \int_{\Lambda} \lambda \delta [F(X) - \lambda] d\lambda. \quad (1.4)$$

Очевидно, что этот интеграл тождественно равен $F(X)$. Тем не менее, это очевидное соотношение имеет глубокий качественный смысл. Оно является основанием на введение понятия *индикатора*

$$\chi(A, X) = \begin{cases} 1, & F(X) \in A, \\ 0, & F(X) \notin A. \end{cases} \quad (1.5)$$

классического события $f \in A$. Функция (1.5) связана с используемой в теории множеств *характеристической функцией* $\mu(B, X)$ множества $B = B(A)$ точек X , отвечающих множеству A значений функции F : B включает те X , для которых $F(X) \in A$. Фигурирующая в соотношении (1.4) δ -функция есть просто плотность функции χ на спектральном множестве Λ :

$$\chi(d\lambda, X) = \delta [F(X) - \lambda] d\lambda, \quad f = \int_{\Lambda} \lambda \chi(d\lambda, X) \quad (1.6)$$

В квантовой теории, где в традиционной формулировке физические величины описываются самосопряженными операторами (обсуждение возможного обобщения см. в ПРИЛОЖЕНИИ А), соответствующее представлению (1.4) выражение есть спектральное представление самосопряженного оператора

$$\hat{f} = \begin{cases} \int_{\Lambda} \lambda \hat{P}(d\lambda) \\ \sum_k \lambda_k \hat{P}_k, \end{cases} \quad (1.7)$$

описывающее случаи непрерывного и дискретного спектра собственных значений λ . Здесь набор операторов $\hat{P}(d\lambda)$ или \hat{P}_k есть операторы проектирования на подпространства собственных волновых функций, соответствующие областям спектра $d\lambda$ или собственным значениям λ_k . Таким образом, квантовые операторы проектирования есть точный аналог классических характеристических функций. Те и другие реализуют математическое отображение свойств соответствующей логики физических событий на алгебре физических величин. В чем же проявляется для операторов \hat{P}_k или $\hat{P}(d\lambda)$ их неклассичность? Из предшествующего анализа логики квантовых событий следует, что их квантовый характер событий связана с наличием неортогональных квантовых подпространств. Набору же ортогональных подпространств отвечает ортогональный набор проекторов на соответствующий ортогональный набор подпространств. Соответственно, логика событий, связанных только с одной квантовой величиной, всегда является классической. Это не случайно и необходимо для того, чтобы квантовая теория имела логическую связь с миром доступных нашему пониманию событий, подчиняющихся классической логике

Аристотеля. Если два самосопряженных оператора коммутируют, то им соответствует общий ортогональный набор собственных проекторов и собственных подпространств, а также классическая логика соответствующего набора квантовых событий, отвечающих этим величинам. Таким образом, эквивалентным выражением классичности на языке физических величин в квантовом случае является коммутативность представляющих их операторов. Только наличие некоммутирующих физических величин делает квантовую теорию отличной от классической. Если же рассматривается множество событий, отвечающих двум некоммутирующим квантовым величинам \hat{f} , \hat{g} , то в нем законы классической логики неприменимы.

Наличие некоммутирующих переменных в квантовой теории с учетом соответствующей ей несправедливости закона исключенного третьего приводит к тому, что в квантовой теории всегда присутствует соответствующая неопределенность, и теория становится принципиально статистической, несмотря на то, что часть физических переменных может иметь точно определенные значения. Поэтому для единообразного описания квантовых и классических систем оно должно строиться на математическом аппарате, ориентированном в общем случае на системы со статистической неопределенностью. В классической теории вероятностей статистические системы описываются так называемым (классическим) *вероятностным пространством* [12], т. е. следующей тройкой объектов:

$$(\Omega, \mathcal{B}, \mathcal{P}), \quad (1.8)$$

где Ω и \mathcal{B} — описанные выше множество элементарных событий и некоторая алгебра подмножеств на нем (не обязательно всех), а \mathcal{P} есть классическая вероятностная мера, задающая вероятность для любого множества $A \in \mathcal{B}$ (т. е. для любого подмножества $A \subseteq \Omega$). *Квантовое вероятностное пространство* задается аналогичным образом:

$$(H, \mathcal{B}, \mathcal{P}), \quad (1.9)$$

только роль множества элементарных событий играет гильбертово пространство H , а \mathcal{B} , как уже было определено ранее, есть алгебра его подпространств. Вероятностная мера, соответствующая квантовому событию $A \in \mathcal{B}$, выражается в общем случае через матрицу плотности $\hat{\rho}$ квантовой системы:

$$\mathcal{P}(A) = \text{Tr} \hat{P}_A \hat{\rho}, \quad (1.10)$$

где \hat{P}_A обозначает квантовый индикатор события A , т. е. проектор на соответствующее подпространство. Классические же вероятности $\mathcal{P}(A)$ могут быть определены через их распределение на множестве элементарных событий $\mathcal{P}(d\omega)$ с использованием классической индикаторной функции χ очевидным соотношением

$$\mathcal{P}(A) = \int \chi_A(\omega) \mathcal{P}(d\omega), \quad (1.11)$$

аналогия которого с соотношением (1.10) становится понятной, если учесть, что $\hat{\rho}$ является аналогом классического распределения вероятностей $\mathcal{P}(d\omega)$, проектор \hat{P}_A — аналогом индикаторной функции $\chi_A(\omega)$, а операция вычисления следа Tr — аналогом классического интегрирования или суммирования. Изложенное описание квантовых и классических систем показывает возможность их описания в одних и тех же терминах. После этого, очевидно, должны возникнуть дополнительные возможности, например, при выяснении соотношения между классическим и квантовым описанием для одной и той же физической системы и, в частности, при выполнении предельного перехода от квантового рассмотрения к классическому.

1.4 Единообразное представление квантовой и классической динамики

Временная динамика физической системы теперь может быть приложена не к точным начальным условиям, как это делается в классической механике, и не к чистому состоянию (заданной волновой функции), как это делается при обычном изложении квантовой механики, а к вероятностному пространству. Это соответствует временной эволюции статистического ансамбля, рассматриваемого в статистической физике [13]. Для замкнутой системы в классической теории она описывается классическим уравнением Лиувилля

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P} = \{\mathcal{H}, \mathcal{P}\}, \quad (1.12)$$

а в квантовой теории — квантовым уравнением Лиувилля

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \hat{\rho}]. \quad (1.13)$$

Далее будет показано, что фигурирующее здесь преобразование, называемое *квантовой скобкой Пуассона* в классическом пределе переходит в классическую скобку Пуассона, т. е. эти уравнения не только аналогичны, но и совпадают в квазиклассическом пределе.

Уравнения (1.12), (1.13) задают адекватный подход для построения математической техники случайных процессов. Они определяют эволюционное преобразование $\mathcal{S}(t)$ на алгебре событий. Соответственно, на вероятностном пространстве событий определены зависящие от времени случайные физические величины, что и является определением *случайного процесса* в теории случайных процессов [12]. Для конкретизации рассматриваемых случайных процессов следует применить описанные понятия к замкнутой физической системе, включающей ОС и все источники шумов, и попытаться редуцировать соответствующую динамику, выделив эволюцию, относящуюся только к ОС. При этом, однако, как это известно из статистической физики, возникает новое качество динамики — необратимость. Так, например, из классической кинетической теории Больцмана известно, что энтропия одночастичной подсистемы в газе только возрастает, когда полное число частиц неограниченно велико. Для развития соответствующей математической техники в квантовом случае, однако, по сравнению с классической теорией требуются дополнительные усилия. Они в существенной степени связаны с тем, что традиционный математический аппарат квантовой механики непосредственно не приспособлен для описания эволюции открытых систем, так как основан на описании эволюции в терминах волновой функции, которая не представлена непосредственно в определении квантового вероятностного пространства. Необходимо, таким образом, развить математическую технику, связывающую аппарат описания динамики волновых функций и аппарат описания динамики матрицы плотности.

Так называемое *шредингеровское* представление динамики основано на уравнении Шредингера (1.1). Оно описывает фактически изменение распределения вероятностей \mathcal{P} квантовой системы, поскольку соответствующая матрица плотности в момент времени t для чистого состояния может быть записана в виде

$$\hat{\rho}(t) = \psi(t)\psi^+(t), \quad (1.14)$$

где ψ понимается как вектор-столбец, ψ^+ — как вектор-строка, а их произведение дает матрицу в соответствии с традиционными обозначениями теории матриц. Соответствующее решению $\psi(t)$ преобразование начальной волновой функции $\psi(0)$ описывается оператором временной эволюции

$$\mathcal{U}(t) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{\mathcal{H}}(\tau) d\tau \right]. \quad (1.15)$$

(Здесь T — символ хронологического упорядочения). Изменение во времени матрицы плотности записывается через оператор временной эволюции в виде

$$\hat{\rho}(t) = U(t)\hat{\rho}(0)U^{-1}(t). \quad (1.16)$$

Оно может быть эквивалентным образом перенесено на алгебру самих физических переменных. При этом их операторы будут изменяться в соответствии с преобразованием

$$\hat{f}(t) = U^{-1}(t)\hat{f}(0)U(t), \quad (1.17)$$

являющимся обратным по отношению к преобразованию (1.16), а матрица плотности будет фиксированной. Это представление динамики называется *представлением Гейзенберга*. Помимо представлений динамики в форме Гейзенберга и Шредингера важное значение имеет комбинированное представление — *представление взаимодействия*. Оно полезно, например, когда гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ представляется в виде суммы двух слагаемых вида $\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_I$, где первое слагаемое описывает “невозмущенный” гамильтониан, а второе — внешнее возмущение. Тогда справедливо операторное тождество:

$$\mathcal{U}(t) = U_0(t)U_I(t), \quad (1.18)$$

где $U_0(t)$ описывает невозмущенную эволюцию, а

$$U_I(t) = T \exp \left[\int_0^t U^{-1}(\tau)\hat{\mathcal{H}}_I U(\tau) d\tau \right] - \quad (1.19)$$

дополнительное преобразование за счет возмущения. В представлении взаимодействия полагается, что $U_0(t)$ преобразуют в соответствии с соотношением (1.17) все операторы физических величин, а $U_I(t)$ — матрицу плотности согласно соотношению (1.16).

Приведенное описание квантовой динамики в терминах матрицы плотности и физических переменных качественно соответствует подобному же описанию классических систем. Однако, очевидно и важное техническое отличие квантового описания: оно комбинируется в виде билинейной операции из эволюционных операторов, действующих на волновую функцию, т. е. в квантовой теории по сравнению с классической существует дополнительный “нижний этаж” в виде волновых функций, образующих гильбертово пространство: это иллюстрировано на рис. 1.3. Он не имеет непосредственного “физического” смысла, а является просто возможным методом описания квантовых событий.

Если развить какой-либо способ выполнения всех необходимых вычислений без обращения к конкретному представлению гильбертова пространства, то необходимость в этом нефизичном (по крайней мере, в современном понимании) объекте вообще отпадет, и квантовое описание будет аналогично классическому и в смысле математической техники. В таком описании, соответственно, преобразования квантовых физических величин должны фигурировать не в виде комбинации преобразований в гильбертовом пространстве, а в виде линейных операторов непосредственно на линейном пространстве

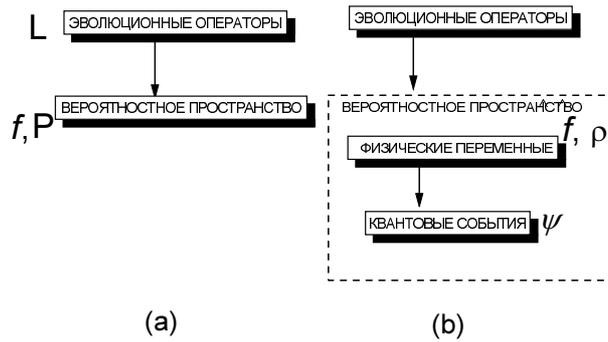


Рис. 1.3: Иерархия математических объектов, используемых в классической (а) и квантовой (б) теории. \mathcal{L} символизирует операторы — в квантовом случае супероператоры — преобразований физических величин или распределений вероятностей, f и \hat{f} — физические величины, \mathcal{P} и $\hat{\rho}$ — классические распределения вероятностей и квантовые матрицы плотности.

матриц плотности или физических величин. Тем самым, изложение квантовой теории не будет непосредственно использовать нижний уровень на рис. 1.3-б, и оно станет аналогично по форме описанию классических случайных систем. Это не исключает, однако, возможность использования волновых функций в тех ситуациях, когда это приводит к упрощению проблемы. В частности, описание марковского случайного процесса стохастической n -компонентной волновой функцией имеет очевидные преимущества перед использованием матрицы плотности с $n \times n$ матричными элементами и особенно эффективно в компьютерном моделировании динамики квантовых случайных процессов [14]. Поскольку квантовые физические величины и матрицы плотности, в отличие от классических физических величин и распределений вероятности, уже представляются операторами, то действующие на них преобразования, заданные на втором этаже на рис. 1.3-б, хотя и являются частным случаем линейных операторов, с учетом данной двухэтажной операторной структуры часто называются *супероператорами* с целью отличить их от обычных квантовомеханических операторов в гильбертовом пространстве.

Глава 2

Алгебра супероператоров и ее представления

2.1 Символическое представление супероператоров

Поскольку структура квантовой теории уже задана в терминах гильбертова пространства, то в этих же терминах заданы и супероператоры, даже если понятие супероператора явно не используется при изложении. Действительно, в выражениях (1.16), (1.17) Главы 1, задающих временную динамику замкнутой квантовой системы без шумов, супероператорное линейное преобразование задано билинейной суперпозицией операторов временной эволюции $U(t), U^{-1}(t)$. Чтобы ввести соответствующие супероператоры безотносительно к преобразуемым операторам, достаточно ввести *символ подстановки* \odot , обозначающий место подстановки преобразуемого оператора. Например, для преобразования (1.16) Главы 1 соответствующий супероператор представляется символическим выражением

$$\mathcal{S}(t) = U(t) \odot U^{-1}(t), \quad (2.1)$$

так что

$$\hat{\rho}(t) = \mathcal{S}(t)\hat{\rho}(0). \quad (2.2)$$

Примером подобного использования символов является использование символа $\frac{d}{dx}$ для оператора дифференцирования, образующего в сочетании с оператором умножения на x алгебраический базис шредингеровского представления операторов квантовой механики. Подобного типа представления могут быть определены как *символические*. Их удобство состоит в том, что они вводят новую математическую структуру в терминах исходной. В случае шредингеровского представления это алгебра операторов квантовых физических величин в терминах аргументов волновой функции, а в данном случае — алгебра супероператоров в терминах алгебры квантовых операторов. Для конкретизации символического представления супероператоров следует выявить правила обращения с символическими выражениями, вытекающими из общих определений алгебры линейных операторов применительно к специфическому случаю алгебры супероператоров.

Итак, символ подстановки определяется в супероператорных выражениях вида $\hat{A} \odot \hat{B}$ правилом применения этого выражения к операторам \hat{f} :

$$(\hat{A} \odot \hat{B})\hat{f} = \hat{A}\hat{f}\hat{B}. \quad (2.3)$$

Важно обратить внимание на необходимость использования скобок в левой части, чтобы отделить супероператорное выражение от оператора, к которому оно применяется. Целесообразно также использовать сокращенные выражения

$$\hat{A} \odot \equiv \hat{A} \odot \hat{I}, \quad \odot \hat{A} \equiv \hat{I} \odot \hat{A}$$

и сам символ \odot в качестве единичного супероператора:

$$\odot \equiv \hat{I} \odot \hat{I}.$$

При этом следует при использовании этих выражений помнить о необходимости введения обозначений в форме, различающей операторы, входящие в структуру супероператорного выражения и операторы, к которым оно применяется, например, $(\odot)\hat{f} \equiv \hat{f} \neq \odot\hat{f}$. Рассматривая произвольные квантовомеханические соотношения на алгебре квантовых операторов, легко обнаружить, что любой супероператор может быть отображен в классе линейных комбинаций вида $\mathcal{S} = \sum_n \hat{A}_n \odot \hat{B}_n$, с произвольными операторами \hat{A}_n, \hat{B}_n , что эквивалентно классу линейных комбинаций

$$\mathcal{S} = \sum_n c_n \hat{P}_n \odot \hat{Q}_n,$$

где \hat{P}_n, \hat{Q}_n — некоторые операторы проектирования в гильбертовом пространстве H состояний квантовой системы. Таким образом, использование символа подстановки позволяет представить любые элементы алгебры супероператоров.

Для обобщения операции комплексного сопряжения на супероператоры следует конкретизировать способ представления пространства преобразуемых операторов. Он определяется соответствующим видом скалярного произведения операторов. В случае волновых функций скалярное произведение имеет вид $(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(x)\psi(x)dx$ в непрерывном или $(\varphi, \psi) = \varphi^+\psi$ в дискретном случае. В последнем варианте φ, ψ описывают векторы-столбцы, а φ^+ — эрмитово сопряженную строку, так что в соответствии с общими правилами умножения прямоугольных матриц [15] выражение $\varphi^+\psi$ дает стандартное евклидово скалярное произведение векторов. В линейном же пространстве операторов определение

$$(\hat{A}, \hat{B}) = \text{Tr} \hat{A}^+ \hat{B} \quad (2.4)$$

с использованием метрики $\rho(\hat{A}, \hat{B}) = \sqrt{(\hat{A} - \hat{B}, \hat{A} - \hat{B})}$ позволяет различить любые операторы, описываемые различными матрицами \hat{A}, \hat{B} . Таким образом вводится линейное пространство E операторов Гильберта-Шмидта. Это определение E наиболее эффективно и для описания алгебры супероператоров в E . С учетом эрмитовости матрицы плотности оно адекватно и для отображения важнейшей операции квантовой механики — усреднения операторов по квантовой формуле

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{A}, \quad (2.5)$$

которая, как и соответствующая формула классического усреднения, включает операторы $\hat{\rho}$ и \hat{A} как существенно вещественные и симметричные относительно перестановки объектов. Оно может быть представлено в виде эквивалентного скалярного произведения

$$\langle \hat{A} \rangle = (\hat{\rho}, \hat{A}), \quad (2.6)$$

поскольку $\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$ и применение в (2.6) определения (2.4) дает требуемое усреднение (2.5).

Сформулируем наиболее важные правила символического представления алгебры супероператоров.

1. *Правило умножения:*

$$(\hat{A}_2 \odot \hat{B}_2)(\hat{A}_1 \odot \hat{B}_1) = \hat{A}_2 \hat{A}_1 \odot \hat{B}_1 \hat{B}_2.$$

Ближе к символу подстановки в правой части стоят операторы, относящиеся к супероператорам, действующим в левой части раньше, т. е. стоящим правее. С учетом данного правила любое супероператорное выражение может быть представлено в виде линейной комбинации выражений с единственным символом подстановки.

2. *Правило возведения в степень:*

$$(\hat{A} \odot \hat{B})^n = \hat{A}^n \odot \hat{B}^n.$$

3. *Правило обращения:*

$$(\hat{A} \odot \hat{B})^{-1} = \hat{A}^{-1} \odot \hat{B}^{-1}.$$

4. *Правило суперпозиции коммутаторов:*

$$[\hat{A}_n, \odot] \dots [\hat{A}_1, \odot] = [\hat{A}_n, [\hat{A}_{n-1}, [\dots, [\hat{A}_1, \odot] \dots]]],$$

где $[\hat{A}_k, \odot] = \hat{A}_k \odot - \odot \hat{A}_k$ описывает операцию коммутирования преобразуемого оператора с оператором \hat{A}_k , а $[\hat{A}_n, [\hat{A}_{n-1}, [\dots, [\hat{A}_1, \odot] \dots]]$ — суперпозицию последовательных операций коммутирования с операторами $\hat{A}_n, \hat{A}_{n-1}, \dots, \hat{A}_1$.

5. *Правило коммутации односторонних одночленов:*

$$(\hat{A} \odot)(\odot \hat{B}) = (\odot \hat{B})(\hat{A} \odot),$$

т. е. коммутатор “левого” и “правого” одночленных супероператоров $\hat{A} \odot, \odot \hat{B}$ равен нулю.

6. *Правило вычисления экспоненты от суммы односторонних одночленов:*

$$\exp(\hat{A} \odot + \odot \hat{B}) = \exp(\hat{A}) \odot \exp(\hat{B}).$$

Доказательство: с учетом правила коммутативности 5 супероператорная экспонента $\exp(\hat{A} \odot + \odot \hat{B})$ сводится к произведению супероператоров $\exp(\hat{A} \odot) \exp(\odot \hat{B})$, что и приводит к результату 6.

7. *Правило вычисления экспоненты от коммутатора:*

$$\exp([\hat{A}, \odot]) = \exp(\hat{A}) \odot \exp(-\hat{A}).$$

Это простое следствие правила 6 при $\hat{B} = -\hat{A}$.

Последнее правило позволяет представить преобразование временной эволюции (2.1) квантовомеханических операторов через супероператор коммутирования — квантовую скобку Пуассона, или лиувиллиан

$$\mathcal{L} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}} \odot - \odot \hat{\mathcal{H}}] \quad (2.7)$$

в виде экспоненты

$$\mathcal{S}(t) = \exp(\mathcal{L}t), \quad (2.8)$$

где для простоты полагается, что гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ не зависит от времени. Супероператор (2.8) описывает временную эволюцию матрицы плотности в виде решения (2.2) уравнения (1.16) *Главы 1*. Для гамильтонианов, зависящих от времени, это соотношение должно быть представлено в хронологически упорядоченном виде, для чего необходимо определить хронологическое упорядочение супероператоров. Эволюция динамических переменных задается обратным преобразованием (1.17) *Главы 1*, для которого, по аналогии с унитарным преобразованием в гильбертовом пространстве H также полезно установить его связь с эрмитово сопряженным супероператором, для чего это понятие должно быть соответствующим образом определено.

8. *Хронологическое упорядочение супероператоров* определяется следующим образом:

$$\Gamma \{ \dots \hat{A}(t_1) \dots \hat{A}(t_2) \dots \odot \dots \hat{B}(\tau_1) \dots \hat{B}(\tau_2) \dots \} = \dots \hat{A}(t_2) \hat{A}(t_1) \odot \hat{B}(\tau_1) \hat{B}(\tau_2) \dots, \quad (2.9)$$

где в правой части времена t_1, t_2, \dots и τ_1, τ_2, \dots для случая супероператоров, преобразующих матрицу плотности расставляются в порядке их возрастания по мере удаления от символа подстановки, а для супероператоров, преобразующих физические величины — наоборот. Эти правила иллюстрируются на рис. 2.1.

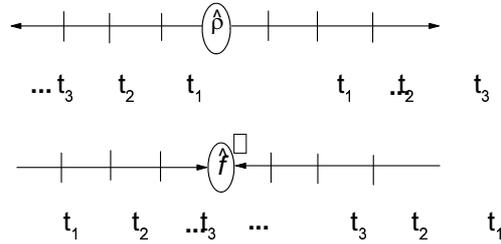


Рис. 2.1: Хронологически упорядоченное расположение операторов в символически представленных супероператорных выражениях, преобразующих матрицы плотности (верхняя схема) и физические величины (нижняя схема).

С использованием этого определения для зависящих от времени гамильтонианов и, соответственно, с зависящим от времени лиувиллианом (2.7), соответствующее представление эволюционного супероператора (2.7) имеет вид:

$$\mathcal{S}(t) = \Gamma \exp \left[\int_0^t \mathcal{L}(\tau) d\tau \right]. \quad (2.10)$$

9. *Эрмитово сопряжение супероператоров* определяется тем же соотношением, что и для любых линейных операторов в гильбертовом пространстве

$$(\mathcal{S}^+ \hat{A}, \hat{B}) = (\hat{A}, \mathcal{S} \hat{B}), \quad (2.11)$$

где использовано скалярное произведение (2.4). Соответствующее правило сопряжения для символических представлений определяется соотношением

$$(\hat{A} \odot \hat{B})^+ = \hat{A}^+ \odot \hat{B}^+, \quad (2.12)$$

т. е. эрмитово сопряжение супероператора сводится к эрмитову сопряжению операторов \hat{A}, \hat{B} . Справедливость этого соотношения очевидна после подстановки $\mathcal{S} = \hat{A} \odot \hat{B}$ в определение (2.11) с учетом определения скалярного произведения (2.4):

$$\text{Tr}(\mathcal{S}^+ \hat{X})^+ \hat{Y} = \text{Tr} \hat{X}^+ \hat{A} \hat{Y} \hat{B} \rightarrow \mathcal{S}^+ \hat{X} = (\hat{B} \hat{X}^+ \hat{A})^+ = (\hat{A}^+ \odot \hat{B}^+) \hat{X}.$$

10. *Транспонирование супероператоров*
в абстрактном виде может быть определено как

$$\mathcal{S}^T \hat{A} = (\mathcal{S}^+ \hat{A}^+)^+. \quad (2.13)$$

Нетрудно видеть, что если вместо \mathcal{S} в этом соотношении рассматривать как $n \times n$ матрицу, а вместо \hat{A} — n -мерный вектор, то оно сводится к перестановке матричных индексов соответствующей матрицы \mathcal{S} , причем само соотношение (2.13) эквивалентно векторному тождеству $(\mathcal{S}^T a) = (\mathcal{S}^+ a^*)^*$. В символическом представлении правило транспонирования имеет вид:

$$(\hat{A} \odot \hat{B})^T = \hat{B} \odot \hat{A}, \quad (2.14)$$

т. е. в отличие от эрмитова сопряжения операторы \hat{A}, \hat{B} не сопрягаются, но переставляются местами. Справедливость этого результата легко проверить, рассматривая $\mathcal{S} = \hat{A} \odot \hat{B}$ и убеждаясь с учетом (2.12), что

$$\mathcal{S}^T \hat{X} = (\hat{A}^+ \hat{X}^+ \hat{B}^+)^+ = \hat{B} \hat{X} \hat{A}.$$

11. *Левое супероператорное преобразование*
определяется следующим образом:

$$\hat{A} \mathcal{S} = \mathcal{S}^T \hat{A}. \quad (2.15)$$

Это определение левого умножения аналогично отождествлению умножения слева вектора-строки на квадратную матрицу с результатом умножения транспонированной матрицы на такой же столбец в соответствии с выражением $a^T \mathcal{S} = (\mathcal{S}^T a)^T$, с тем отличием, что в выражении (2.15) оператор \hat{A} фигурирует в общем виде, а не в виде его представления вектором-столбцом или строкой.

12. *Эрмитовость супероператоров*
определяется соотношением $\mathcal{S}^+ = \mathcal{S}$. Супероператоры вида

- $\hat{A} \odot \hat{A}^+ + \hat{A}^+ \odot \hat{A}$,
- $\hat{A} \odot \hat{B}$ для эрмитовых \hat{A}, \hat{B} ,
- $\hat{A} \odot + \odot \hat{A}$ для эрмитова \hat{A} ,
- $i(\hat{A} \odot \hat{A}^+ - \hat{A}^+ \odot \hat{A})$,
- $[\hat{A}^+, \odot][\hat{A}, \odot]$

эрмитовы.

13. *Антиэрмитовость супероператоров*
определяется соотношением $\mathcal{S}^+ = -\mathcal{S}$. Супероператоры вида

- $i[\hat{A}, \odot]$ для эрмитова \hat{A}

антиэрмитовы.

14. Антисимметричность супероператоров

определяется соотношением $\mathcal{S}^T = -\mathcal{S}$. Супероператоры вида

- $\hat{A} \odot \hat{A}^+ - \hat{A}^+ \odot \hat{A}$,
- $[\hat{A}, \odot]$ для эрмитова \hat{A}

антисимметричны.

Соответственно, лиувиллиан (2.7) является эрмитовым и антисимметричным супероператором.

Используя определение эрмитовой сопряженности (2.11), получаем для супероператоров вида (2.1) простое соотношение

$$\mathcal{S}^{-1} = \mathcal{S}^+, \quad (2.16)$$

справедливое для унитарных операторов, которыми и являются супероператоры вида (2.1) в линейном пространстве квантовых операторов с введенным выше скалярным произведением.

Для символических представлений унитарных супероператоров (2.1) справедливо

15. Правило унитарного преобразования:

$$\mathcal{S}f(\hat{A} \odot \hat{B})\mathcal{S}^{-1} = f(\mathcal{S}\hat{A} \odot \mathcal{S}\hat{B}). \quad (2.17)$$

Для случая супероператора временной эволюции $S = S(t)$ оно выражает тот очевидный факт, что преобразование временной эволюции, примененное к супероператору, выраженный с помощью функции f через операторы физических величин, сводится просто к замене начальных значений операторов на их значения в момент времени t .

В результате описанной конкретизации основных определений теории линейных операторов применительно к супероператорам символическое представление самым естественным образом отображает все основные операции матричной алгебры. Это делает данное наиболее экономное и наглядное представление супероператоров эффективным не только для целей описания структуры супероператоров, возникающих в теории квантовых случайных процессов, но и для выполнения наиболее общих расчетов как в аналитическом, так и численном виде.

2.2 Матричные представления

Как и любые линейные операторы, супероператоры могут быть представлены в виде матриц после введения линейного базиса на линейном пространстве квантовых операторов. Теперь следует отметить, что в квантовой теории определены два качественно отличные класса операторов: операторы, описывающие физические переменные, и операторы, описывающие квантовые состояния, т. е. матрицы плотности. Этот дуализм проявляется в структуре усреднения по формуле (2.5), билинейной по этим операторам. При этом эти два класса операторов качественно неравноправны, поскольку матрицы плотности удовлетворяют условиям ограниченности и нормировки, в то время как такие требования к физическим величинам излишни. Кроме того, матрицы плотности безразмерны, в то время как рассмотрение физических величин обычно связано с определенными физическими размерностями. Например, в квантовой механике материальной

точки алгебраический (но не линейный) базис алгебры физических величин образуется операторами канонического импульса и координаты, произведение размерностей которых имеет размерность действия. Поэтому удобные операторные базисы для физических переменных могут иметь физическую размерность, отличную от размерности базиса матриц плотности. Кроме того, в общем случае рассматриваемые в теории линейные пространства матриц плотности и операторов физических величин могут не совпадать и принципиально не иметь общего линейного базиса.

Еще одно важное соображение общего характера связано с геометрической размерностью линейного пространства, необходимого для представления физических величин и матриц плотности. Поскольку все мыслимые в квантовой механике преобразования получаются комбинацией унитарных преобразований и усреднения по части переменных, то они заведомо не изменяют единичный оператор, если применяются к операторам физических величин, и след, если применяются к матрицам плотности. Поэтому, если представить операторы физических величин в виде

$$\hat{A} = a\hat{I} + \hat{B}, \quad (2.18)$$

где a — произвольное число, а оператор \hat{B} принадлежит некоторому линейному пространству операторов, не включающему единичный, то для бесконечно малого при $\varepsilon \rightarrow 0$ линейного преобразования

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A} + \varepsilon \mathcal{L}\hat{A}$$

из условия неизменности \hat{A} при $\hat{B} = 0$, т. е. $\mathcal{L}\hat{A} = \mathcal{L}\hat{I} = 0$, вытекает следующая самая общая блочная структура супероператора физического преобразования:

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{W}^T \\ 0 & \mathcal{L}_\sigma \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

где верхний нулевой элемент есть нулевое число, описывающее преобразование $a \rightarrow a' = 0$; нижний нулевой — преобразование $a \rightarrow \hat{B}' = 0$; верхний ненулевой — преобразование $\hat{B} \rightarrow a' = \mathcal{W}^T \hat{B}$, т. е. \mathcal{W}^T есть линейный функционал на линейном подпространстве операторов \hat{B} (символ транспонирования указывает, что при векторном представлении \mathcal{W}^T есть строка, полученная транспонированием вектора \mathcal{W}); нижний ненулевой — супероператорное преобразование $\hat{B} \rightarrow \hat{B}' = \mathcal{L}_\sigma \hat{B}$. Если применить супероператор \mathcal{L} к матрицам плотности $\hat{\rho}$, представив их в виде линейной комбинации какого-либо выделенного оператора с ненулевым следом и произвольного оператора с нулевым следом (в качестве первого можно взять оператор, кратный единичному), то получаем блочную структуру, транспонированную по отношению к описываемой соотношением (2.19). Если ввести преобразование матрицы плотности как ее умножения слева в виде $\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho}' = \hat{\rho} + \varepsilon \hat{\rho} \mathcal{L}$, то представление (2.19) является единым выражением как условия неизменности единичного оператора, так и условия сохранения следа матрицы плотности. Матрицы плотности однозначно могут быть заданы лишь второй компонентой разложения (2.18), поскольку ее нормировка на единицу определяет параметр $a = 1/(\text{Tr } \hat{I})$ как константу системы ($w_0 = 1/2$ для ДС). Несмотря на это произвольные преобразования в общем случае могут включать не только линейное преобразование в подпространстве компонент \hat{B} , но и недиагональный элемент. Однако, если рассматриваемое преобразование унитарно, т. е. описывает динамику замкнутой системы, то $\mathcal{W}^T = 0$, и оно всегда может быть описано в подпространстве, не содержащем единичного оператора. В случае произвольных ОС это не так, хотя для специальных типов ОС это иногда

возможно. В общем случае при рассмотрении только этого подпространства рассматриваемые преобразования теряют свойство линейности, так как в соответствующих уравнениях вклад \mathcal{W}^T отображается свободным членом, не содержащим компонент матрицы плотности $\hat{\rho}$. В некоторых работах по релаксации ДА или электронного спина динамика ОС исследовалась именно таким образом [16], с использованием представления динамики в терминах трехмерного пространства векторов Блоха, задающих матрицу плотности. Невозможность для ОС представления динамики унитарным преобразованием только в подпространстве динамических переменных при использовании представления стохастическим уравнением для волновой функции выражается в нелинейности уравнения [14].

Супероператорам вида (2.19) соответствует следующая универсальная структура собственных значений и соответствующих правых и левых собственных векторов, записанных с использованием системы обозначений Дирака [8]:

$$\lambda_0 = 0, \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \langle 0| = (1, -\mathcal{W}^T \mathcal{L}_\sigma^{-1}), \quad (2.20)$$

$$\lambda \neq 0, \quad |\lambda\rangle = \begin{pmatrix} \lambda^{-1} \mathcal{W}^T \hat{e}_\sigma \\ \hat{e}_\sigma \end{pmatrix}, \quad \langle \lambda| = (0, \hat{h}_\sigma). \quad (2.21)$$

Здесь \hat{e}_σ , \hat{e}_σ — правые и левые собственные операторы супероператора \mathcal{L}_σ :

$$\mathcal{L}_\sigma \hat{e}_\sigma = \lambda \hat{e}_\sigma, \quad \hat{h}_\sigma \mathcal{L}_\sigma = \lambda \hat{h}_\sigma. \quad (2.22)$$

После перехода к векторному представлению операторов они описываются векторами-столбцами или строками, а функционал \mathcal{W}^T — вектором-строкой. При этом правое соотношение в (2.20) определяет общий вид стационарной матрицы плотности, а (2.21) сводят исходную проблему расчета собственных значений к собственным векторам к проблеме (2.22) в подпространстве с размерностью меньшей исходной на единицу, которое отвечает только физически переменным величинам, линейно независимым от единичного оператора \hat{I} .

Супероператорная блочная структура (2.19) является частным случаем более общего класса супероператоров, играющего важную роль в теории атомных резонансов и в теории релаксации системы линейных осцилляторов. Это *понижающие* супероператоры, для которых в естественном для рассматриваемой проблемы выборе операторного базиса \hat{e}_k существует такое разложение линейного пространства E рассматриваемых операторов в виде $E_1 \oplus E_2$, для которого лиувиллиан имеет блочное представление

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} \mathcal{L}_{11} & \mathcal{L}_{12} \\ 0 & \mathcal{L}_{22} \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

т. е. никакие переменные из подпространства E_1 не преобразуются в переменные из подпространства E_2 . Соответственно, $f(\mathcal{L})E_1 = f(\mathcal{L}_{11})E_1$, т. е. для расчета переменных \hat{A} , принадлежащих линейному подпространству E_1 , не требуется введения в рассмотрение переменных из E_2 , т. е. происходит уменьшение размерности проблемы при расчете средних значений $\langle \hat{\rho} | f(\mathcal{L}) | \hat{A} \rangle$, если только векторное представление $\langle \hat{\rho} |$ матрицы плотности известно. Целесообразно особо выделить класс *глобально* понижающих супероператоров, которые имеют описанную структуру для любой пары подпространств

$E_k \oplus E_{k+1}$ из разложения полного пространства в виде $E = E_0 \oplus E_1 \oplus E_2 \dots$, естественно для рассматриваемой проблемы. Такая ситуация возникает в следующих двух специальных случаях — в N -уровневом атоме и в системе гармонических осцилляторов. В N -уровневом атоме это имеет место, если для системы уровней с энергиями, превосходящими энергию некоторого уровня, отсутствуют процессы возбуждения с нижележащих уровней. В системе гармонических осцилляторов с линейным затуханием эволюционный оператор представляется в вид суммы оператора гармонических осцилляций, оператора линейного затухания и оператора линейной диффузии, которые преобразуют полиномы n -ой степени координат и импульсов в полиномы той-же степени. В качестве подпространства E_1 при этом может рассматриваться линейная оболочка полиномов любой степени n .

Пусть супероператор \mathcal{S} определен на линейном пространстве E операторов $\hat{A} \in E$ и в E определен линейный базис операторов $\{\hat{e}_k\}$, с помощью которого операторы \hat{A} представляются в виде соответствующих линейных комбинаций

$$\hat{A} = \sum a_k \hat{e}_k. \quad (2.24)$$

Базис $\{\hat{e}_k\}$ может быть определен как *правый*, поскольку используется для представления операторов, стоящих справа в выражении $\mathcal{S}\hat{A}$. Набор чисел a_k является *векторным представлением* оператора \hat{A} . Результат преобразования $\hat{B} = \mathcal{S}\hat{A}$ представляется в линейной комбинации $\mathcal{S}\hat{A} = \sum a_k \mathcal{S}\hat{e}_k$. Коэффициенты S_{nk} разложения

$$\mathcal{S}\hat{e}_k = \sum_n S_{nk} \hat{e}_n \quad (2.25)$$

называются *матричным представлением* супероператора \mathcal{S} . При этом векторное представление оператора $\hat{B} = \sum b_k \hat{e}_k$, как легко видеть, описывается в виде матричного преобразования

$$b_n = \sum_k S_{nk} a_k. \quad (2.26)$$

Удобно использовать систему обозначений Дирака, чтобы сделать наглядной связь между векторными представлениями операторов и самими операторами. Будем описывать векторное представление оператора \hat{A} кет-вектором

$$|\hat{A}\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \dots \\ a_k \\ \dots \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

а супероператор \mathcal{S} будем отождествлять, где это не вызывает недоразумения, с матрицей (S_{nk}) . В этих обозначениях имеем для представление результата супероператорного преобразования

$$|\mathcal{S}\hat{A}\rangle = S |\hat{A}\rangle, \quad (2.28)$$

где \mathcal{S} слева обозначает супероператор безотносительно к способу его представления, а справа стоит соответствующая матрица S .

Для того, чтобы рассчитать коэффициенты a_k, S_{nk} , можно ввести некоторый базис $\{\hat{h}_k\}$, взаимно ортонормированный по отношению к базису $\{\hat{e}_k\}$:

$$(\hat{h}_k, \hat{e}_n) = \delta_{kn}. \quad (2.29)$$

В отличие от $\{\hat{e}_k\}$, его можно определить как “левый”. Тогда, умножая скалярно обе части представления (2.24) слева на \hat{h}_n , получаем с учетом соотношения (2.29)

$$a_k = (\hat{h}_k, \hat{A}). \quad (2.30)$$

Аналогично, из соотношения (2.25) получаем

$$S_{nk} = (\hat{h}_n, \mathcal{S}\hat{e}_k). \quad (2.31)$$

С использованием обозначений Дирака для скалярного произведения, определенного соотношением (2.4) последние два правила принимают вид:

$$a_k = \langle \hat{h}_k | \hat{A} \rangle, \quad S_{nk} = \langle \hat{h}_n | \mathcal{S}\hat{e}_k \rangle. \quad (2.32)$$

Здесь учтено представление скалярного произведения в форме

$$(\hat{A}, \hat{B}) = \langle \hat{A} | \hat{B} \rangle, \quad (2.33)$$

где

$$\langle \hat{A} | = (a_1^*, \dots, a_n^*, \dots) \quad - \quad (2.34)$$

вектор-строка (“бра-вектор”), полученная из разложения $\hat{A} = \sum a_k \hat{g}_k$. Она эрмитово сопряжена к вектору $| \hat{A} \rangle$, так что $\langle \hat{A} | \hat{A} \rangle = \sum |a_k|^2$, если базис ортонормирован, т. е. $\hat{h}_k = \hat{e}_k$ и

$$(\hat{e}_k, \hat{e}_n) = \delta_{kn}.$$

Полезно выделить класс базисов $\{\hat{e}_k\}$, используемых для представления преобразуемых операторов и супероператоров, в котором представления a_k и матрицы S_{nk} прямым образом воспроизводят структуру комплексного сопряжения комплексных чисел, отображаемую также и алгеброй операторов физических величин¹. Таким базисом, очевидно, является базис эрмитовых операторов. Для него эрмитовым операторам \hat{A} соответствуют вещественные векторы a_k , что очевидно из самого представления (2.24) с учетом линейной независимости базисных операторов: если в правой части хотя бы один из коэффициентов a_k имеет ненулевую мнимую часть, то описываемый им операторный вклад имеет ненулевую антиэрмитову часть, и оператор \hat{A} не будет эрмитовым. Эрмитово сопряженным операторам соответствуют комплексно сопряженные векторы, а эрмитово сопряженным супероператорам — эрмитово сопряженные матрицы:

$$\hat{A}^+ \longrightarrow (a_k^*), \quad \mathcal{S}^+ \longrightarrow S^+. \quad (2.35)$$

Последнее соответствие следует из выражения (2.31) с учетом представления скалярного произведения (2.4):

$$(S)_{nk}^+ = (S)_{kn}^* = (\text{Tr} \hat{h}_k^+ \mathcal{S}\hat{e}_n)^* = \text{Tr} (\mathcal{S}\hat{e}_n)^+ \hat{h}_k = (\mathcal{S}\hat{e}_n, \hat{h}_k) = (\hat{e}_n, \mathcal{S}^+ \hat{h}_k). \quad (2.36)$$

Последнее соотношение в соответствии с определением эрмитова сопряжения и есть nk -ый матричный элемент эрмитово сопряженного супероператора \mathcal{S}^+ , который задан в другом линейном пространстве E^* операторов с линейным базисом \hat{h}_k . В практических

¹Комплексному сопряжению соответствует эрмитово сопряжение, вещественным числам соответствуют эрмитовы операторы ($\hat{A} = \hat{A}^+$), мнимым — антиэрмитовы ($\hat{A} = -\hat{A}^+$).

расчетах пространства E^* , E часто совпадают. В частности, в рассматриваемых здесь представлениях используются базисы, у которых правые и левые базисные векторы отличаются только постоянным множителем:

$$\hat{h}_k = \text{const} \times \hat{e}_k. \quad (2.37)$$

Унитарный супероператор \mathcal{S} вида (2.1) представляется унитарной матрицей $S^{-1} = S^+$, антиэрмитов супероператор \mathcal{L} — антиэрмитовой матрицей $L^+ = -L$.

Центральной задачей теории является расчет зависящих от времени физических величин. Если определен супероператор временной эволюции $\mathcal{S}(t)$, действующий на операторы физических величин \hat{A} , и рассчитано его матричное представление $S(t)$ в базисе \hat{e}_k , а матрицы плотности представлены в биортогональном базисе \hat{h}_k , то в соответствии с развитой техникой правило вычисления средних имеет вид:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \mathcal{S}(t) \hat{A} = \langle \hat{\rho} | S(t) | \hat{A} \rangle. \quad (2.38)$$

Для того, чтобы полностью отобразить все операции на алгебре физических переменных, необходимо в дополнение к описанной теории линейных преобразований дать представление операторного умножения $\hat{A}\hat{B}$ в терминах представляющих их векторов $| \hat{A} \rangle, | \hat{B} \rangle$. Однако, такого универсального представления не существует, и оно может быть введено только в конкретном виде, справедливом для соответствующей специальной квантовой системы и заданного операторного базиса. Оно может быть выражено через соответствующее правило представления умножения базисных операторов, которое обязано выражаться в виде линейной комбинации базисных операторов, если линейный базис является полным в рассматриваемой алгебре:

$$\hat{e}_k \hat{e}_l = G_{klm} \hat{e}_m \quad (2.39)$$

(по совпадающим индексам подразумевается суммирование). Тензор G_{klm} есть набор *структурных коэффициентов* рассматриваемой алгебры, которые не зависят от выбора специфического представления базисных операторов \hat{e}_k , т. е. сохраняются при преобразованиях $\hat{e}_k \rightarrow U^{-1} \hat{e}_k U$. С помощью этого тензора может быть найдено векторное представление для произведения любой пары операторов из рассматриваемой алгебры.

Глава 3

Важнейшие примеры супероператоров замкнутых квантовых систем

3.1 Двухуровневая система

Гильбертово пространство двухуровневой квантовой системы есть в самом общем случае комплексное¹ двумерное пространство $H \ni \psi$, описываемое комплексными двумерными векторами ψ , из которых физически различным состояниям соответствуют нормированные векторы с отброшенным общим фазовым множителем:

$$\psi = \begin{pmatrix} \sqrt{1-n_2} \\ \sqrt{n_2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

где $n_2 = |\psi_2|^2$ соответствует средней населенности уровня. Соответственно, множество физически различных состояний двумерно. Его принято представлять на трехмерной сфере Пуанкаре (рис. 3.1), возникающей после расчета трехмерного вектора

$$\mathbf{s} = \psi^\dagger \hat{\boldsymbol{\sigma}} \psi, \quad (3.2)$$

где $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, — трехмерный вектор матриц Паули

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

описывающего среднее значение вектора спинового момента в случае частицы со спином $1/2$. При этом $s^2 = 1$ для любых ψ , причем переход от одной волновой функции к другой отвечает соответствующему повороту в вещественном трехмерном пространстве, который при квантовомеханическом усреднении может быть перенесен с волновой функции на вектор $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$.

¹Реализуется ли в какой-либо фундаментальной частице вещественное двумерное пространство как полное пространство ее спиновых состояний? В случае поляризационных состояний световой волны оно описывает класс линейно поляризованных состояний. Его аналогом в случае орбитального движения частицы является пространство состояний с вещественными волновыми функциями, в которых средний импульс частицы всегда равен нулю, т. е. “отсутствует движение”.

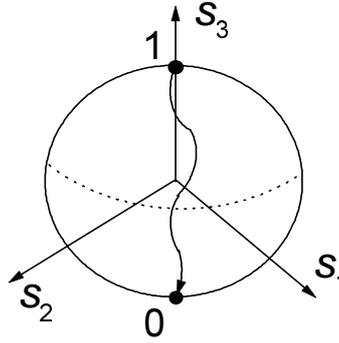


Рис. 3.1: Изображение множества чистых квантовых состояний на трехмерной сфере Пуанкаре. Точки 1 и 0 отвечают состояниям $|2\rangle$ и $|1\rangle$ с соответствующими значениями $n_2 = 1$ и $n_2 = 0$. Стрелкой показан процесс спонтанного распада в ДА.

Алгебра \mathcal{B} физических событий описывается как алгебра его подпространств, которые могут иметь вид одного из трех типов:

$$\{\emptyset, \psi, H\},$$

где первый член обозначает пустое множество, второй — одномерное линейное пространство, отождествляемое с ψ , третий — само пространство состояний, имеющее смысл единичного элемента данной алгебры. Квантовая вероятностная мера \mathcal{P} , входящая в определение вероятностного пространства $(H, \mathcal{B}, \mathcal{P})$, введенного в *Главе 1*, выражается через 2×2 -матрицу плотности [17, 18]

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Она удовлетворяет условиям *эрмитовости*

$$\mathcal{Jm}(\rho_{11}) = \mathcal{Jm}(\rho_{22}) = 0, \quad \rho_{21} = \rho_{12}^*,$$

положительности

$$\psi^+ \hat{\rho} \psi \geq 0 \quad \text{для всех } \psi$$

и *нормировки*

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \rho_{11} + \rho_{22} = 1.$$

Помимо полного вероятностного пространства, включающего все физические состояния двухуровневой системы, в специальных случаях могут возникать редуцированные пространства. Пример редуцированного квантового вероятностного пространства двухуровневой системы дается алгеброй событий, представленной ортогональными состояниями $|1\rangle, |2\rangle$ плюс все H плюс пустое подпространство \emptyset . Эта алгебра естественным образом возникает при рассмотрении квантового случайного процесса в ДА в условиях неограниченно быстрой упругой дефазировки (см. п. 9.4), когда квантовый случайный процесс в полном квантовом пространстве сводится к классическому случайному процессу в редуцированном вероятностном пространстве, в котором логика квантовых событий совпадает с классической.

Операторы физических величин описываются матрицами

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

которые, в отличие от матрицы плотности, удовлетворяют лишь требованию эрмитовости (если они описывают вещественные физические величины).

Линейный базис в пространстве 2×2 -матриц четырехмерен, так что он должен представляться четырьмя базисными операторами. Существуют два подхода, соответствующие различным уровням общности введения этих операторов. Наиболее общий подход состоит в *алгебраическом* описании базиса безотносительно к способу его конкретного представления матрицами. Он реализуется путем задания набора алгебраических соотношений, определяющих эти операторы однозначно с точностью до унитарного преобразования. Таким способом вводятся так называемые *операторы квазиспина*, определяемые коммутационными соотношениями

$$[\hat{s}_k, \hat{s}_l] = 2i\varepsilon_{klm}\hat{s}_m, \quad k, l, m = 1, 2, 3, \quad (3.6)$$

где ε_{klm} — тензор Леви-Чевита [15], который равен 1 для сочетания 1,2,3, нулю при наличии двух или более совпадающих индексов и меняет знак при любой перестановке двух индексов; по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Соотношение (3.6) есть определение спина электрона, через который его спиновый момент выражается домножением на $\hbar/2$. При замене $(\hbar/2)\hat{s}_k = \hat{M}_k$ оно дает стандартное алгебраическое определение операторов любого вращательного момента [5]– [8]. После дополнения операторов (3.6) единичным оператором для представления физических величин можно ввести следующий базис:

$$\{\hat{e}_0, \hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3\} = \{\hat{I}, \hat{s}_1, \hat{s}_2, \hat{s}_3\}. \quad (3.7)$$

Биортогональный к нему базис операторов \hat{h}_k отличается от него множителем $1/2$, который не отражается на матричных элементах, представления если использовать его вместо \hat{e}_k . Он более удобен для представления матриц плотности, поскольку через него она представляется разложением [18]:

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha=0}^3 w_\alpha \hat{h}_\alpha = \frac{1}{2} \left(w_0 \hat{I} + \sum_{k=1}^3 w_k \hat{s}_k \right), \quad (3.8)$$

где w_0 всегда равно единице в силу нормировки, w_k вещественны в силу эрмитовости $\hat{\rho}$, а $\sum w_k^2 \leq 1$ в силу положительной определенности. Операторы квазиспина обычно объединяются в трехмерный вектор $\hat{\mathbf{s}}$. С использованием этого обозначения матрицы плотности записываются в виде

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left[w_0 \hat{I} + (\mathbf{w} \hat{\mathbf{s}}) \right], \quad (3.9)$$

где \mathbf{w} обозначает трехмерный вектор (w_1, w_2, w_3) , который в теории ДА носит название вектора Блоха. Для чистых состояний, т. е. для матриц плотности, представимых в виде $\hat{\rho} = \psi\psi^+$, он имеет единичную длину:

$$w_1 = 2\sqrt{n_2(1-n_2)} \cos \varphi, \quad 2\sqrt{n_2(1-n_2)} \sin \varphi, \quad w_3 = 2n_2 - 1, \quad (3.10)$$

откуда получаем $\mathbf{w}^2 = 1$, а для полностью неопределенного состояния $\hat{\rho} = \hat{I}/2$, соответствующего в случае ДА термодинамическому равновесию при бесконечной температуре, получаем $\mathbf{w} = 0$. Представив операторы \hat{A} взамен матричного представления (3.5) подобно представлению (3.9) в форме $\hat{A} = a_0 \hat{I} + (\mathbf{a}\hat{\mathbf{s}})$ и используя правила алгебры (3.6) (см. также (3.12)), можно рассчитывать средние $\text{Tr} \hat{A} \hat{\rho}$, не обращаясь к матричным представлениям, а используя лишь заданные на базисных элементах значения следа $\text{Tr} \hat{s}_k = 0$, $\text{Tr} \hat{I} = 2$.

Другой подход к реализации представления состоит в выборе такого базиса в гильбертовом пространстве, в котором базисные операторы имеют стандартный — канонический — вид. Такой подход лежит в основе, например, традиционного для квантовой механики шредингеровского представления, в котором для операторов импульса и координаты используются представления $x, d/dx$. Такой подход может быть определен как *аналитический* — в широком смысле, имея в виду место аналитических представлений в общей теории линейных операторов [19]. В каноническом базисе операторы квазиспина имеют вид матриц Паули, так что для вектора квазиспина имеем просто $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\vec{\sigma}}$. С помощью данного матричного представления с учетом вида матриц Паули (3.3) нетрудно получить соотношение антикоммутируемости операторов квазиспина $\hat{s}_k \hat{s}_l = -\hat{s}_l \hat{s}_k$ при $k \neq l$ и идемпотентности $\hat{s}_k^2 = \hat{I}$. В соответствии с определением (3.6) произведения двух различных операторов квазиспина сводятся к третьему:

$$\hat{s}_k \hat{s}_l = i \varepsilon_{klm} \hat{s}_m. \quad (3.11)$$

Это соотношение сводит любые функции операторов квазиспина к их линейным комбинациям даже без явного учета того обстоятельства, что они образуют после добавления единичного оператора полный линейный базис множества операторов в двумерном гильбертовом пространстве. (Оно само и служит выражением этого обстоятельства). Если дополнить операторы квазиспина до полного базиса единичными операторами и рассмотреть дополнительные произведения базисных элементов, содержащие единичный оператор, получаем структурные коэффициенты G_{klm} , определенные соотношением (2.39) Главы 2:

$$G_{klm} = i \varepsilon_{klm}, \quad k, l, m = 1, 2, 3; \quad G_{0lm} = G_{l0m} = G_{lm0} = \delta_{lm}. \quad (3.12)$$

Найдем теперь матричное представление лиувиллиана \mathcal{L} , записанного в виде символически представленного супероператора (2.7) Главы 2, в базисе (3.7) операторов квазиспина. Наиболее общий вид гамильтониана двухуровневой системы есть, очевидно,

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar}{2} (\mathbf{\Omega} \hat{\mathbf{s}}), \quad (3.13)$$

где $\mathbf{\Omega} = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$ в теории резонансного отклика ДА [18] описывает так называемый *вектор вращательного момента*, действующего на двухуровневую систему. Его модуль при этом носит название *полной частоты Раби*. Применяя супероператор (2.7) Главы 2, имеющий вид коммутатора с оператором (3.13), к базисным элементам — операторам квазиспина \hat{s}_k , получаем линейную комбинацию коммутаторов квазиспина (3.6) в виде $\Omega_j \varepsilon_{jkn} \hat{s}_n$. Отсюда, в соответствии с определением (2.25) Главы 2 выражаем матричные элементы лиувиллиана \mathcal{L} :

$$L_{nk} = 0 \quad \text{для } n = 0 \text{ или } k = 0,$$

$$L_{nk} = \Omega_j \varepsilon_{jkn}, \quad n, k = 1, 2, 3. \quad (3.14)$$

Соответствующая 4×4 -матрица имеет вид:

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Omega_3 & \Omega_2 \\ 0 & \Omega_3 & 0 & -\Omega_1 \\ 0 & -\Omega_2 & \Omega_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

(где нумерация строк и столбцов отличается от индексов базисных векторов на 1, т. е. $n \rightarrow n + 1, k \rightarrow k + 1$). Ее ненулевая 3×3 -подматрица L^s , заданная соотношениями (3.14), как это нетрудно проверить (см. определение векторного произведения через тензор Леви-Чевита [15]), описывает преобразование, отвечающее векторному произведению вектора $-\mathbf{\Omega}$ на преобразуемый вектор, т. е.

$$L^s \mathbf{f} = -[\mathbf{\Omega} \times \mathbf{f}]. \quad (3.16)$$

Ее собственные значения есть

$$\lambda_0 = 0, \quad \lambda_3 = 0, \quad \lambda_{1,2} = \pm i\Omega, \quad (3.17)$$

где

$$\Omega = \sqrt{\mathbf{\Omega}^2} \quad - \quad (3.18)$$

частота прецессии, а соответствующие собственные векторы имеют вид

$$|\lambda_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\lambda_k\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{w}_k \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

где трехмерные собственные векторы \mathbf{w}_k определяются выражениями

$$\mathbf{w}_3 = \begin{pmatrix} \Omega_1/\Omega \\ \Omega_2/\Omega \\ \Omega_3/\Omega \end{pmatrix}, \quad \mathbf{w}_{1,2} = \frac{1}{\Omega \sqrt{2(\Omega_1^2 + \Omega_2^2)}} \begin{pmatrix} \mp i\Omega\Omega_2 - \Omega_3\Omega_1 \\ \pm i\Omega\Omega_1 - \Omega_3\Omega_2 \\ \Omega_1^2 + \Omega_2^2 \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Соотношения (3.17) — (3.20) играют важную роль в теории спектральных откликов двухуровневого атома в лазерном поле [18, 20].

Нетрудно проследить, что при применении матрицы (3.15) к 4-вектору w , $w^T = (w_0, \mathbf{w})$ (w — вектор-столбец), представляющего матрицу плотности согласно (3.8), преобразуется только трехмерный вектор \mathbf{w} по правилу (3.16). Соответственно, временная динамика гамильтоновой двухуровневой системы в матричном представлении описывается соотношениями

$$\frac{dw}{dt} = Lw \quad \longrightarrow \quad \frac{d\mathbf{w}}{dt} = -[\mathbf{\Omega} \times \mathbf{w}]. \quad (3.21)$$

Представление в базисе квазиспина операторов физических величин 4-векторами $a = (a_0, \mathbf{a})$ осуществляется аналогично. В соответствии с правилом сопряжения эволюционных супероператоров (2.16) Главы 2 и с учетом того, что временная динамика физических величин описывается обратным преобразованием супероператора временной

эволюции матрицы плотности, в представлении Гейзенберга она описывается эрмитово сопряженным супероператором и соответствующее (3.21) уравнение имеет вид

$$\frac{da}{dt} = -La \quad \longrightarrow \quad \frac{d\mathbf{a}}{dt} = [\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{a}]. \quad (3.22)$$

Решения уравнений (3.21), (3.22) описывается матрицами S и S^+ , где

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & S^s \end{pmatrix}, \quad S^s = \text{T exp} \left(\int L^s d\tau \right). \quad (3.23)$$

В символическом представлении этой матрице соответствует

$$\mathcal{S} = \text{T exp} \left(-\frac{i}{2} \int [(\boldsymbol{\Omega}\hat{\mathbf{s}}), \odot] d\tau \right). \quad (3.24)$$

Для замкнутой стационарной системы в матричном представлении она может быть рассчитана по общей формуле $\sum F(\lambda_k) |\lambda_k\rangle\langle\lambda_k|$, представляющей функцию матрицы через ее собственные значения и собственные векторы:

$$\mathcal{S} = \sum_{k=0}^3 \exp(\lambda_k t) |\lambda_k\rangle\langle\lambda_k|, \quad (3.25)$$

где в данном случае правые и левые собственные векторы совпадают ($|\lambda_k\rangle = \langle\lambda_k|^+$) и описываются соотношениями (3.19), (3.20).

Таким образом, динамика замкнутых двухуровневых систем описывается как вращение в трехмерном вещественном пространстве и задается вектором угловой скорости вращения. При этом зависящие от времени средние значения операторов с учетом обозначений и общих соотношений Главы 2 и формулы (2.38) в самом общем случае представляются в виде

$$\langle\hat{A}\rangle = (w, S(t)a). \quad (3.26)$$

Для замкнутых систем это соотношение сводится к трехмерному:

$$\langle\hat{A}\rangle = a_0 + (\mathbf{w}S^s(t)\mathbf{a}).$$

Для случая супероператоров, заданных в пространстве матриц плотности, в этих соотношениях следует поменять местами векторы w, a . Соответствующие же эволюционные матрицы для этих двух типов представления связаны соотношением $S \rightarrow S^+, S^s \rightarrow S^{s+} = (S^s)^{-1}$.

Нелинейные функции от операторов могут быть описаны в их векторном представлении, если задано правило представления операторного произведения $\hat{A}\hat{B}$. Для базисных операторов оно задано в форме (3.11), откуда для произвольных операторов получаем:

$$\hat{A}\hat{B} = a_0 b_0 \hat{I} + (a_0 b_m + b_0 a_m + i a_k b_l \varepsilon_{klm}) \hat{s}_m. \quad (3.27)$$

Тем самым справедливо правило представления

$$\hat{A}\hat{B} \longrightarrow (a_0 b_0, \vec{ab}), \quad \vec{ab} = a_0 \mathbf{b} + b_0 \mathbf{a} + i[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]. \quad (3.28)$$

Здесь некоммутативность операторов отражается в неколлинеарности “пространственных” компонент \mathbf{a}, \mathbf{b} , представляющих рассматриваемые операторы $\hat{A}\hat{B}$, и описывается в (3.28) мнимой частью, антисимметричной относительно перестановки операторов.

3.2 Представление Вигнера

При рассмотрении орбитального движения квантовых частиц гильбертово пространство состояний H бесконечномерно и в шредингеровском представлении описывается волновыми функциями $\psi(q)$ в пространстве *обобщенных координат* $q, q^T = (q_1, \dots, q_n)$, где n — число степеней свободы. Алгебра операторов физических переменных описывается коммутационными соотношениями между операторами *канонически сопряженных* координат \hat{q} и импульсов \hat{p} :

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}\hat{I}. \quad (3.29)$$

Отсюда следуют возможные аналитические представления этих операторов, в частности, шредингеровское представление $\hat{q} \rightarrow q, \hat{p} \rightarrow -i\hbar\partial/\partial q^T$ и сопряженное ему импульсное представление, для которого $\psi \rightarrow \psi(p)$. Для использования записи выражений в векторном виде целесообразно ввести вектор операторов фазовых переменных $\hat{X}^T = (\hat{q}_1, \hat{p}_1, \dots, \hat{q}_n, \hat{p}_n)$ и соответствующая им *коммутационная матрица* C в виде $2n \times 2n$ -матрицы

$$[\hat{X}_j, \hat{X}_k] = C_{jk}\hat{I}. \quad (3.30)$$

При рассмотрении произвольных линейных комбинаций канонических переменных C может иметь вид произвольной антисимметричной эрмитовой матрицы, а для канонического набора в соответствии с (3.29) он имеет вид

$$C = i\hbar E_n, \quad E_n = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & \dots \\ 0 & \dots & 0 \\ \dots & 0 & E_1 \end{pmatrix}, \quad E_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

Для рассмотрения алгебры квантовых физических переменных в терминах классических фазовых переменных $X^T = (q_1, p_1, \dots, q_n, p_n)$ следует ввести операторный базис представления $\hat{e}(X)$, зависящий от континуального индекса X . Таким базисом является, в частности базис δ -функций [20]:

$$\hat{e}(X) = \mathcal{W}\delta(\hat{X} - X). \quad (3.32)$$

Здесь символ \mathcal{W} обозначает так называемое *вигнеровское упорядочение* при одновременном использовании некоммутирующих операторов \hat{X} . Поскольку расчет функций от операторов сводится в конечном счете к суперпозиции умножений и линейных комбинаций, то для однозначного определения результата достаточно задать некоторый принцип, устраняющий неопределенность, возникающую при квантовом обобщении функций нескольких классических переменных. Вигнеровское упорядочение определяется следующим образом

$$\mathcal{W}f(\hat{X}) = \frac{1}{(2\pi)^{2n}} \int \tilde{f}(\chi) \exp(i\chi^T \hat{X}) d\chi, \quad (3.33)$$

где χ — $2n$ -мерный вектор-строка, а $\tilde{f}(\chi)$ обозначает фурье-образ классической функции $f(X)$. Для случая базисных функций (3.32) $\tilde{f}(\chi) \equiv 1$. Выражение (3.33) является очевидным тождеством, если заменить квантовый набор \hat{X} на набор классических величин Y , но в квантовом случае оно является способом задания порядка действия операторов: сначала рассчитываются линейные комбинации вида $i\chi^T \hat{X}$, затем вычисляются экспоненты и, после интегрирования, искомая функция. Чтобы определить, как это упорядочение расставляет сомножители в одночленных выражениях, обобщающих классические выражения типа qp, q^2p, qp^2, \dots , достаточно разложить операторную экспоненту в

(3.33) и сопоставить ее одночлены с соответствующим классическим разложением. Отсюда легко видеть, что классические одночлены переходят в симметризованные по \hat{q}, \hat{p} выражения. В частности,

$$qp \rightarrow \mathcal{W}\hat{q}\hat{p} = \frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}).$$

Впервые идея представления матрицы плотности в так называемом “симметричном” виде, когда в качестве аргументов рассматривались не два координатных индекса q, q' , а эквивалентная пара индексов $X = (q, p)$, была предложена Вигнером [21]. Формулировка этого представления в терминах характеристических функций матрицы плотности, развитая в оригинальной работе Мойяла [22], изложена в лекциях Глаубера [23], сыгравших существенную роль в развитии идеологии и математического аппарата квантовой радиопизики.

Обобщенный базис (3.32) характеризуется скалярным произведением

$$(\hat{e}(X), \hat{e}(X')) = (2\pi\hbar)^{-n} \delta(X - X'). \quad (3.34)$$

Доказательство следует из представления δ -функции в соответствии с представлением (3.33) и соотношения

$$\text{Tr} \exp(i\chi^T \hat{X}) \exp(i\chi'^T \hat{X}) = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^n \delta(\chi - \chi').$$

Последнее может быть доказано с использованием приближенного представления чисто осцилляционных фурье-экспонент гауссовскими операторами с асимптотически малыми квадратичными членами и с применением техники гауссовских операторов [20]. Введенный здесь базис $\hat{e}(X)$ удобно использовать для представления операторов физических величин по формуле

$$\hat{f} = \int f(X) \hat{e}(X) dX. \quad (3.35)$$

При этом функция $f(X)$, представляющая квантовый оператор \hat{f} , имеет ту же самую физическую размерность. Биортогональный к $\hat{e}(X)$ базис отличается с учетом соотношения (3.34) лишь нормировочным множителем:

$$\hat{h}(X) = (2\pi\hbar)^n \hat{e}(X). \quad (3.36)$$

Этот базис удобен для представления матрицы плотности $\hat{\rho} \rightarrow w(X)$ по формуле

$$\hat{\rho} = \int w(X) \hat{h}(X) dX. \quad (3.37)$$

Функция $w(X)$ называется *вигнеровской плотностью*. Она нормирована и позволяет представить усреднение оператора \hat{f} в виде формулы классического усреднения

$$\langle \hat{f} \rangle = \int w(X) f(X) dX, \quad (3.38)$$

соответствующей общей формуле усреднения (2.6) Главы 2, если учесть, что $f(X)$ имеет смысл вектора-столбца $|\hat{f}\rangle$, а $w(X)$ — вектора-строки $\langle \hat{\rho} |$, а скалярное произведение в биортогональном базисе операторов $\hat{h}(X), \hat{e}(X)$ в соответствии с соотношениями (2.33), (2.34) Главы 2 имеет вид

$$(\hat{g}, \hat{f}) = \int g(X) f(X) dX. \quad (3.39)$$

Здесь также предполагается, что левый оператор представлен в левом базисе, а правый — в правом.

Для расчета функций, представляющих операторы, из соотношения (2.30) Главы 2 для данного случая следует рассчитать следующие выражения:

$$f(X) = \text{Tr} \hat{h}(X) \hat{f}, \quad w(X) = \text{Tr} \hat{e}(X) \hat{\rho}. \quad (3.40)$$

С учетом представления фурье-представления (3.33), примененного к δ -функциям, расчеты по этим формулам сводятся к вычислению следа вида

$$\text{Tr} \exp(i\chi^T \hat{X}) \hat{f}.$$

В этих расчетах следует учитывать тот факт, что представленные здесь операторные экспоненты описывают преобразование сдвига операторов канонических переменных:

$$U^{-1} \hat{X} U = \hat{X} + iC\chi, \quad U(\chi) = \exp(i\chi^T \hat{X}). \quad (3.41)$$

Эти операторы образуют новый базис, который “лучше” базиса δ -функций в том отношении, что описывается ограниченными несингулярными функциями, но он не так прямо связан с классическими переменными X . При этом справедливо следующее правило суперпозиции

$$U(\chi)U(\chi') = U(\chi + \chi') \exp\left(-\frac{1}{2}\chi^T C \chi'\right), \quad (3.42)$$

являющееся простым следствием формулы Бейкера-Хаусдорфа для умножения двух экспонент [20]. С использованием этой техники из правого соотношения в (3.40) можно получить вигнеровскую плотность для матрицы плотности чистого состояния $\hat{\rho} = \psi\psi^+$:

$$w(q, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int \psi\left(q - \frac{\xi}{2}\right) \psi^*\left(q + \frac{\xi}{2}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\xi^T p\right) d\xi. \quad (3.43)$$

В этом выражении достаточно нагляден механизм отображения классической информации о паре переменных (q, p) в волновой функции, зависящей только от q . Информация об импульсе связана с частотами пространственных осцилляций $\psi(q)$, передаваемых в интеграле формулы (3.43) через аргумент смещения ξ . Отсюда непосредственно видно, что для точно локализованных функций такой информации нет и, наоборот, для гармонических пространственных осцилляций импульс точно определен.

Расчет лиувиллиана может быть выполнен на основе общей формулы (2.31) Главы 2 для матричных элементов. Поскольку лиувиллиан представлен через оператор Гамильтона, при этом расчете возникают произведения операторов, необходимо иметь задающее операторную алгебру в представлении Вигнера формулу для произведения двух операторов, аналогичную формуле (3.27). С использованием вигнеровского представления операторов после выполнения преобразования Фурье и с учетом представления (3.42) произведения операторных элементов фурье-базиса можно получить следующий результат:

$$\hat{f}\hat{g} \rightarrow \mathcal{N}_{X, \partial/\partial X} f\left(X + \frac{1}{2}C \frac{\partial}{\partial X^T}\right) g(X). \quad (3.44)$$

Здесь $f(X), g(X)$ — скалярные функции, описывающие операторы \hat{f}, \hat{g} в терминах классического фазового пространства, а символ упорядочения $\mathcal{N}_{X, \partial/\partial X}$ обозначает, что диф-

ференцирование выполняется раньше умножения на X . С использованием (3.44) лиувиллиан представляется в виде

$$\mathcal{L} = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{N}_{X, \partial/\partial X} \left[\mathcal{H} \left(X + \frac{C}{2} \frac{\partial}{\partial X^T} \right) - \mathcal{H} \left(X - \frac{C}{2} \frac{\partial}{\partial X^T} \right) \right]. \quad (3.45)$$

Таким образом, динамика орбитального движения частиц может быть представлена в терминах классического пространства. Подчеркнем, что этот результат не является приближенным благодаря тому, что квантовая структура теории в супероператорном описании и векторном представлении операторов точно отображена некоммутативностью “классических” операторов $X, \partial/\partial X$.

Вспоминая, что коммутатор C пропорционален постоянной Планка, в представлении (3.45) можно выполнить предельный переход $\hbar \rightarrow 0, C \rightarrow 0$ и удержать при необходимости старшие из убывающих членов. В этом пределе лиувиллиан с учетом вида (3.31) матрицы C имеет вид

$$\mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial X} E_n \frac{\partial}{\partial X^T}. \quad (3.46)$$

Это выражение является просто векторной записью выражения для классической скобки Пуассона, т. е. правильно описывает классическую динамику. Старшее асимптотическое квантовое приближение имеет порядок \hbar^2 и выражается через операторы третьих производных и третьи производные гамильтониана. В случае квадратичного потенциала квантовое выражение (3.45) точно совпадает с его классическим пределом (3.46). Это означает, что для линейных систем изменение во времени функций, задающих квантовые операторы в представлении Вигнера, сводится к преобразованию аргументов в соответствии с классическими уравнениями движения, и эффекты специфической квантовой диффузии пакетов отсутствуют: имеет место только расплывание пакетов за счет начальной неопределенности по координатам и импульсам.

Если в классической механике распределение $w(X)$ может совпадать с δ -функцией, т. е. неопределенность может отсутствовать как по координатам, так и по импульсам, то в квантовой механике это невозможно. Это следует из соотношения неопределенностей, которое в может быть выражено матричным соотношением

$$K \pm \frac{C}{2} \geq 0, \quad (3.47)$$

где K — симметризованная корреляционная матрица переменных X , а знак \geq обозначает положительную определенность для матриц. Обычное соотношение неопределенностей $\sigma_q^2 \sigma_p^2 \geq \hbar^2/4$ является его простым следствием. Для линейных систем наличие начальной квантовой неопределенности в вигнеровской плотности является единственным их отличием от классических систем. Следует отметить, что вигнеровская плотность не имеет смысла обычного распределения вероятностей, поскольку в силу некоммутативности квантовых переменных их совместное распределение вероятностей в обычном смысле, т. е. как положительная мера на алгебре классических событий, не существует. По этой причине ее положительность для существенно квантовых состояний не гарантирована. Наиболее эффективно использование представления Вигнера для систем, близких к классическим, или для систем с малым ангармонизмом [24].

3.3 Представления, основанные на комплексных амплитудах

В теории электромагнитного поля базисной динамической системой является одномерный гармонический осциллятор с гамильтонианом вида

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2, \quad (3.48)$$

к набору которых сводится свободное электромагнитное поле [20]. Здесь m описывает обобщенную массу, ω — частота колебаний. Поскольку гармонические колебания удобно описывать с использованием комплексных амплитуд, в квантовой теории используются обобщающие понятие классической комплексной амплитуды безразмерные операторы *уничтожения и порождения квантов*

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}, \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}. \quad (3.49)$$

Они не представляют непосредственно никаких квантовых физических величин, так как для них не существует спектрального разложения (1.7) Главы 1 и, следовательно, в теории нет определения события, что представляемая оператором \hat{a} или \hat{a}^+ величина приняла данное значение (напомним, что индикаторами этих событий являются операторы проектирования на соответствующие собственные векторы). Однако, каждая из них содержит информацию одновременно о двух некоммутирующих переменных \hat{q}, \hat{p} , причем эта информация поделена между \hat{a} и \hat{a}^+ так, что первый из них описывает свободные осцилляции с положительной частотой, а второй — с отрицательной:

$$\hat{a}(t) = \hat{a} \exp(-i\omega t), \quad \hat{a}^+(t) = \hat{a}^+ \exp(i\omega t) \quad (3.50)$$

в представлении Гейзенберга в отсутствие внешних воздействий. Благодаря этому разделению для квазирезонансные процессы все линейные по координатам \hat{q}, \hat{p} , величины могут быть выражены через один из этих операторов, в чем и состоит основной смысл их введения.

С алгебраической точки зрения эти операторы описываются коммутационным соотношением

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \quad (3.51)$$

Последнее после дополнения очевидными соотношениями $[\hat{a}^+, \hat{a}] = -1$, $[\hat{a}, \hat{a}] = 0$, $[\hat{a}^+, \hat{a}^+] = 0$ аналогично коммутационному соотношению (3.31) для канонических фазовых переменных при $n = 1$ и получено из него линейным преобразованием (3.49). Важный класс операторных выражений представляют *нормально упорядоченные* выражения, в которых операторы уничтожения стоят правее операторов порождения. Именно такого типа выражения описываются в наиболее фундаментальных процессах детектирования электромагнитного поля измеряемые физические величины [23] (в частности, энергия поля не содержит нефизичной вакуумной добавки). Для описания такого типа выражений удобно по аналогии с вигнеровским упорядочением ввести нормальное упорядочение. При этом, в отличие от вигнеровского представления, при определении операторных выражений в качестве независимых аргументов взамен q, p рассматриваются комплексные амплитуды z^*, z , в то время как для индексации базисных операторов доста-

точно только переменной z . Роль базиса нормального упорядочения играет набор нормально упорядоченных δ -функций

$$\hat{e}(z) = \mathcal{N} \delta(\hat{a} - z, \hat{a}^+ - z^*). \quad (3.52)$$

Здесь исходная скалярная двумерная δ -функция задана на комплексной плоскости и рассматривается как функция переменных z, z^* . Аналогично определению упорядочения в (3.32) символ упорядочения \mathcal{N} определяется через нормальное упорядочение в формальном разложении по \hat{a}, \hat{a}^+ фурье-экспоненты, через которую выражается δ -функция. С использованием данного базиса получаем отображение операторов

$$\hat{f} \longrightarrow f(z^*, z). \quad (3.53)$$

В частности, для оператора энергии имеем представление

$$\hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+)/2 \longrightarrow \hbar\omega/2 + \hbar\omega|z|^2.$$

Второе слагаемое представляет нормально упорядоченный оператор энергии $\hbar\omega\hat{a}^+\hat{a}$.

Сопряженный базис представляется набором проекторов

$$\hat{h}(z) = \psi(z)\psi^+(z), \quad (3.54)$$

где $\psi(z)$ — волновые функции смещенного вакуумного состояния, известные под названием *когерентные состояния*, которые соответствуют применению оператора сдвига $\hat{a} \rightarrow \hat{a} + z$ к оператору вакуумного состояния, т. е. удовлетворяющие уравнению “смещенного вакуума”

$$(\hat{a} - z)\psi(z) = 0.$$

Базис $\hat{h}(z)$ ортонормирован по отношению к $\hat{e}(z)$:

$$\text{Tr} \hat{h}(z)\hat{e}(z') = \delta(z - z').$$

Представление $\hat{\rho} \longrightarrow w(z)$ осуществляется в соответствии с соотношением

$$\hat{\rho} = \int w(z)\hat{h}(z)dz. \quad (3.55)$$

С учетом биортогональности усреднение физических величин представляется, так же, как и в представлении Вигнера:

$$\langle \hat{f} \rangle = \int f(z)w(z)dz. \quad (3.56)$$

Представление для произведения двух операторов, представленных в нормально упорядоченном виде соответствующими функциями f, g , описывается соотношением

$$\hat{f}\hat{g} \longrightarrow \frac{1}{\pi} \int f(z^*, u)g(u^*, z) \exp(-|u|^2) du. \quad (3.57)$$

С помощью этого соотношения можно рассчитать представления супероператоров в виде матриц с матричными индексами $z, z'; z^*, z'^*$ или в виде функций от операторов умножения на z, z^* и дифференцирования. Эта техника широко использовалась, в частности, в работах Лэкса [25], посвященных построению теории лазера как квантовой открытой системы.

Глава 4

Открытые системы и квантовые случайные процессы

4.1 Определение открытой системы и квантового случайного процесса

Перечислим некоторые физические примеры ОС в квантовой радиофизике.

- | | |
|--|--------|
| ✓ Двухуровневый атом в электромагнитном поле вакуума | } → I |
| ✓ Двухуровневый спин в системе таких же спинов | |
| ✓ Двухуровневый атом в буферном газе | |
| ✓ Электрон в электромагнитном поле вакуума | |
| ✓ Лазерная мода в активной среде лазера | |
| ✓ Электронно-дырочная пара в полупроводнике | |
| ✓ Фонон в кристалле твердого тела | } → II |
| ✓ Примесный центр в кристалле твердого тела | |

Здесь цифры I и II введены для обозначения качественного различия в описании системы, связанного с тем, что для класса I сама система в процессе ее динамики не может аннигилировать из области рассматриваемых состояний, что соответствует фиксированной нормировке матрицы плотности $\text{Tr } \hat{\rho} = 1$, в то время как для класса II возможно миграция возбуждения из представляющей интерес области, так что нормировка матрицы плотности не сохраняется. Иногда термин “открытая система” применяется для обозначения только систем последнего типа, однако, здесь рассматриваются фактически только системы с фиксированной нормировкой.

Хотя как с физической точки зрения, так и в отношении математической специфики, эти системы имеют очень большие различия, их статистический анализ связан с рассмотрением одной и той же математической структуры. А именно, полная динамическая система разделяется на две подсистемы: ОС и *резервуар* (иначе — термостат). Это справедливо в тех случаях, когда представляют интерес только физические переменные ОС, в то время как переменные резервуара рассматриваются лишь в той мере, в какой они воздействуют на переменные ОС. Резервуар рассматривается, в основном, как источник шумов и затухания. Представляют интерес лишь величины, усредненные

по шумам резервуара. Поэтому требуется взамен описания динамики составной системы ОС+резервуар дать способ сокращенного описания динамики, с самого начала включающей указанное усреднение.

Математическим определением ОС (см. *Главу 1* а также [26]) является квантовое вероятностное пространство специального вида

$$(H_0 \otimes H_R, \mathcal{B}, \mathcal{P}), \quad (4.1)$$

где H_0 — гильбертово пространство состояний ОС, H_R — гильбертово пространство состояний резервуара. В полном пространстве $H_0 \otimes H_R$ задано семейство унитарных операторов временной эволюции $U(t)$, которому, в соответствии с *Главой 2*, соответствует семейство унитарных супероператоров $\mathcal{S}(t)$. Данное определение приспособлено непосредственно только к описанию ОС типа I, поскольку представление $H_0 \otimes H_R$ предполагает сохранение полной населенности в H_0 , описываемой оператором $\hat{1} \otimes \hat{I}$, где $\hat{1}$ обозначает единичный оператор в ОС, а \hat{I} — в гильбертовом пространстве резервуара.

Квантовым случайным процессом в ОС называется квантовая случайная величина, описываемая оператором вида $\hat{f} = \hat{f} \otimes \hat{I}$. Фактически, только случайные процессы данного вида имеют характер истинно “случайных” во времени величин. Данное представление соответствует учету того обстоятельства, что рассматриваемая физическая величина хотя и описывает лишь ОС, она может зависеть от переменных резервуара, которые включаются в набор переменных ОС в виде единичного оператора \hat{I} . Это означает, что нет никакой зависимости от переменных резервуара в самом определении физической величины, и зависимость устанавливается только в результате взаимодействия ОС с резервуаром. Именно наличие резервуара и взаимодействие с ним, учитываемое в операторе (или супероператоре) временной эволюции, обеспечивает случайный характер изменения во времени переменных \hat{f} . В общем случае нет оснований каким-либо образом конкретизировать в данном определении вид квантового распределения вероятностей \mathcal{P} в совокупной системе. Однако, в соответствии с общепринятой в квантовой теории поля идеологией [27], имеет смысл ввести предположение о статистической независимости при $t = 0$ (в квантовой электродинамике обычно $t = -\infty$) состояний ОС и резервуара. Это означает, что соответствующая \mathcal{P} матрица плотности $\hat{\rho}$ имеет вид

$$\hat{\rho} = \hat{\rho} \otimes \hat{\rho}_R. \quad (4.2)$$

Независимость в выбранный момент времени не сохраняется во времени, поскольку в зависящих от времени операторах $\hat{\rho}$ (или \hat{f}) вследствие взаимодействия ОС и резервуара происходит “одевание” [27] ОС, т. е. установление статистической связи между ОС и существенной для динамики ОС части переменных резервуара. При этом супероператоры динамической эволюции порождают на алгебре переменных резервуара набор переменных $\hat{\xi}(t)$, зависящих от времени, которые имеют смысл шумов, непосредственно воздействующих на ОС.

4.2 Переходные супероператоры ОС

Рассмотрим общее квантовомеханическое выражение для вычисления среднего значения квантового случайного процесса в ОС:

$$\langle \hat{f} \rangle = \text{Tr} (\hat{\rho} \otimes \hat{\rho}_R) \mathcal{S}(t) (\hat{f} \otimes \hat{I}), \quad (4.3)$$

где супероператор временной эволюции задан в представлении Гейзенберга (т. е. является обратным к супероператору (2.1) Главы 2). Вычисление следа здесь сводится к последовательному вычислению сначала следа Tr_R по переменным резервуара, а затем по переменным ОС. Первый этап усреднения дает сокращенное описание средних в терминах собственно ОС, т. е. операторов в гильбертовом пространстве H_0 . При этом возникают, как легко видеть, два эквивалентных представления.

- Представление Гейзенберга:

$$\langle \hat{f} \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \mathcal{S}(t) \hat{f}, \quad (4.4)$$

$$\mathcal{S}(t) = \text{Tr}_R \hat{\rho}_R \mathcal{S}(t). \quad (4.5)$$

Последнее выражение можно просто записать как усреднение $\langle \mathcal{S}(t) \rangle_R$ оператора временной эволюции по переменным резервуара.

- Представление Шредингера:

$$\langle \hat{f} \rangle = \text{Tr} \hat{f} (\mathcal{S}^+(t) \hat{\rho}), \quad (4.6)$$

$$\mathcal{S}^+(t) = \text{Tr}_R \mathcal{S}^{-1}(t) (\odot \otimes \hat{\rho}_R). \quad (4.7)$$

С учетом этих соотношений, правила обращения супероператора временной эволюции замкнутой системы и векторных обозначений усреднение может быть представлено в одной из эквивалентных форм:

$$\langle \hat{f} \rangle = \langle \hat{\rho} | \mathcal{S}(t) \hat{f} \rangle = \langle \hat{f}^+ | \mathcal{S}^+(t) \hat{\rho} \rangle. \quad (4.8)$$

Последнее выражение может быть записано также в эквивалентной форме $\langle \mathcal{S}^+(t) \hat{\rho} | \hat{f} \rangle$. Супероператоры $\mathcal{S}(t)$, $\mathcal{S}^+(t)$ задают сокращенное описание временной эволюции в ОС в представлении Гейзенберга и Шредингера, соответственно. Они называются *переходными* супероператорами ОС и описывают переход из начального состояния совокупной системы (4.2), в котором ОС и резервуар статистически независимы, в состояние в момент времени t . Если матрицы плотности представляются в том же эрмитовом базисе \hat{e}_k , что и физические величины \hat{f} , то с учетом того, что последнее выражение в (4.8) может быть представлено в виде $\langle \hat{f} | \mathcal{S}^+(t) \hat{\rho} \rangle$, убеждаемся, что супероператорам $\mathcal{S}(t)$, $\mathcal{S}^+(t)$ соответствуют эрмитово сопряженные матрицы.

Соответствующий этим супероператорам переход в ОС является *марковским*, поскольку для него состояние ОС выражается с помощью преобразования

$$\hat{\rho}(t) = \mathcal{S}^+(t) \hat{\rho} \quad (4.9)$$

только через начальное состояние $\hat{\rho}$ при $t = 0$ независимо от предшествующей динамики. Марковский процесс, очевидно, соответствует совокупности марковских переходов. Свойство марковости связано со статистической независимостью в момент начала рассматриваемого перехода между состояниями ОС и резервуара, что описывается расцеплением совокупной матрицы плотности (4.2) на произведение соответствующих парциальных матриц. Не следует, однако, отождествлять марковость просто с возможностью представления с помощью соотношения (4.9) состояния в момент времени t через матрицу плотности при $t = 0$. Это возможно для любого перехода, однако в общем случае

соответствующий супероператор $\mathcal{S}^+(t)$ будет зависеть от $\hat{\rho}$. Только для марковского перехода этот супероператор один для всех начальных состояний.

Важно отметить, что переходные супероператоры $\mathcal{S}, \mathcal{S}^+$ задают одно и то же преобразование в *редуцированном* квантовом вероятностном пространстве ОС

$$(H_0, \mathcal{B}_0, \mathcal{P}_0),$$

где \mathcal{P}_0 соответствует матрице плотности $\hat{\rho}$. Опишем самые общие свойства этого преобразования, которые вытекают непосредственно из определений (4.5), (4.7).

- *Сохранение нормировки*: преобразование не изменяет единичного оператора и нормировку матрицы плотности.

Это свойство очевидно из определений переходных супероператоров. В представлении Гейзенберга из определения (4.5) с учетом того, при $\hat{f} = \hat{I}$ имеем $\mathcal{S}(\hat{f} \otimes \hat{I}) = \hat{I} \otimes \hat{I}$ (т. е. единичный оператор в составном пространстве H), получаем условие сохранения единичного оператора ОС: $\mathcal{S}\hat{I} = \hat{I}$. Супероператор \mathcal{S}^+ сохраняет след преобразуемой матрицы плотности в силу того, что после взятия полного следа в выражении (4.7) преобразование временной эволюции может быть опущено. Супероператор \mathcal{S} в базисе вида $\hat{I}, \{\hat{\varepsilon}_k\}$ представляется матрицей, имеющей в первом столбце только один ненулевой матричный элемент, равный единице, а \mathcal{S}^+ — матрицей, имеющей только один ненулевой матричный элемент, также равный единице, в первой строке:

$$S = \begin{pmatrix} 1 & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad S^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Эти соотношения показывают, что, хотя в ОС супероператоры, описывающие преобразование временной эволюции в представлении Гейзенберга и Шредингера связаны, как и в замкнутых системах, преобразованием эрмитова сопряжения, простая симметрия в их свойствах, выраженных в абстрактном виде, отсутствует. Это связано с разным качественным смыслом операторов физических величин и матриц плотности. Если физическая величина имеет вид единичного оператора, то она заведомо должна быть неизменной, в то время как если единичному оператору пропорциональна матрица плотности (пример — матрица плотности теплового равновесия при бесконечной температуре), то она не обязана сохраняться (в неравновесных условиях).

- *Положительность*: конус положительных операторов \hat{f} (или $\hat{\rho}$) отображается на себя.

Поясним, что положительным называется оператор с неотрицательно определенной (то-есть неотрицательной при любых ψ) квадратичной формой $\psi^+ \hat{f} \psi$, а под конусом понимается такое множество \mathcal{M} с элементами x , что для любого $\lambda > 0$ также и $\lambda x \in \mathcal{M}$. Совокупность положительных операторов при их векторном представлении, описанном в Главы 2, образует выпуклый конус. Выпуклость следует из ее определения в форме справедливости рассматриваемого свойства для любого элемента вида $\lambda \hat{f} + (1 - \lambda) \hat{g}$ при $0 \leq \lambda \leq 1$ при справедливости для элементов \hat{f}, \hat{g} . Действительно, для положительных операторов это сразу следует из

критерия положительности. При представлении операторов векторами в ортогональном эрмитовом операторном базисе $\hat{I}, \{\hat{\varepsilon}_k\}$ базисные операторы $\hat{\varepsilon}_k$ неположительны в силу ортогональности к единичному оператору базиса, и с учетом этого для положительности эрмитова оператора \hat{f} требуется, чтобы представляющие его коэффициенты f_0, f_k были таковы, чтобы при фиксированном f_0 набор f_k лежал внутри некоторого выпуклого множества \mathcal{M} , на гиперплоскости $f_0 = \text{const}$. (Нетрудно выполнить и обобщение на неэрмитовы операторы \hat{f}). Совокупность этих множеств векторов для всех f_0 и есть конус, изображенный на рис. 4.1, который в случае двухуровневой системы и базиса матриц Паули является круговым. Для нормированных матриц плотности в соответствующем образом нормированном базисе $f_0 \rightarrow w_0 = 1$, что соответствует основанию конуса с единичной высотой.

- *Вполне положительность*: положительность сохраняется, если расширить действие преобразования на любой набор квадратных $n \times n$ -матриц (n — любое), составленный из $n \times n$ произвольных преобразуемых операторов, к которым преобразование применяется независимо.

Другими словами, положительным является также любое преобразование вида

$$\begin{pmatrix} \hat{f}_{11} & \hat{f}_{12} & \dots \\ \hat{f}_{21} & \hat{f}_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} \mathcal{S}\hat{f}_{11} & \mathcal{S}\hat{f}_{12} & \dots \\ \mathcal{S}\hat{f}_{21} & \mathcal{S}\hat{f}_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Физический смысл этого свойства очень прост. Оно означает, что если в физической ОС есть какие-то переменные, которые никак не отражаются на ее динамике, то ее изменения описываются положительными супероператорами не только без учета этих переменных, но и при их учете. Это свойство следует очевидным образом из определения переходных супероператоров. Интересно, что оно не эквивалентно просто положительности. Пример положительного, но не вполне положительного супероператора дает важное в теории матриц преобразование транспонирования, обозначаемое символом “Т”. Оно очевидно положительно, когда применяется ко всей матрице: $\hat{f} \rightarrow \hat{f}^T$. Однако, при применении к расширенной системе в соответствии с правилом (4.10) блочного применения преобразования $\mathcal{S} = T$ его положительность утрачивается. Это легко видеть на примере блочного транспонирования положительной блочной матрицы, составленной из 2×2 -матриц и переходящей после этого преобразования в неположительную матрицу:

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathcal{S}} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^T & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^T \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^T & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

(Исходная блочная 4×4 -матрица имеет вид прямой суммы нулевой 2×2 -матрицы из внутренних матричных элементов и внешней 2×2 -матрицы, составленной из единиц; последняя 4×4 -матрица имеет вид прямой суммы единичной 2×2 -матрицы из внешних угловых элементов и 2×2 -матрицы Паули $\hat{\sigma}_1$ из внутренних элементов). Поэтому, несмот-

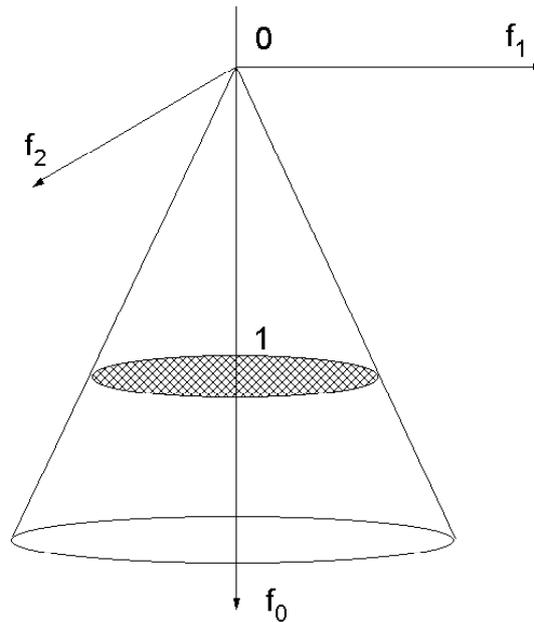


Рис. 4.1: Конус положительных операторов в векторном представлении для трехмерного базиса. Основанию усеченного конуса $f_0 = 1$ соответствуют матрицы плотности, удовлетворяющие условию нормировки.

ря на положительность и сохранение нормировки, преобразование транспонирования “Т” матриц 2×2 не может описывать никакой двухуровневой открытой системы.

Существует математическая теорема [28], которую можно интерпретировать как доказательство существования ОС, соответствующей любому супероператору перехода, который удовлетворяет перечисленным свойствам. Математический результат этой теоремы состоит в возможности нахождения по заданному переходному супероператору такой соответствующей ему расширенной системы, в которой ему соответствует переход, описываемый унитарным преобразованием. Общий вид матрицы преобразования для n -уровневого атома с учетом критерия вполне положительности был получен Коссаковским [29].

Пример: Приложение критерия положительности к релаксации двухуровневого атома. Простейший пример применения критерия положительности дает ДС, описывающая дипольно-активный электронный переход в атоме (ДА) в оптическом диапазоне частот. Специфичность оптического диапазона состоит в том, что базисные физические переменные ДА разделяются на два класса: диагональные (другими словами, населенности уровней), которые соответствуют состояниям с определенной энергией и в отсутствие релаксации неизменны, и недиагональные (поляризации атомного перехода), которые соответствуют переходам вверх или вниз. Последние осциллируют с боровской частотой перехода ω_{12} , такой, что $\hbar\omega_{12} \gg kT$, и, в отличие от спиновых ДС радиодиапазона, температурные флуктуации не перемешивают населенности и поляризации. Релаксационные свойства ДА описываются двумя скоростями релаксации, продольной γ и поперечной Γ , или соответствующими релаксационными временами $T_1 = 1/\gamma$, $T_2 = 1/\Gamma$. Эти величины могут либо рассчитываться теоретически, либо вводиться как феноменологические константы. В последнем случае особо важно знать предельные ограничения, вытекающие из общих физических соотношений.

Рассмотрим положительную матрицу плотности вида

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

и результат ее преобразования $S(t)\hat{\rho}_0$, где $S(t)$ описывает релаксацию в отсутствие поля, заданную указанными параметрами γ , Γ . Матрица $\hat{\rho}_0$ описывает чистое (когерентное) состояние с симметричным возбуждением уровней. Оно выбрано потому, что имеет максимально возможное значение недиагонального элемента $\rho_{12} \leq (\rho_{11}\rho_{22})^{1/2}$. Результат преобразования матрицы плотности очевиден без вычислений: он описывается выражением

$$S(t)\hat{\rho}_0 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-\gamma t} & e^{-\Gamma t} \\ e^{-\Gamma t} & 2 - e^{-\gamma t} \end{pmatrix},$$

поскольку населенность возбужденного состояния, описываемая верхним диагональным элементом, распадается со скоростью γ и его населенность переходит на нижний уровень, а поляризация, описываемая недиагональными элементами, распадается со скоростью Γ . Применение условия положительности дает при этом $\exp(-2\Gamma t) \leq \exp(-\gamma t) [2 - \exp(-\gamma t)]$, или, иначе, $(\gamma - 2\Gamma)t \leq \ln [2 - \exp(-\gamma t)]$. Отсюда в пределе $t \rightarrow \infty$ получаем необходимое условие

$$\Gamma \geq \gamma/2, \quad (4.11)$$

которое достаточно и в общем случае при конечных t , что очевидно при замене Γ на его минимально возможное значение $\gamma/2$. Таким образом, скорость поперечной релаксации не может быть меньше половины продольной. Это соотношение имеет простой классический аналог в виде соотношения между скоростью затухания комплексной амплитуды классического гармонического осциллятора и его энергии: если нет дефазирующих возмущений и имеет место только затухание по амплитуде, то затухание по энергии в два раза превосходит затухание по амплитуде, так как энергия пропорциональна квадрату амплитуды. Эти кинематические соотношения в общем виде сохраняются и в квантовом случае.

4.3 Представление взаимодействия

В общем случае рассматриваемые ОС описываются полным гамильтонианом составной системы, имеющим вид суммы

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_R + \hat{\mathcal{H}}_\xi, \quad (4.12)$$

где первый член описывает собственную энергию ОС, второй — собственную энергию резервуара и последний — их взаимодействие, в нетривиальных случаях проявляющееся как источник шумовых флуктуаций и необратимости в ОС. Индекс ξ при этом имеет смысл тех переменных резервуара, которые имеют смысл обобщенных случайных сил, действующих на сопряженные им обобщенные координаты ОС. Роль невозмущенного гамильтониана в теории открытых систем играет сумма собственных энергий, включая в нужных случаях взаимодействие с внешним полем, а возмущения — гамильтониан взаимодействия с резервуаром. При этом оператор невозмущенной эволюции распадается

на произведение соответствующих операторов, описывающих невозмущенную эволюцию ОС и резервуара, и полный оператор временной эволюции имеет вид

$$U(t) = U_0(t)U_R(t)U_\xi(t), \quad (4.13)$$

где

$$U_0(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t \right\}, \quad U_R(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_R t \right\}, \quad (4.14)$$

а оператор $U_\xi(t)$, описывающий взаимодействие ОС и резервуара, имеет вид:

$$U_\xi(t) = T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{\mathcal{H}}_\xi(\tau) d\tau \right\}. \quad (4.15)$$

Здесь оператор $\hat{\mathcal{H}}_\xi(\tau)$ зависит от времени в соответствии с общей формулой (1.17) Главы 1:

$$\hat{\mathcal{H}}_\xi(\tau) = U_R^{-1}(\tau)U_0^{-1}(\tau)\hat{\mathcal{H}}_\xi U_0(\tau)U_R(\tau), \quad (4.16)$$

т. е. в представляющем его операторном выражении переменные ОС и резервуара изменяются по законам невозмущенного движения.

В супероператорном представлении временной эволюции в составной системе имеются две основные возможности распорядиться составляющими преобразования

$$\mathcal{S}(t) = U(t) \odot U^{-1}(t) = \mathcal{S}^0(t)\mathcal{S}_\xi(t), \quad (4.17)$$

где

$$\mathcal{S}^0(t) = U_0(t)U_R(t) \odot U_R^{-1}(t)U_0^{-1}(t), \quad \mathcal{S}_\xi(t) = U_\xi(t) \odot U_\xi(t), \quad (4.18)$$

а $\mathcal{S}^0(t)$ описывает невозмущенную динамику составной системы. (а) Исходить непосредственно из приведенного выражения (4.17) для $\mathcal{S}(t)$ и применять, в соответствии с общепринятым в квантовой механике стандартом, супероператор возмущенной динамики $\mathcal{S}_\xi(t)$ к матрицам плотности, а супероператор невозмущенной эволюции $\mathcal{S}^0(t)$ — к операторам физических величин ОС. (б) Исходить из обратного к (4.17) временного преобразования, описывающего изменение операторов физических переменных и применять все составляющие этого преобразования только к физическим переменным. В первом подходе наиболее нетривиальная составляющая динамики, описывающая взаимодействие, применяется к матрице плотности, а невозмущенное движение — к операторам физических переменных. Во втором подходе, наоборот, взаимодействие применяется к операторам физических переменных, которые уже предварительно преобразованы с помощью преобразования невозмущенной эволюции. Таким образом, в теории ОС появляются два варианта использования составных преобразований представления взаимодействия: в форме Шредингера — первый подход, и в форме Гейзенберга — второй подход.

После перехода к сокращенному описанию с помощью теории, описанной в п. 4.2, эволюционные супероператоры в представлении взаимодействия в форме Шредингера и Гейзенберга описываются, соответственно, следующими выражениями.

- Супероператор невозмущенной эволюции — общим выражением

$$\mathcal{S}_0(t) = U_0^{-1}(t) \odot U_0(t). \quad (4.19)$$

- Супероператоры возмущенной эволюции — выражениями вида:

$$\mathcal{S}^+(t) = \text{Tr}_R U_\xi(t) (\hat{I} \odot \hat{\rho}_R) U_\xi^{-1}(t), \quad \mathcal{S}(t) = \text{Tr}_R \hat{\rho}_R U_\xi(t)^{-1} \odot U_\xi(t). \quad (4.20)$$

Эти соотношения следуют из определений (4.5), (4.7) с учетом выражений (4.17), (4.18). Соответствующие представления формул усреднения имеют следующий вид.

- В форме Шредингера:

$$\langle \hat{f} \rangle = \langle \mathcal{S}_0(t) \hat{f} | \mathcal{S}^+(t) \hat{\rho} \rangle. \quad (4.21)$$

- В форме Гейзенберга:

$$\langle \hat{f} \rangle = \langle \hat{\rho} | \mathcal{S}(t) \mathcal{S}_0(t) \hat{f} \rangle. \quad (4.22)$$

Поскольку в последнем выражении матрица плотности используется в качестве сомножителя, сопряженного к операторам физических переменных (по которому, в силу определения (2.4) Главы 2 скалярного произведения операторов, оно антилинейно по левому аргументу¹), то преобразующие ее супероператоры в выражении (4.21) появляются как сопряженные по отношению к исходным, определенными выражением (4.22) на пространстве операторов физических величин. При использовании в этих альтернативных формах динамики одного и того же эрмитова базиса \hat{e}_k эти сопряженные операторы описываются просто сопряженными матрицами.

¹Умножение левого аргумента на i соответствует умножению выражения на $-i$.

Глава 5

Марковские квантовые случайные процессы

5.1 Формальное определение квантового марковского случайного процесса

Определение и математическое описание квантового марковского случайного процесса могут быть построены безотносительно к ОС, в которых реализуются случайные процессы данного типа [26, 30]. Это связано с особой простотой временной динамики марковских ОС, которая может быть представлена в виде цепочки последовательных преобразований вида (4.9) Главы 4.

Марковским называется квантовый случайный процесс, для которого в любые два момента времени $t_1, t_2 > t_1$ одномоментные матрицы плотности связаны соотношением (4.9) Главы 4. При этом супероператор \mathcal{S}^+ должен зависеть в общем случае, как минимум, от двух временных аргументов t_1, t_2 . Повторное применение этого соотношения приводит к определению марковского процесса в терминах переходных супероператоров в форме Шредингера:

$$\mathcal{S}^+(t_3, t_1) = \mathcal{S}^+(t_3, t_2) \mathcal{S}^+(t_2, t_1), \quad (5.1)$$

или

$$\mathcal{S}(t_1, t_3) = \mathcal{S}(t_1, t_2) \mathcal{S}(t_2, t_3) \quad (5.2)$$

в форме Гейзенберга. В соответствии с различным направлением упорядочения по отношению к матрицам плотности и операторам физических величин для шредингеровских супероператоров принято такое расположение временных аргументов, что правее стоит более ранний момент времени, а для гейзенберговских — наоборот. Соотношение (5.1) в классической теории марковских процессов известно как уравнение Смолуховского или Колмогорова—Смолуховского—Чепмена [15].

Преобразуем соотношение (5.2) к дифференциальному виду, рассматривая в соотношениях (5.1), (5.2) последовательность моментов времени $t_1 = 0, t_2 = t, t_3 = t + \Delta$ при $\Delta \rightarrow 0$ и представив супероператор перехода $\mathcal{S}(t, t + \Delta)$ за малое время Δ через супероператор \mathcal{L} “скорости перехода”. Используя разложения

$$\mathcal{S}(0, t + \Delta) = \mathcal{S}(0, t) + \frac{d}{dt} \mathcal{S}(0, t) \Delta,$$

$$\mathcal{S}(t, t + \Delta) = 1 + \Delta \lim \frac{1}{\Delta} [\mathcal{S}(t, t + \Delta) - 1],$$

и вводя обозначения

$$\mathcal{L}(t) = \lim \frac{1}{\Delta} [\mathcal{S}(t, t + \Delta) - 1] \quad (5.3)$$

и $\mathcal{S}(t) = \mathcal{S}(0, t)$, представляем соотношения (5.1), (5.2) в форме следующих дифференциальных уравнений:

$$\frac{d}{dt} \mathcal{S}^+(t) = \mathcal{L}^+(t) \mathcal{S}^+(t) \quad (5.4)$$

в форме Шредингера и

$$\frac{d}{dt} \mathcal{S}(t) = \mathcal{S}(t) \mathcal{L}(t) \quad (5.5)$$

в форме Гейзенберга. Эти уравнения есть наиболее общая форма представления обобщенного уравнения Фоккера–Планка [25] и сопряженного к нему, причем сопряжение эквивалентно обращению времени. Оно описывает как непрерывные, так и скачкообразные марковские процессы. В классической теории случайных процессов соответствующие им для процессов диффузионного типа уравнения называются уравнениями Колмогорова 1-го и 2-го рода.

Таким образом, марковский квантовый случайный процесс может быть задан абстрактно с помощью *кинетического супероператора*, или *обобщенного лиувиллиана* $\mathcal{L}(t)$. В отличие от лиувиллиана замкнутых систем он порождает не унитарный супероператор временной эволюции, рассмотренный в *Главах 2, 3*, а переходной супероператор общего вида, описанный в п. 2 *Лекции 2*. Через него супероператор перехода выражается в форме хронологически упорядоченной экспоненты:

$$\mathcal{S}(t) = T \exp \left\{ \int_0^t \mathcal{L}(\tau) d\tau \right\}, \quad (5.6)$$

$$\mathcal{S}^+(t) = T \exp \left\{ \int_0^t \mathcal{L}^+(\tau) d\tau \right\}, \quad (5.7)$$

где хронологическое упорядочение в этих формулах определено по отношению к матрицам плотности (т. е. в соответствующих разложениях экспонент в (5.6) и (5.7) расположение супероператоров противоположно).

5.2 Многомоментные матрицы плотности

5.2.1 Немарковский случай

В общем случае представляющие интерес характеристики описываются функциями n переменных $\hat{A}_1(t_1), \dots, \hat{A}_n(t_n)$. Здесь $\hat{A}_k(t_k)$ обозначают в самом общем случае k -ый набор операторов, соответствующих моменту времени t_k (наиболее важным является случай одного зависящего от времени оператора $\hat{A}_k(t_k) = \hat{A}(t_k)$). Для расчета средних для таких квантовых функций формулы одномоментного усреднения (4.8) *Главы 4* должны быть обобщены на случай n моментов времени.

Для квантового случайного процесса усредняемая функция задается в дополнение к скалярной функции $F(A_1, \dots, A_n)$ классических переменных еще и *принципом* (способом) упорядочения \mathcal{O} , так что квантовая функция в общем случае записывается в форме

$\hat{f}^{(n)} = \mathcal{O}F(\hat{A}_1(t_1), \dots, \hat{A}_n(t_n))$. Здесь по сравнению с принципами упорядочения, описанными в Главы 3, где фигурирует упорядочение по отношению к каноническим операторам, не зависящим от времени, подразумевается также и произвольное упорядочение по временным индексам. Очевидно, в данном случае также достаточно задать упорядочение \mathcal{O} на базисе δ -функций:

$$\delta[A_1(t_1) - A_1, \dots, A_n(t_n) - A_n] \rightarrow \mathcal{O} \delta[\hat{A}_1(t_1) - A_1, \dots, \hat{A}_n(t_n) - A_n].$$

Соответственно, упорядоченные операторные функции описываются выражениями вида¹

$$\begin{aligned} \mathcal{O}F(\hat{A}_1(t_1), \dots, \hat{A}_n(t_n)) &= \int F(A_1, \dots, A_n) \times \\ &\times \mathcal{O} \delta[\hat{A}_1(t_1) - A_1, \dots, \hat{A}_n(t_n) - A_n] dA_1 \dots dA_n. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Усреднение квантовых n -моментных функций, представленных в форме (5.8), можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}F(\hat{A}_1(t_1), \dots, \hat{A}_n(t_n)) \rangle &= \int dA_1 \dots dA_n \times \\ &\times w^{(n)}(A_1, \dots, A_n; t_1, \dots, t_n) F(A_1, \dots, A_n), \end{aligned} \quad (5.9)$$

где

$$\begin{aligned} w^{(n)}(A_1, \dots, A_n; t_1, \dots, t_n) &= \\ &= \text{Tr} \hat{\rho} \mathcal{O} \delta[\hat{A}_1(t_1) - A_1, \dots, \hat{A}_n(t_n) - A_n] \end{aligned} \quad (5.10)$$

n -моментная плотность распределения вероятностей квантового случайного процесса $\hat{A}(t)$, соответствующая заданному принципу упорядочения. Это определение описывает процессы в самой общей форме, не используя специфический вид операторов в ОС:

$$\hat{A}(t_k) = U^{-1}(t_k)(\hat{A}_0 \otimes \hat{I})U(t_k).$$

5.2.2 Марковский случай

Для марковского квантового процесса все его характеристики могут быть выражены через его обобщенный лиувиллиан. Наиболее простую форму математический аппарат для выполнения их расчета имеет для случая хронологически упорядоченных (в смысле стандартного определения Главы 2) функций, для которых хронологическое упорядочение выполняется независимо от упорядочения одномоментных операторов: $\mathcal{O} = T\mathcal{O}_1$, где \mathcal{O}_1 обозначает принцип одномоментного упорядочения. Такого типа функции естественно возникают при выполнении расчетов по теории возмущений, когда все члены разложения оператора временной эволюции упорядочены хронологически. Такие функции могут быть представлены в следующей форме

$$\mathcal{O}F(\hat{A}_1(t_1), \dots, \hat{A}_n(t_n)) = \int F(A_1, \dots, A_n) \times$$

¹С точки зрения математической корректности удобнее исходить из представления выражения $\delta(\dots)dA_1 \dots dA_n$ в форме индикаторной функции $\chi(\hat{E}(dA_1, t_1), \dots, \hat{E}(dA_n, t_n))$ ортопроекторов $\hat{E}(dA_k, t_k)$, отвечающих операторам $\hat{A}_k(t_k)$. Используемая δ -функция есть соответствующая обобщенная плотность.

$$\begin{aligned} & \times \mathcal{O}_1 \delta [\hat{A}_1(t_1) - A_1] \cdots \mathcal{O}_1 \delta [\hat{A}_n(t_n) - A_n] dA, \\ & (dA = dA_1 \dots dA_n). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Для того, чтобы представить хронологически упорядоченную δ -функцию в (5.11) в компактном виде, удобно ввести определение *полупрямого* произведения супероператоров

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_1 \circledast \mathcal{S}_2 (\hat{f}_2 \otimes \hat{f}_1) &= \mathcal{S}_1 [\hat{f}_1 [\mathcal{S}_2 \hat{f}_2]], \\ \mathcal{S}_1 \circledast \cdots \circledast \mathcal{S}_n (\hat{f}_n \otimes \cdots \otimes \hat{f}_1) &= \\ = \mathcal{S}_1 [\hat{f}_1 \cdots \hat{f}_{n-2} [\mathcal{S}_{n-1} [\hat{f}_{n-1} [\mathcal{S}_n \hat{f}_n]]] \cdots]. \end{aligned} \quad (5.12)$$

В этих выражениях супероператоры \mathcal{S}_k применяются к произведению уже преобразованных операторов \hat{f}_j с индексами $j \geq k$, результат умножается на \hat{f}_{k-1} , к результату применяется супероператор \mathcal{S}_{k-1} , и так далее. Это определение соответствует структуре реального неусредненного эволюционного супероператора квантового случайного процесса, для которого $\mathcal{S}_k \rightarrow \mathcal{S}_k^\xi = U^{-1}(t_k, t_{k+1}) \odot U(t_k, t_{k+1})$ описывают временную эволюцию между моментами времени t_k, t_{k+1} ($k = 0, \dots, n-1$; $t_0 = 0$), причем он заведомо обладает свойством марковости (вследствие унитарности, отражающей замкнутость рассматриваемой системы):

$$\begin{aligned} & U^{-1}(t_{k-1}, t_{k+1}) \odot U(t_{k-1}, t_{k+1}) = \\ & = U^{-1}(t_{k-1}, t_k) U^{-1}(t_k, t_{k+1}) \odot U(t_k, t_{k+1}) U(t_{k-1}, t_k) = \mathcal{S}_{k-1}^\xi \mathcal{S}_k^\xi. \end{aligned}$$

Для такого семейства супероператоров соотношение (5.11) с учетом определения (5.12) и тождества $\mathcal{S}_k^\xi(\hat{f}\hat{g}) = (\mathcal{S}_k^\xi \hat{f})(\mathcal{S}_k^\xi \hat{g})$ представляется в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{O}F(\hat{A}_1(t_1), \dots, \hat{A}_n(t_n)) &= \int dA F(A_1, \dots, A_n) \mathcal{S}_1^\xi \circledast \cdots \circledast \mathcal{S}_n^\xi \times \\ & \times [\mathcal{O}_1 \delta (\hat{A}_1 - A_1) \otimes \dots \otimes \mathcal{O}_1 \delta (\hat{A}_n - A_n)]. \end{aligned} \quad (5.13)$$

При вычислении среднего значения для выражения (5.13) необходимо выполнить усреднение как по квантовым флуктуациям резервуар, представленным супероператорами \mathcal{S}_k^ξ , так и по собственным флуктуациям в ОС, отвечающим операторам \hat{A}_k и описываемых начальной матрицей плотности. Если рассматриваемый процесс является марковским, то, по определению, это усреднение выполняется в супероператорах \mathcal{S}_k^ξ независимо на всех временных интервалах (t_k, t_{k+1}) , и эти супероператоры после данного усреднения сводятся к переходным супероператорам марковского процесса. Соответственно, правая часть выражения (5.13) описывает в этом случае случайную n -моментную функцию, частично усредненную по шумовым флуктуациям $\hat{\xi}$, которые неявно учитываются в переходных супероператорах:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}F(\hat{A}_1(t_1), \dots, \hat{A}_n(t_n)) \rangle_\xi &= \int dA F(A_1, \dots, A_n) \mathcal{S}_1 \circledast \cdots \circledast \mathcal{S}_n \times \\ & \times [\mathcal{O}_1 \delta (\hat{A}_1 - A_1) \otimes \dots \otimes \mathcal{O}_1 \delta (\hat{A}_n - A_n)]. \end{aligned}$$

Интегрируя по A , представляем это выражение в компактной форме:

$$\langle \mathcal{O}F(\hat{A}_1(t_1), \dots, \hat{A}_n(t_n)) \rangle_\xi = \mathcal{S}_1 \circledast \cdots \circledast \mathcal{S}_n \mathcal{O}_1 F(\hat{A}_1 \otimes, \dots, \hat{A}_n \otimes). \quad (5.14)$$

Здесь $\hat{A}_k \otimes$ обозначает независимую копию операторов \hat{A}_k , которая переводится в соответствующий набор операторов (в частности — в один оператор) в исходном пространстве ОС в результате применения совокупности преобразований \mathcal{S}_k в соответствии с определением полупрямого произведения (5.12). Результат (5.14) дает право назвать полупрямое произведение $\mathcal{S}_1 \circledast \cdots \circledast \mathcal{S}_n$ квантовым *условным n -моментным* распределением вероятностей при фиксированном начальном состоянии процесса. Это название дано в соответствии со смыслом этого выражение в классическом пределе. Если подставить вместо всех операторов \hat{A}_k операторы вида $a_k \hat{I}$, что соответствует неслучайной n -моментной функции нефлуктуирующих переменных $F(a_1, \dots, a_n)$, то с учетом определения полупрямого произведения (5.12), представления F степенным рядом с последующим суммированием результата преобразования и с учетом инвариантности единичного оператора (см. п. 4.2) *Главы 4* из (5.14) получаем просто $F(a_1, \dots, a_n)$. Тем самым преобразование любой неоператорной функции сводится к тождеству $F \equiv F$, т. е. полупрямое произведение (5.12) в том случае тождественно равно единице, что соответствует результату интегрирования классического n -моментного условного распределения по всем n аргументам.

Если переходные супероператоры представлены в выбранном базисе матричными элементами $S_k(A_k, A'_k)$, то их полупрямое произведение также может быть представлено в матричном виде матрицей $S^{(n)}(A_0, A)$. Для этого следует в выражении (5.12) представить операторы в правой части через базисные δ -функции, супероператоры представить через их матричные элементы, а результат так же разложить по δ -функциям. В результирующее выражение войдут структурные коэффициенты базиса, определенные соотношением (2.39) *Главы 2* и коэффициенты, выражающие рассматриваемые базисные δ -функции через операторы полного базиса. Структурные коэффициенты G возникают при представлении произведения базисных операторных δ -функций через их линейную комбинацию в соответствии с определением (2.39). Очевидно, что результирующее выражение отображает тензорные произведения n операторов в независимых копиях гильбертова пространства в операторы в одном из этих гильбертовых пространств. Соответственно, описывающие это преобразования матрицы являются неквадратными и имеют вид $S^{(n)}(A_0, A)$, где A_0 служат для представления только операторов \hat{A}_0 для момента времени $t = 0$, описываемого начальной матрицей плотности $\hat{\rho}$, а A — для представления тензорных произведений всех рассматриваемых операторов и функций от них. Предполагая для простоты, что рассматриваемый базис δ -функций является полным, получаем:

$$S^{(n)}(A_0, A) = \int dA'_2 \dots dA'_n dA''_1 \dots dA''_{n-1} S_1(A_1, A''_1) \dots \\ \dots G(A'_{n-1}, A_{n-2}, A''_{n-2}) S_{n-1}(A'_{n-1}, A''_{n-1}) G(A'_n, A_{n-1}, A''_{n-1}) S_n(A'_n, A_n). \quad (5.15)$$

Структурные коэффициенты описываются здесь обобщенными матричными элементами $G(A'_{n-k}, A_{n-k-1}, A''_{n-k-1})$. Будучи примененной к функции $F(A)$, матрица (5.15) (после интегрирования по A', A'') описывает оператор этой функции, усредненный только по шумам. Это неявное усреднение для марковских процессов учитывает в абстрактном виде разделение случайного процесса на процесс, представляющий непосредственный интерес, и шумы, учитываемые только в усредненном виде. В теории ОС такое разделение вводится априори в структуре составной системы (см. п. 1 *Главы 4*).

Дополняя соотношение (5.15) усреднением по начальному состоянию и представляя F через δ -функции, получаем определение для соответствующей *безусловной n -*

моментной матрицы плотности в терминах классических переменных A_1, \dots, A_n :

$$w^{(n)}(A) = \text{Tr} \hat{\rho}_0 \mathcal{S}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{S}_n \left[\mathcal{O}_1 \delta(\hat{A}_1 - A_1) \otimes \dots \otimes \mathcal{O}_1 \delta(\hat{A}_n - A_n) \right].$$

Она представляется через матричное представление полупрямого произведения $S^{(n)}$ в виде усреднения по начальному моменту времени:

$$w^{(n)}(A) = \int dA_0 w_0(A_0) S^{(n)}(A_0, A), \quad (5.16)$$

где $w_0(A_0)$ описывает матрицу плотности $\hat{\rho}_0$ в момент времени $t = 0$, по отношению к которому определен супероператор перехода \mathcal{S}_1 . В супероператорной записи можно записать этот результат в виде:

$$\hat{\rho}^{(n)} = \langle \hat{\rho}_0 | \mathcal{S}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{S}_n. \quad (5.17)$$

Это определение *функционала усреднения* на тензорном произведении n операторов и включает осреднение по начальному распределению $\hat{\rho}_0$ при $t = 0$. Результатом этого усреднения является искомое среднее значение $\langle \hat{f}^{(n)} \rangle$ рассматриваемых функций вида

$$\mathcal{O}_1 F(\hat{A}_1 \otimes, \dots, \hat{A}_n \otimes).$$

С учетом того, что в выражении (5.17) все переходные супероператоры \mathcal{S}_n представляются в соответствии с формулой (5.6) через обобщенный лиувиллиан, любая n -моментная матрица плотности также определяется только обобщенным лиувиллианом $\mathcal{L}(t)$ и начальной матрицей плотности.

При переходе к классическому случаю в представлении полупрямого произведения (5.15) структурные коэффициенты должны быть заменены δ -функциями:

$$G(A'_k, A_{k-1}, A''_{k-1}) = \delta(A'_k - A_{k-1}) \delta(A_{k-1} - A''_{k-1}). \quad (5.18)$$

С учетом этого соотношение из выражения (5.15) для полупрямого произведения следует

$$S^{(n)}(A_0, A) = S_1(A_0, A_1) \dots S_{n-1}(A_{n-2}, A_{n-1}) S_n(A_{n-1}, A_n). \quad (5.19)$$

Оно соответствует n -моментному условному распределению при фиксированном состоянии процесса в момент времени $t = 0$ и представляется просто произведением всех переходных распределений вероятностей $S_k(A_{k-1}, A_k)$. Квантовая специфика n -моментного распределения вероятностей отражена в структурных коэффициентах $G(A'_k, A_{k-1}, A''_{k-1})$, учитывающих некоммутативный характер алгебры квантовых переменных их отличием от произведения δ -функций в соотношении (5.18).

В заключение приведем модификацию изложенных определений для случая обратного к (5.13) хронологического расположения операторов

$$\begin{aligned} \mathcal{O}F(\hat{A}_1(t_1), \dots, \hat{A}_n(t_n)) &= \int dA F(A_1, \dots, A_n) \mathcal{S}_1^\xi \otimes \dots \otimes \mathcal{S}_n^\xi \times \\ &\times \left[\mathcal{O}_1 \delta(\hat{A}_n - A_n) \otimes \dots \otimes \mathcal{O}_1 \delta(\hat{A}_1 - A_1) \right]. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Такой порядок возникает при расчете корреляционной функции $K(t_1, t_2)$ операторов $\hat{A}(t)$ при $t_2 < t_1$. В этом случае взамен n -моментной матрицы плотности (5.17) следует рассматривать модифицированное выражение

$$\hat{\rho}^{(n)} = \langle \hat{\rho}_0 | \mathcal{S}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{S}_n, \quad (5.21)$$

где символ \circlearrowright взамен \circlearrowleft определен не соотношением (5.12), а соотношением

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_1 \circlearrowright \cdots \circlearrowright \mathcal{S}_n (\hat{f}_n \otimes \cdots \otimes \hat{f}_1) &= \\ &= \mathcal{S}_1 [\dots [\mathcal{S}_{n-1} [\mathcal{S}_n \hat{f}_1] \hat{f}_2] \cdots \hat{f}_n]. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Здесь усреднение по флуктуациям в более поздний момент времени выполняется для операторов, расположенных левее, а не правее.

Глава 6

Марковские открытые системы

6.1 Физические условия марковости

При рассмотрении конкретных физических моделей ОС в первую очередь представляет интерес выяснить, выполнено ли для них соотношение марковости в виде (5.1) или (5.2) Главы 5. Для выяснения соответствующих условий запишем определение (4.20) Лекции 4 для переходного супероператора для момента $t + \Delta$:

$$\mathcal{S}(t + \Delta) = \left\langle \left[U_{\xi}(t)^{-1} \odot U_{\xi}(t) \right] \left[U_{\xi}(t, t + \Delta)^{-1} \odot U_{\xi}(t, t + \Delta) \right] \right\rangle_{\mathbb{R}}, \quad (6.1)$$

где символ $\langle \rangle_{\mathbb{R}}$ обозначает операцию усреднения стохастического (т. е. зависящего от переменных резервуара и потому флуктуирующего во времени) супероператора $\mathcal{S}_{\xi} = U_{\xi}^{-1}(t + \Delta) \odot U_{\xi}(t + \Delta)$ по состоянию резервуара:

$$\langle \mathcal{S}_{\xi} \rangle_{\mathbb{R}} = \text{Tr}_{\mathbb{R}} \hat{\rho}_{\mathbb{R}} \mathcal{S}_{\xi}.$$

В представлении (6.1) неусредненный супероператор перехода расцеплен на произведение супероператора перехода от начального момента $t = 0$ к моменту t и супероператора перехода от момента t к $t + \Delta$. Марковость процесса зависит от возможности независимого выполнения усреднения сомножителей, которые согласно выражению (4.15) Главы 4 определяются свойствами временной зависимости флуктуирующего гамильтониана взаимодействия (15) (4.16) $\hat{\mathcal{H}}_{\xi}(\tau)$. Этот гамильтониан зависит от переменных резервуара только через некоторый набор шумов резервуара $\hat{\xi}(t) = \{ \hat{\xi}_1(t), \hat{\xi}_2(t), \dots \}$, которые в соответствии с соотношением (15) (4.16) изменяются по закону

$$\hat{\xi}(t) = U_{\mathbb{R}}^{-1}(t) \hat{\xi}_0 U_{\mathbb{R}}(t), \quad (6.2)$$

где $\hat{\xi}_0$ соответствуют начальным значениям шумовых операторов. Для того, чтобы этот процесс был действительно “случайным”, типичный резервуар должен представлять системы с бесконечным числом степеней свободы¹.

Строгое расцепление усреднения в соотношении (6.1) может иметь место только для абстрактной математической модели флуктуаций гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_{\xi}(\tau)$, когда они описываются как *чисто случайный* процесс [15], усреднение по флуктуациям которого вы-

¹Другая возможность состоит в том, что в ОС реализуются условия возникновения динамической стохастичности (общие сведения и литературные ссылки по проблеме динамического хаоса можно получить из книги [32]).

полняется независимо для любой совокупности моментов времени t_1, \dots, t_n . Это выполняется для таких базовых моделей шума $\hat{\xi}(t)$, которые являются квантовыми обобщениями классического *белого шума* и *импульсного процесса*². Справедлива ли такая модель флуктуаций для рассматриваемой конкретной физической системы, можно выяснить только в результате соответствующего анализа случайного процесса $\hat{\mathcal{H}}_\xi(\tau)$. В общем виде критерий марковости сводится к возможности пренебрежения статистической зависимостью на временах больших или порядка характерного времени изменений в ОС. Его можно выразить в виде количественного соотношения с использованием физических терминов *время корреляции*³ τ_c и *время релаксации* τ_r в некотором более общем смысле, выходящем за рамки их обычных определений для одномерного (скалярного) процесса. Время корреляции характеризует временной интервал, на котором существенна статистическая зависимость, отсутствующая для моментов времени, отличающихся на существенно большую величину. Время релаксации характеризует временной интервал, на котором в ОС становятся существенными изменения, обусловленные взаимодействием с резервуаром. Последнее справедливо, лишь если возможные быстрые изменения, обусловленные собственной динамикой ОС, происходят в масштабе более коротких времен по сравнению с процессами релаксации и, соответственно, в используемом динамическом описании ОС они могут быть исключены (например, путем перехода к соответствующему представлению взаимодействия). Как будет видно из последующих лекций, в общем случае не существует ни единого времени корреляции, ни единого времени релаксации, и обычно ОС описывается целым набором этих времен, который во многих важных случаях является к тому же бесконечным (и даже может содержать как неограниченно малые, так и бесконечные величины). Тем не менее, процедура отбора из этого спектра времен тех, которые существенны для оценки возможности использования марковской модели, вполне очевидна: должно быть взято максимальное существенно время корреляции и сопоставлено с минимальным существенным временем релаксации. Эти соображения можно теперь записать в виде простого количественного соотношения

$$\tau_c \ll \tau_r, \quad (6.3)$$

которое является *критерием марковости* ОС. Здесь очевидна относительность понятия марковости случайных процессов в заданной ОС, поскольку оно зависит от того, какой класс ее физических величин представляет интерес в конкретной задаче.

Более конкретно фигурирующие в соотношении (6.3) времена можно пояснить следующим образом. Пусть гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_\xi(t)$ зависит от единственной переменной резервуара — случайного процесса $\hat{\xi}(t)$. Для него τ_c есть характерное время убывания корреляционной функции

$$\mathcal{K}_\xi(\tau) = \text{Tr} \hat{\rho}_R \hat{\xi}(t) \hat{\xi}(t + \tau) \quad (6.4)$$

(которая в общем случае комплексна вследствие некоммутативности операторов $\hat{\xi}(t)$, $\hat{\xi}(t + \tau)$, поскольку $[\hat{\xi}(t) \hat{\xi}(t + \tau)]^+ = \hat{\xi}(t + \tau) \hat{\xi}(t) \neq \hat{\xi}(t) \hat{\xi}(t + \tau)$). На спектральном языке время корреляции выражается соотношением $\tau_c = \delta\omega^{-1}$ через ширину $\delta\omega$ спектральной плот-

²(поток δ -импульсов, приводящий при воздействии на ОС к последовательности независимых скачков состояния)

³Точнее было бы говорить о *времени памяти*, поскольку корреляция, строго говоря, характеризует лишь степень линейной зависимости, в то время как для марковости нужна полная статистическая независимость.

ности

$$S(i\omega) = \int_0^\infty K_\xi(\tau) \exp(i\omega\tau) d\tau \quad (6.5)$$

случайного процесса $\hat{\xi}(t)$. Время релаксации определяется как характерное время изменения среднего значения некоторой переменной ОС для неравновесного начального состояния — *отклика* $\langle \hat{f}(t) \rangle$, и выражается по формуле $\tau_r = \gamma^{-1}$ через характерную *скорость релаксации* процесса $\hat{f}(t)$, описываемую на спектральном языке как ширина спектра отклика. На спектральном языке условие марковости записывается в виде соотношения

$$\gamma \ll \delta\omega. \quad (6.6)$$

Эти соотношения проиллюстрированы на рис. 6.1, где изображены спектр флуктуаций радиационного шума $\hat{\xi}_0(t) = \int \mathbf{d}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{E}}_0(\mathbf{r}) dV$ и типичный спектр атомного отклика. Шум $\hat{\xi}(t)$ с конечным, но малым временем корреляции, называется *физическим белым шумом*. В противовес ему абстрактный белый шум с нулевым временем корреляции называется *математическим*. Следует иметь в виду, что приведенные соображения являются не изложением каких-либо строгих математических результатов теории ОС, а лишь общим руководством к выполнению конкретных расчетов.

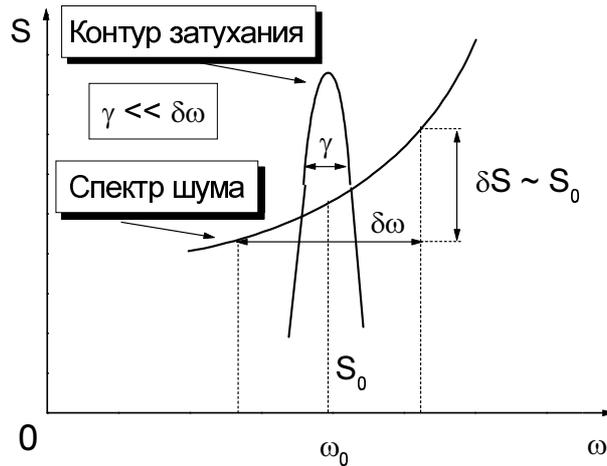


Рис. 6.1: Условие марковости динамики. Динамика является марковской, когда скорость затухания γ существенно меньше эффективной ширины $\delta\omega$ спектра $S(i\omega)$ флуктуаций обобщенной силы ξ .

Следует особо отметить в приведенной схеме роль представления взаимодействия. Для переменных резервуара оно переносит статистическую неопределенность, содержащуюся в квантовом состоянии начального набора его канонических переменных \hat{X}_R и описываемую не зависящей от времени матрицей плотности резервуара $\hat{\rho}_R$, на шум, который в представлении взаимодействия зависит от времени $\hat{\xi}(t)$, причем статистическая неопределенность проявляется в потере корреляции на интервалах времени $\Delta > \tau_c$. Для переменных ОС выделение невозмущенной динамики, описываемой супероператором (4.19) Главы 4, позволяет в случае больших времен релаксации τ_R по сравнению с характерным масштабом времен невозмущенного движения ОС рассматривать взаимодействие с шумами резервуара как медленный процесс на фоне быстрого невозмущенного движения. Это позволяет расширить область применимости марковского опи-

сания за счет того, что в условии марковости (6.3) фигурирует время релаксации τ_R , в то время как без использования представления взаимодействия вместо τ_R фигурировало бы характерное время невозмущенной динамики, которое, по предположению, значительно меньше. Этот факт указывает на зависимость понятия марковости также от способа представления временной динамики и неадекватность прямолинейной попытке его введения через статистическую независимость шума на характерных временах эволюции, безотносительно к классу физических переменных, представляющих интерес. Например, если в ОС имеются очень быстрые динамические осцилляции, на фоне которых описываются лишь относительно медленные изменения, то применение требования малости τ_c по отношению к периоду этих осцилляций τ_0 в качестве условия марковости не оправдано, поскольку эти осцилляции естественным образом исключаются в представлении взаимодействия. В теории преобразования релаксационных процессов в двухуровневом атоме сильным полем, впервые обсуждавшейся в применении к оптике в [35], неучет этого обстоятельства привел к тому, что в подавляющем большинстве работ эффекты такого рода стали связываться с немарковостью динамики атома в сильном поле, в то время как при описании в подходящем представлении взаимодействия они принципиально являются марковскими [36], также как и в свободном атоме.

6.2 Процессы диффузионного и скачкообразного типа

Рассматривая представление переходного супероператора в форме (6.1) в предположении марковости процесса и с учетом определения (5.3) Главы 5 обобщенного лиувиллиана получаем его представление через стохастический оператор временной эволюции в виде

$$\mathcal{L} = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \langle U_{\xi}^{-1}(t, t + \Delta) \odot \mathcal{U}_{\xi}(t, t + \Delta) - 1 \rangle_{\mathbb{R}}. \quad (6.7)$$

В отличие от абстрактной математической модели марковского процесса, обсуждавшейся в Главы 5, в данном выражении при рассмотрении в качестве $\hat{\xi}(t)$ реального физического шума в ОС прямое вычисление предельного перехода $\Delta \rightarrow 0$ не оправдано, поскольку реальное значение времени корреляции шума не равно нулю, и при достаточно малых Δ процесс не может рассматриваться как марковский. Этот предел можно рассматривать лишь при одновременном устремлении к нулю времени корреляции для математической модели шума, заменяющего эквивалентным образом реальный процесс $\hat{\xi}(t)$. Такая замена обоснована, если реальное время корреляции является малым параметром (по отношению ко времени релаксации). В реальных вычислениях данный предельный переход осуществляется путем соответствующего огрубления соотношений при алгебраических преобразованиях в выражении (6.7) с точностью до членов, исчезающих при $\tau_c \rightarrow 0$. В соответствии с характером зависимости гамильтониана взаимодействия с резервуаром $\hat{\mathcal{H}}_{\xi}(\tau)$ от τ , $t \leq \tau \leq t + \Delta$, который согласно выражениям (4.20), (4.15), (4.16) Главы 4 определяет и свойства переходного супероператора \mathcal{S} , можно выделить два наиболее важных класса квантовых марковских процессов: процессы *диффузионного* и *скачкообразного* типа.

Для процессов диффузионного типа интеграл в показателе экспоненты в эволюционном операторе

$$U_{\xi}(t, t + \Delta) = \mathbb{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[\int_t^{t+\Delta} \hat{\mathcal{H}}_{\xi}(\tau) d\tau \right] \right\} \quad (6.8)$$

может превосходить по абсолютной величине сколь угодно малую (при замене реального шума соответствующей математической моделью квантового белого шума) наперед заданную величину $\varepsilon > 0$ лишь с вероятностью, стремящейся к нулю быстрее, чем $\Delta \rightarrow 0$. Соответствующее изменение состояния ОС, тем самым, является непрерывным по вероятности, что и оправдывает применение термина “диффузионный”, под которым в классической теории понимается непрерывное случайное изменение координаты частицы. В квантовом случае имеется в виду аналогичное изменение квантового состояния, описываемого матрицей плотности $\hat{\rho}$ или соответствующей ей волновой функцией ψ , если исходное состояние является чистым. В квантовом случае вообще может не существовать непрерывно изменяющейся координаты, как, например, в случае двухуровневого атома, для которого аналогом координаты классического диффузионного процесса является непрерывно изменяющаяся волновая функция. Изложенное определение квантового процесса диффузионного типа является переформулировкой в терминах гамильтониана взаимодействия первого условия [12]

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \int_{|y-x|>\varepsilon} P(t, x, t + \Delta, dy) = 0, \quad \varepsilon > 0$$

теоремы Колмогорова, дающей доказательство справедливости уравнения Фоккера-Планка для классического диффузионного марковского процесса. Здесь $P(t, x, t + \Delta, dy)$ — вероятность перехода процесса из состояния, соответствующего в момент времени t значению координаты x , в состояние, соответствующее в момент времени $t + \Delta$ области ее значений $x \in dy$.

Для процесса диффузионного типа экспоненциал в (6.8) описывается двумя старшими членами разложения по показателю, с учетом чего для лиувиллиана (6.7), сохраняя только квадратичные по гамильтониану взаимодействия члены, получаем

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_r,$$

где первое слагаемое описывает обусловленную взаимодействием с резервуаром добавку к лиувиллиану невозмущенного движения ОС

$$\mathcal{L}_1 = \frac{i}{\hbar} \left[\langle \hat{\mathcal{H}}_\xi(t) \rangle_{\mathbb{R}}, \odot \right],$$

а второе слагаемое описывает так называемый *релаксационный* супероператор

$$\mathcal{L}_r = - \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\hbar^2 \Delta} \int_t^{t+\Delta} d\tau_2 \int_t^{\tau_2} d\tau_1 \left\langle \left[\hat{\mathcal{H}}_\xi(\tau_1), \left[\hat{\mathcal{H}}_\xi(\tau_2), \odot \right] \right] \right\rangle_{\mathbb{R}}. \quad (6.9)$$

Супероператор \mathcal{L}_1 , имеющий вид квантовой скобки Пуассона, описывает тот же тип обратимого движения, который характерен для замкнутых систем, то есть соответствует движению с эффективным гамильтонианом $\langle \hat{\mathcal{H}}_\xi(t) \rangle_{\mathbb{R}}$ и приводит к унитарному преобразованию начального состояния. Супероператор же \mathcal{L}_r , выражающийся через усредненный второй коммутатор стохастического гамильтониана взаимодействия, обладает качественно новыми свойствами вследствие того, что для него, в отличие от \mathcal{L}_1 , не существует эквивалентного гамильтониана, через который он мог бы быть представлен как квантовая скобка Пуассона, т. е. как лиувиллиан гамильтоновой системы. Поскольку, в отличие от \mathcal{L}_1 , $\mathcal{L}_r \neq -\mathcal{L}_r^+$, соответствующее ему преобразование состояния неунитарно и

в общем случае включает необратимые изменения, которые называются процессами релаксации — в широком понимании этого термина, включающем процессы необратимого нарастания (инкремент).

В случае процессов скачкообразного типа интеграл $\int \hat{\mathcal{H}}_\xi(\tau) d\tau$ изменяется скачкообразно, т. е. вероятность того, что в интервале времени Δ он изменится на конечную величину, пропорциональна Δ . Это означает, что изменение самого гамильтониана имеет характер δ -образных статистически независимых выбросов. В типичных физических случаях эти выбросы разделены во времени, и соответствующий квантовый процесс можно определить более точно соответствующим классическим термином как *ступенчатый* [12]. В последнем случае учесть характер шума можно с помощью представления через импульсные функции времени $\hat{\mathcal{H}}_{\xi,k}(t - t_k)$ в виде

$$\hat{\mathcal{H}}_\xi(t) = \sum_k \hat{\mathcal{H}}_{\xi,k}(t - t_k), \quad (6.10)$$

где t_k — случайные моменты времени возникновения выбросов — пуассоновский поток с плотностью вероятности выброса β , $\hat{\mathcal{H}}_{\xi,k}$ — гамильтониан взаимодействия, описывающий соответствующий выброс. Неперекрываемость гарантируется, лишь если длительность импульсов характеризуется величиной τ_c , для которой вероятность появления импульса мала: $\beta\tau_c \ll 1$. Длительность импульса имеет смысл введенного в п. 6.1 абстрактного времени корреляции, в то время как время релаксации есть в данном случае $\tau_r = 1/\beta$. При этом для марковского процесса выбросы статистически независимы, т. е. их совместное квантовое распределение при заданном наборе времен появления импульсов $\dots, d\tau_{k-1}, d\tau_k, d\tau_{k+1}, \dots$ описывается матрицей плотности вида

$$\hat{\rho}_\xi = \dots \otimes \hat{\rho}_{\xi,k-1} \otimes \hat{\rho}_{\xi,k} \otimes \hat{\rho}_{\xi,k+1} \otimes \dots \quad (6.11)$$

При этом усреднение по состоянию резервуара $\hat{\rho}_R$ включает два типа усреднения: по распределению вероятностей времен появления импульсов $\mathcal{P}(\dots d\tau_{k-1}, d\tau_k, d\tau_{k+1}, \dots)$ и по квантовому распределению (6.11). Последнее имеет смысл *условного* квантового распределения вероятностей, в то время как $\hat{\rho}_R$ фактически задано в виде

$$\hat{\rho}_R = \mathcal{P}(\dots d\tau_{k-1}, d\tau_k, d\tau_{k+1}, \dots) \hat{\rho}_\xi,$$

т. е. в данной модели содержит наравне с квантовыми и переменные, описываемые классически. Структура такого импульсного процесса проиллюстрирована на рис. 6.2. Отметим, что для ступенчатого характера марковского процесса важен не только сам факт представимости шума в виде разделенных импульсов, но и существенны соответствующие количественные соотношения между его параметрами: амплитуды должны быть достаточными, чтобы результат воздействия одиночного импульса описывался как конечное изменение состояния. В противоположном случае такой шум является просто другой эквивалентной моделью белого шума.

Выполним усреднение по матрице плотности (6.11) в соответствующем гамильтониану взаимодействия (6.10) представлении выражения (6.7) при $\Delta \ll \tau_r$. С учетом того, что вероятность появления импульса за время Δ равна $\beta\Delta$ и в отсутствие импульса переходной супероператор равен единичному супероператору с вероятностью $1 - \beta\Delta$, получаем релаксационный супероператор ступенчатого квантового процесса:

$$\mathcal{L}_r = \beta \left[\text{Tr}_{\xi,k} \hat{\rho}_k \Gamma \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} [\mathcal{H}_{\xi,k}(\tau) \odot] d\tau \right) - 1 \right]. \quad (6.12)$$

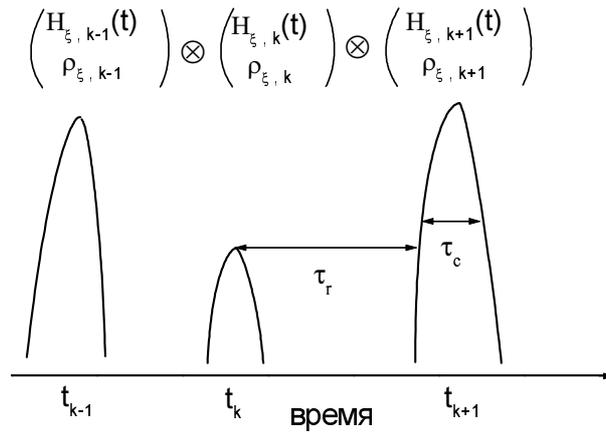


Рис. 6.2: Импульсный характер гамильтониана взаимодействия, порождающего в ОС ступенчатый марковский процесс.

Здесь интегрирование по времени распространено на бесконечные пределы, поскольку $\mathcal{H}_{\xi, k}(\tau)$ описывает ограниченный во времени импульс длительностью τ_c . След вычисляется по шумовым переменным, описываемым соответствующей матрицей плотности $\hat{\rho}_k$. Нетрудно видеть, что после разложения в этом выражении экспоненциала по показателю экспоненты с точностью до членов второго порядка, отсюда также может быть получен результат (6.9). Это обусловлено вышеуказанным соотношением между моделями импульсного и белого шума. В общем же случае, когда шум является существенно импульсным процессом, за каждый импульс взаимодействия происходит изменения состояния на конечную величину. Этому условию соответствует ненулевая и не малая величина супероператорного сомножителя в выражении (6.12). Отсюда непосредственно видно, что характерный масштаб времени релаксации есть $\tau_R \sim \beta^{-1}$. В случае же шума, для которого за один импульс происходит лишь малое изменение состояния ОС, выражение (6.12) дает время релаксации в другом масштабе времени, превосходящем характерный интервал между импульсами. В этом случае, поскольку конечное изменение происходит только после действия многих импульсов, процесс описывается диффузионной моделью. Именно таким процессом является классическое броуновское движение макрочастицы в жидкости [38]. Столкновение частицы с одной молекулой, учитываемое в самой точной микроскопической модели процесса, является коротким импульсом. Однако, этот импульс столь слаб, что конечное изменение состояния происходит в результате интегрирования многих силовых импульсов. Шум же, усредненный по большому интервалу, описывается математической моделью белого шума.

6.3 Физический смысл квантового описания

Конкретизируем приведенные результаты для наиболее важной модели ОС, для которой гамильтониан взаимодействия имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}_{\xi}(t) = \hat{\xi}^T \hat{F}, \quad (6.13)$$

где $\hat{\xi}$, \hat{F} описывают два вектора столбца, отвечающих набору шумов резервуара и соответствующих обобщенных координат ОС, взаимодействующих с резервуаром. Будем

считать, что шумы имеют нулевое среднее значение и описываются математической моделью квантового белого шума, т. е. марковский процесс является диффузионным. Тогда из формулы (6.9) получаем релаксационный оператор в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_r = & - \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\hbar^2 \Delta} \int_t^{t+\Delta} d\tau_2 \int_t^{\tau_2} d\tau_1 \left\{ K_{\mu\nu}(\tau_1, \tau_2) \left[\hat{F}_\mu(\tau_1), \left[\hat{F}_\nu(\tau_2), \odot \right] \right] + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} C_{\mu\nu}(\tau_1, \tau_2) \left[\hat{F}_\mu(\tau_1), \left[\hat{F}_\nu(\tau_2), \odot \right] \right]_+ \right\}, \end{aligned} \quad (6.14)$$

где $\hat{F}(\tau) = U_0^{-1}(\tau) \hat{F}(0) U_0(\tau)$; символ $[\cdot, \cdot]_+$ обозначает операцию антикоммутирования: $[\hat{f}, \hat{g}]_+ = \hat{f}\hat{g} + \hat{g}\hat{f}$; K, C — симметризованную корреляционную матрицу и коммутатор шумов $\hat{\xi}_\mu(\tau_1), \hat{\xi}_\nu(\tau_2)$:

$$K_{\mu\nu}(\tau_1, \tau_2) = \frac{1}{2} \left\langle \hat{\xi}_\mu(\tau_1) \hat{\xi}_\nu(\tau_2) + \hat{\xi}_\nu(\tau_2) \hat{\xi}_\mu(\tau_1) \right\rangle_{\mathbb{R}}, \quad (6.15)$$

$$C_{\mu\nu}(\tau_1, \tau_2) = \left\langle \hat{\xi}_\mu(\tau_1) \hat{\xi}_\nu(\tau_2) - \hat{\xi}_\nu(\tau_2) \hat{\xi}_\mu(\tau_1) \right\rangle_{\mathbb{R}}, \quad (6.16)$$

которые являются, соответственно, вещественной и удвоенной мнимой частями комплексной корреляционной матрицы

$$\mathcal{K}_{\mu\nu}(\tau_1, \tau_2) = \left\langle \hat{\xi}_\mu(\tau_1) \hat{\xi}_\nu(\tau_2) \right\rangle_{\mathbb{R}}. \quad (6.17)$$

Матрицы K и C имеют качественно различный смысл. Матрица K отлична от нуля и при классическом рассмотрении шума. Соответствующее ей слагаемое в (6.14), пропорциональное второму коммутатору переменных ОС, при переходе к описанию переменных \hat{F} в представлении Вигнера в квазиклассическом приближении переходит в классический оператор чистой диффузии, выражаемый только через вторые производные по каноническим переменным, в то время как члены с производными первого порядка отсутствуют. Матрица же C отлична от нуля только при квантовом рассмотрении, и соответствующий ей член отсутствует при классическом описании шума. Поэтому представляет особый интерес выяснить качественный смысл этого члена, чтобы понять, какие эффекты теряются при замене квантового описания шума классическим. После деления C на \hbar^2 в (6.14) с учетом того, что $C \sim \hbar^{-1}$, получаем коэффициенты порядка \hbar , которые в сочетании с внутренним коммутатором во втором члене дают квантовую скобку Пуассона. Соответственно, в квазиклассическом пределе этот член дает классическую скобку Пуассона, что отвечает систематическому сносу. Сам же коммутатор C в терминах переменных резервуара отвечает квантовой скобке Пуассона для шума, причем величина соответствующего этой скобке систематического сноса для резервуара пропорциональна обобщенным координатам. Таким образом, основной квазиклассический смысл этого члена состоит в учете возмущения резервуара под действием ОС и обратного воздействия этого возмущения на ОС. Пренебрежение квантовым характером шума означает пренебрежение возможностью динамического изменения шумовой переменной и учет только его флуктуаций, обусловленных внешними по отношению к ОС причинами. Еще один важный момент состоит в асимметрии второго члена в (6.14) по отношению к моментам времени τ_1, τ_2 , которые неравноправны вследствие хронологического упорядочения: переменная с аргументом τ_2 расположена ближе к символу подстановки. Как будет видно из анализа релаксации двухуровневого атома в вакуумном электромагнитном поле эта асимметрия приводит к тому, что соответствующее изменение в состоянии атома связано только с испусканием квантов на частоте осцилляций атома, а акты поглощения описываются — наряду с испусканием — первым слагаемым в (6.14).

6.4 Качественные особенности немарковской релаксации

Марковский характер случайного процесса в ОС означает “максимально возможную стохастичность”, которая порождается в каждый момент новой независимой случайной величиной $\xi(t)$. Немарковость означает наличие статистической связи между этими величинами, рассматриваемыми в разные моменты времени. В задачах оптической спектроскопии немарковские процессы чаще всего возникают в системах с очень быстрыми релаксационными процессами, для которых характерное время релаксации сравнивается с временем корреляции соответствующих шумов. Скорость релаксации определяется константой взаимодействия физической ОС, формирующей оптический отклик, с другими степенями свободы исследуемого физического объекта. Типичным примером является взаимодействие электронно-дырочной пары, рассматриваемой как ОС, с фононной подсистемой полупроводника [33]. соответствующая постоянная этого взаимодействия столь велика, что она сравнима с периодом световых колебаний, который в результате и определяет характерное время корреляции процессов электрон-фононного взаимодействия. Представим в порядке мысленного эксперимента дальнейшее возрастание константы взаимодействия до таких величин, когда вычисленное в соответствии с марковской теорией значение времени релаксации было бы значительно меньше времени корреляции, и зададимся вопросом, может ли в действительности релаксации происходить с такой скоростью? Интуитивный отрицательный ответ почти очевиден: это невозможно, потому что на временах меньших времени корреляции динамика не может быть стохастической, и с соответствующее движение будет обратимым, сводясь к сверхбыстрым осцилляциям. Этот эффект проще всего понять из рассматриваемого далее примера, в котором анализируется упругая дефазировка двухуровневого атома.

Глава 7

Релаксация в системе квантовых линейных осцилляторов

7.1 Качественные особенности динамики

Анализ системы линейных осцилляторов с шумами и релаксацией связан с исследованием системы линейных дифференциальных уравнений и, как правило, не представляет большой проблемы, кроме естественных трудностей, возникающих при рассмотрении нестационарных или многомерных систем. Соответствующие расчеты выполняются как в физических, так и в других самых разнообразных приложениях теории случайных процессов. В квантовом случае в силу линейности системы, как это было выяснено уже в Главе 2, эволюция описывается в точности теми же самыми преобразованиями и все отличие заключается только в характере усреднения, учитывающего специфику квантовых распределений вероятностей. Однако, сама классическая техника, основанная на написании уравнений эволюции в дифференциальной форме, является далеко не самой экономной, поскольку отображает очень простой тип движения в непропорционально удлиненной форме записи и не обращается непосредственно к основному для данной системы математическому содержанию динамической проблемы — расчету собственных значений характеристической матрицы и представлению решения в форме соответствующей матричной экспоненты $\exp(Lt)$, примененной к вектору, описывающего начальные условия. В применении к квантовым системам упрощение описания динамики за счет использования стандартной техники Главы 2 особенно целесообразно, поскольку позволяет разделить квантовые и классические объекты теории в наиболее явном виде.

Рассмотрим минимальный базис квантовой системы линейных гармонических осцилляторов и соответствующее ему линейное пространство в виде

$$\begin{aligned} \{\hat{e}_k\} &\rightarrow \mathcal{C}_0 \oplus \mathcal{C}_1 \oplus \mathcal{C}_2, \\ \mathcal{C}_0 &\rightarrow \hat{I}, \\ \mathcal{C}_1 &\rightarrow \{\hat{X}_l, \quad l = 1, \dots, N\}, \\ \mathcal{C}_2 &\rightarrow \{(\hat{X}_l \hat{X}_m + \hat{X}_m \hat{X}_l)/4, \quad l, m = 1, \dots, N\}. \end{aligned} \tag{7.1}$$

где \mathcal{C}_0 , \mathcal{C}_1 , \mathcal{C}_2 — линейные подпространства, соответствующие единичному элементу базиса, линейным и квадратичным комбинациям фазовых переменных; $N = 2n$ — размерность фазового пространства системы, n — число степеней свободы. Базис (7.1) состоит из единичного оператора и подбазисов динамических переменных \hat{X}_l и их билинейных комбинаций. Последние выбраны в виде вигнеровски упорядоченных произведений

некоммутирующих операторов \hat{X}_l, \hat{X}_m , однако это достаточно для представления произвольных квадратичных форм. Что касается левого базиса \hat{h}_k , то его роль заключается в расчете матричных элементов и в выполнении усреднения базисных элементов \hat{e}_k по начальному распределению вероятностей. Первое для линейных систем может быть выполнено и непосредственно путем прямого сопоставления результатов рассматриваемых преобразований с базисом. Что же касается осреднения, то оно представимо в форме $\hat{A} = \langle \hat{\rho} | \hat{A} \rangle$, где

$$\langle \hat{\rho} | = (\text{Tr} \hat{\rho} \hat{e}_1, \dots, \text{Tr} \hat{\rho} \hat{e}_N), \quad (7.2)$$

т. е. для вычисления бра-вектора, представляющего матрицу плотности, не обязательно знать сам левый базис, а непосредственно требуется лишь знание средних $\text{Tr} \hat{\rho} \hat{e}_k$ на базисных элементах правого базиса $\{\hat{e}_k\}$. Основным интересом обычно представляют собственные состояния динамического оператора $\langle \hat{\rho} | = \langle k |$, описываемые уравнением $\langle k | L = \lambda_k \langle k |$, которые связаны с базисом \hat{h}_k , биортогональным к \hat{e}_k относительно стандартного скалярного произведения $\text{Tr} \hat{A}^+ \hat{B}$, введенного в п. 2.1 соотношением (2.4). На стадии же расчета самих матричных элементов матрицы L могут быть использованы иные более удобные формы скалярного произведения и соответствующего левого базиса. При использовании, в частности, вигнеровского представления базисных векторов \hat{e}_k классическими по форме функциями $e_k(X)$, если в качестве последних рассматривать полиномы фазовых переменных X , простейшим видом скалярного произведения является

$$((f, g)) = \int_{-1}^{+1} \dots \int_{-1}^{+1} f(X) g(X) dX. \quad (7.3)$$

Соответствующий $e_k(X)$ биортогональный набор $h_l(X)$ задается соотношением $h = M^{-1}e$, где $M_{k,l} = ((e_k, e_l))$ — матрица скалярных произведений правого базиса. С его использованием стандартное соотношение

$$L_{mn} = ((h_m, \mathcal{L}e_n)) \quad (7.4)$$

позволяет рассчитать матричные элементы супероператора \mathcal{L} в базисе e_k . Данная схема расчета наиболее эффективна при использовании современных программных средств выполнения аналитических расчетов на компьютере.

Рассматриваемый здесь полный лиувиллиан $\mathcal{L} = \mathcal{L}_L + \mathcal{L}_\delta + \mathcal{L}_r$, описываемый выражениями (7.18), (7.19), (7.21) в n -мерном случае и (7.28) в одномерном, является супероператором глобально понижающего типа, т. е. имеет блочную структуру (2.23) при разложении пространства рассматриваемых переменных в виде $E_1 \oplus E_2$, где E_1 — линейная оболочка одночленов $X_{k_1} \cdots X_{k_\mu}$ степени $\mu \leq \nu$, где ν выбрано произвольно, а E_2 — степени $\nu + 1$. Действительно, как легко проверить, все составляющие супероператора \mathcal{L} при применении к полиному любой степени не повышают эту степень.

Для выявления упрощений, связанных с описанной структурой супероператора \mathcal{L} , рассмотрим структуру соответствующих собственных векторов. Сопряженные спектральные задачи для матричного представления L лиувиллиана \mathcal{L} имеют вид

$$\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ 0 & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (\varphi_1 \quad \varphi_2) \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ 0 & L_{22} \end{pmatrix} = \lambda (\varphi_1 \quad \varphi_2), \quad (7.5)$$

где $\Psi = (\psi_1, \psi_2)$ описывают собственные динамические переменные, а $\Phi = (\varphi_1, \varphi_2)$ —

соответствующие собственные состояния. Они имеют решения в форме

$$\Psi_I = \begin{pmatrix} \psi_1^I \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{II} = \begin{pmatrix} -(L_{11} - \lambda_{II})^{-1} L_{12} \psi_2^{II} \\ \psi_2^{II} \end{pmatrix}, \quad (7.6)$$

где ψ_1^I, ψ_2^{II} описывают решения "правых" собственных задач уменьшенных размерностей

$$L_{11} \psi_1^I = \lambda_I \psi_1^I, \quad L_{22} \psi_2^{II} = \lambda_{II} \psi_2^{II}, \quad (7.7)$$

и, соответственно,

$$\Phi_I = \begin{pmatrix} \varphi_1^I & -\varphi_1^I L_{12} (L_{22} - \lambda_I)^{-1} \end{pmatrix}, \quad \Phi_{II} = \begin{pmatrix} 0 & \varphi_2^{II} \end{pmatrix}, \quad (7.8)$$

где $\varphi_1^I, \varphi_2^{II}$ описывают решения сопряженных к (7.7) "левых" собственных задач

$$\varphi_1^I L_{11} = \lambda_I \varphi_1^I, \quad \varphi_2^{II} L_{22} = \lambda_{II} \varphi_2^{II}. \quad (7.9)$$

Таким образом, решение полной спектральной задачи (7.5) расщепляется на решение редуцированных "правых" и "левых" задач (7.7), (7.9) для подматриц L_{11}, L_{22} . При рассмотрении проблемы расчета стационарных характеристик следует учитывать тот факт, что в подпространствах E_ν , образованных линейными оболочками одночленов любой степени $\nu > 0$, рассматриваемый супероператор \mathcal{L} не имеет нулевых собственных значений. Отсюда следует, что нулевому собственному значению соответствуют согласно выражениям (7.6), (7.8) собственные векторы

$$\Psi_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Phi_0 = (1, -L_{0\bar{0}} L_{\bar{0}\bar{0}}^{-1}),$$

где $L_{0\bar{0}}$ описывает строку, отвечающую преобразованию из подпространства переменных, помеченных $\bar{0}$, в $e_0(X) = 1$, в то время как $\bar{0}$ отвечает подпространству переменных, дополнительных к $e_0(X)$, т. е. подпространство полиномов, не содержащих свободных членов. При этом, поскольку $L_{\bar{0}\bar{0}}$ в силу глобально понижающего типа рассматриваемого супероператора \mathcal{L} имеет понижающую блочную структуру вида (2.23), обратный оператор имеет вид

$$L_{\bar{0}\bar{0}}^{-1} = \begin{pmatrix} L_{11}^{-1} & -L_{11}^{-1} L_{12} L_{22}^{-1} \\ 0 & L_{22}^{-1} \end{pmatrix}.$$

В результате нулевой бра-вектор имеет вид

$$\Phi_0 = (1, -L_{01} L_{11}^{-1}, L_{01} L_{11}^{-1} L_{12} L_{22}^{-1} - L_{02} L_{22}^{-1}).$$

Следовательно, расчет средних для переменных из $E_0 \oplus E_1$, выполняемый с использованием только первых двух компонент Φ_0 , не связан с рассмотрением подпространства E_2 , и может быть выполнен путем нахождения стационарного собственного вектора подматрицы, отвечающей $E_0 \oplus E_1$. Таким образом, для лиувиллианов глобально понижающего типа можно выполнять расчет стационарных средних для полиномов до степени ν включительно, не привлекая к рассмотрению полиномов более высокой степени.

7.2 Расчет лиувиллиана

Гамильтониан взаимодействия с шумами системы линейных гармонических осцилляторов представляется в виде (6.13). Здесь мы ограничимся случаем линейного возмущения

$$\hat{\mathcal{H}}_\xi = \hbar \hat{\xi}^T(t) \hat{X}(t), \quad (7.10)$$

где динамические переменные осцилляторов $\hat{X}(t)$ и стационарных шумов $\hat{\xi}(t)$ рассматриваются в представлении взаимодействия. Невозмущенный гамильтониан собственного движения осцилляторов для системы координат с центром в точке равновесия имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{1}{2} \hat{X}^T Q \hat{X}, \quad (7.11)$$

где положительно определенная матрица Q в частном случае системы материальных частиц в гармоническом поле потенциальных сил и декартовой системы координат сводится к прямой сумме диагональной матрицы масс и матрицы силовых констант, описываемых вторыми производными потенциальной энергии $V(q)$.

Рассчитаем матричные элементы невозмущенного лиувиллиана

$$\mathcal{L}_0 = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}_0, \odot]$$

в базисе (7.1). Для линейной части $\hat{A} \in \mathcal{C}_1$ имеем $[\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{X}] = CQX$, где коммутационная матрица $C = (\hat{X}_m \hat{X}_n - \hat{X}_n \hat{X}_m)$ в случае стандартного набора канонических координат и импульсов имеет вид (3.31). Поскольку, в силу свойства (2.17), для расчета действия унитарного преобразования временной эволюции на любую функцию $f(\hat{X})$ достаточно знать его действие на \hat{X} , нет необходимости рассчитывать лиувиллиан в подпространстве квадратичных переменных. В подпространстве же линейных переменных \mathcal{C}_1 соответствующие матричные элементы невозмущенного лиувиллиана имеют вид

$$L_0 = \frac{i}{\hbar} CQ. \quad (7.12)$$

Эта матрица может быть представлена в канонической форме

$$L_0 = V^{-1} \begin{pmatrix} 0 & \omega_1 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ -\omega_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \omega_n \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & -\omega_n & 0 \end{pmatrix} V \quad (7.13)$$

с помощью преобразования подобия V , которое приводит Q к единичной матрице, а C к канонической кососимметрической форме. Оно рассчитывается из соотношения

$$VCQV^{-1} = (V_2^{-1} M^{-1} V_1^{-1} C V_1 M V_2) (V_2^{-1} M^{-1} V_1^{-1} Q V_1 M V_2),$$

определяющего $V^{-1} = V_1 M V_2$ через следующую совокупность преобразований: преобразование подобия V_1 , диагонализующее матрицу Q , масштабное преобразование

M , приводящее диагонализированную матрицу Q к единичной, и последующее преобразование подобия V_2 , приводящее к канонической форме измененную матрицу C и, одновременно, произведение CQ . Соответствующий оператор невозмущенной временной эволюции представляется в виде

$$S_0(t) = V^{-1}O_n(t)V,$$

где

$$O_n(\omega t) = \begin{pmatrix} \cos \omega_1 t & \sin \omega_1 t & . & . & . & 0 & 0 \\ -\sin \omega_1 t & \cos \omega_1 t & . & . & . & 0 & 0 \\ \dots & \dots & . & . & . & \dots & \dots \\ 0 & 0 & . & . & . & \cos \omega_n t & \sin \omega_n t \\ 0 & 0 & . & . & . & -\sin \omega_n t & \cos \omega_n t \end{pmatrix} \quad (7.14)$$

описывает совокупность n двумерных поворотов на углы $\varphi_k = \omega_k t$, где набор $\omega = \{\omega_1, \dots, \omega_n\}$ описывает частоты собственных колебаний. Такие же преобразования поворота описывают и свободную прецессию дипольного момента ДА. Вектор $\hat{X}^0 = V\hat{X}$ описывает набор нормальных координат $\{\hat{q}_1, \hat{p}_1, \dots, \hat{q}_n, \hat{p}_n\}$ сопряженных переменных \hat{q}_k, \hat{p}_k , приведенных к одинаковой размерности и определенных описанным алгоритмом точно до произвольного общего для каждой пары масштабного множителя в преобразовании V_2 , исчезающего в комбинации $V_2^{-1} \odot V_2$. В квантовой теории выделены два стандартных выбора соответствующего множителя: $[\hat{q}_k, \hat{p}_k] = i\hbar$ и $[\hat{q}_k, \hat{p}_k] = i$, отвечающие разным значениям постоянной Планка — истинному физическому значению и $\hbar = 1$ (при этом последний вариант обычно связан с переходом к комплексному базису на основе операторов порождения-уничтожения квантов \hat{a}_k^+, \hat{a}_k).

Рассмотрим теперь околорезонансное возбуждение системы набором гармонических сил с потенциалом

$$\hat{H}_L = \text{Re} \sum_{k=1}^m e^{-i\omega_L^k t} f_k^T \hat{X}, \quad (7.15)$$

где $m \leq n$ — число гармонических сил с векторами комплексных амплитуд сил f_k с частотами $\omega_L^{(m)} = \{\omega_L^1, \dots, \omega_L^m\}$, близкими к соответствующим собственным частотам ω_k . В этом случае в качестве невозмущенной динамики удобнее рассматривать динамику, задаваемую измененным преобразованием (7.14) с его заменой на

$$O_n(\omega^{(m)} t) = \begin{pmatrix} \cos \omega_L^1 t & \sin \omega_L^1 t & . & . & . & 0 & 0 \\ -\sin \omega_L^1 t & \cos \omega_L^1 t & . & . & . & 0 & 0 \\ \dots & \dots & . & . & . & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \cos \omega_L^m t & \sin \omega_L^m t & . & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sin \omega_L^m t & \cos \omega_L^m t & . & 0 & 0 \\ \dots & \dots & . & . & . & \dots & \dots \\ 0 & 0 & . & . & . & \cos \omega_n t & \sin \omega_n t \\ 0 & 0 & . & . & . & -\sin \omega_n t & \cos \omega_n t \end{pmatrix}, \quad (7.16)$$

где близкие к возбуждающим собственные частоты заменены на значения возбуждающих частот. Рассчитаем в представлении взаимодействия полную матрицу лиувиллиана

временной эволюции $L = L_\delta + L_L + L_r$, которая складывается из матрицы L_δ , учитывающей расстройку возбуждающих полей, матрицы L_L , описывающей возбуждение действующими силами, и релаксационной матрицы L_r , определенных в пространстве (7.1) размерности $1 + N + N(N + 1)/2$. Конечный результат имеет блочный вид

$$L = \begin{pmatrix} 0 & W_1 & W_2 \\ 0 & L_1 & L_{12} \\ 0 & 0 & L_2 \end{pmatrix}. \quad (7.17)$$

При этом удобно для выполнения расчетов использовать представление Вигнера, в котором временная динамика отображается заменой в гамильтониане набора операторов \hat{X} на линейную комбинацию $X + (C/2)\partial/\partial X^T$.

Лиувиллиан взаимодействия с возбуждающими силами описывается в представлении взаимодействия не зависящим от времени выражением

$$\mathcal{L}_L = \text{Re} \sum_{k=1}^m \langle f_k | \omega_k \rangle \left\langle \omega_k \left| C \frac{\partial}{\partial X^T} \right. \right\rangle. \quad (7.18)$$

Здесь ω_k — положительные собственные значения матрицы (7.12). Лиувиллиан, описывающий расстройку, имеет вид

$$\mathcal{L}_\delta = \frac{\partial}{\partial X} \sigma \delta Q X, \quad (7.19)$$

где $\sigma = iC/\hbar$, а

$$\delta Q = V^{-1} \begin{pmatrix} 0 & -\delta_1 & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ \delta_1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \cdot & \cdot & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & -\delta_m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta_m & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \cdot & \cdot & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & 0 \end{pmatrix} V, \quad (7.20)$$

Из формулы (6.14) получаем релаксационный оператор в виде

$$\mathcal{L}_r = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial}{\partial X} C \tilde{\mathcal{K}} C \frac{\partial}{\partial X^T} - \frac{1}{2} X^T \tilde{\mathcal{C}} C \frac{\partial}{\partial X^T} \right) \quad (7.21)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{K}} &= \sum_{k=1}^{2n} \int_0^\infty \langle \omega_k | K_\xi(\tau) | \omega_k \rangle e^{i\omega_k \tau} d\tau | \omega_k \rangle \langle \omega_k |, \\ \tilde{\mathcal{C}} &= \sum_{k=1}^{2n} \int_0^\infty \langle \omega_k | C_\xi(\tau) | \omega_k \rangle e^{i\omega_k \tau} d\tau | \omega_k \rangle \langle \omega_k | \end{aligned} \quad (7.22)$$

описывают редуцированные матрицы спектральных плотностей, соответствующих симметризованной корреляционной и коммутационной матрицам шумов $\hat{\xi}$. Первое слагаемое в релаксационном супероператоре (7.21) описывает диффузионную составляющую, а второе — затухание. При этом из выражений (7.22) в предположении о тепловом равновесии флуктуаций шумов резервуара следует определенное соотношение между параметрами этих двух вкладов, аналогичное как по форме, так и по содержанию, соот-

ношению между параметрами скорости распада γ и некогерентной накачки w в соотношениях (8.48) в теории релаксации двухуровневого атома. Так, в одномерном случае, матрицы $\tilde{\mathcal{K}}, \tilde{\mathcal{C}}$ пропорциональны единичным и между ними имеет место соотношение $\tilde{\mathcal{K}}/\tilde{\mathcal{C}} = (1/2)\text{cth}(\hbar\omega/2kT)$. В квазиклассической асимптотике $kT/\hbar\omega \rightarrow \infty$ из (7.21) следует, что постоянная Планка выпадает из обоих слагаемых и между коэффициентом диффузии и затуханием имеет место классическое соотношение, для коэффициента диффузии в пространстве скоростей имеющее вид $D = kT\gamma/m$ [13]. В общем случае квантовый характер динамики системы линейных осцилляторов проявляется лишь в указанных соотношениях, которые автоматически учитывают условие сохранения минимального уровня квантовых флуктуаций, соответствующих соотношению неопределенностей Гейзенберга (3.47).

Применяя приведенные выражения для лиувиллианов (7.18), (7.19), (7.21), получаем следующее представление динамики в виде матричных элементов:

$$W_{1k} = \text{Re} \sum_{k=1}^m \langle f_k | \omega_k \rangle \langle \omega_k | C_k \rangle, \quad (7.23)$$

где $|C_k\rangle$ — k -ый столбец из элементов коммутационной матрицы.

$$W_2 = \frac{1}{\hbar^2} C \tilde{\mathcal{K}} C, \quad (7.24)$$

где правая часть рассматривается как $N(N+1)/2$ -элементная вектор-строка, нумерованная матричными элементами представленной матрицы.

$$L_1 = \sigma \delta Q - \frac{1}{2\hbar^2} \tilde{\mathcal{C}} C, \quad (7.25)$$

где правая часть рассматривается как квадратная матрица $N \times N$.

$$(L_{12})_{jkl} = \frac{1}{2} \text{Re} \sum_{k=1}^m \langle f_k | \omega_k \rangle \langle \omega_k | C_j (\delta_{kj} + \delta_{kl}) \rangle, \quad (7.26)$$

где правая часть рассматривается как прямоугольная матрица $N \times N(N+1)/2$.

$$(L_2)_{jklm} = \langle \sigma_l | \delta Q_j \rangle \delta_{km} + \langle \sigma_k | \delta Q_m \rangle \delta_{jl} - \frac{1}{2\hbar^2} (\langle \tilde{\mathcal{C}}_l | C_j \rangle \delta_{km} + \langle \tilde{\mathcal{C}}_k | C_m \rangle \delta_{jl}), \quad (7.27)$$

где правая часть рассматривается как квадратная матрица $N(N+1)/2 \times N(N+1)/2$. С помощью этих соотношений релаксационный оператор представляется явным аналитическим выражением как квадратная матрица размерности $(\frac{N^2}{2} + \frac{3N}{2} + 1) \times (\frac{N^2}{2} + \frac{3N}{2} + 1)$. Минимальная размерность, таким образом, соответствующая одномерному случаю $N = 2n = 2$, есть 6×6 . Расчеты с использованием матрицы (7.17) существенно упрощаются вследствие ее понижающей структуры вида (2.23), позволяющей рассчитывать переменные в виде полиномов r -ой степени независимо от переменных более высокой степени.

7.3 Одномерный случай

В одномерном случае $n = 1, N = 2$ в случае гамильтониана, не содержащего комбинаций вида $\hat{q}\hat{p}$, приведение к каноническому виду осуществляется матрицей V , сводящейся

просто к масштабному преобразованию

$$V = M = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{m\omega_0}} & 0 \\ 0 & \sqrt{m\omega_0} \end{pmatrix},$$

где ω_0 — частота осциллятора. Данное преобразование приводит координату и импульс к одинаковой размерности $[\hbar]^{-1/2}$, а гамильтониан — к виду $\hat{H}_0 = \omega_0(\hat{q}^2 + \hat{p}^2)/2$, без изменения объема фазового пространства, т. е. с сохранением коммутатора C , который уже имеет канонический вид.

В терминах преобразованных координат и импульсов $X = (q, p)$ описанные в п. 7.2 в резонансном приближении (т. е. усредненные по осцилляциям на резонансной частоте ω_0) компоненты полного лиувиллиана имеют вид

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_L &= f_L \left(\sin \varphi_L \frac{\partial}{\partial q} + \cos \varphi_L \frac{\partial}{\partial p} \right), \\ \mathcal{L}_\delta &= \delta \left(q \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q} \right), \\ \mathcal{L}_\gamma &= -\frac{1}{2} \gamma \left(q \frac{\partial}{\partial q} + p \frac{\partial}{\partial p} \right) + D \left(\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right). \end{aligned} \quad (7.28)$$

В последнем выражении в качестве базовых параметров проблемы использованы скорость затухания γ , имеющая стандартную размерность $[t]^{-1}$, и коэффициент диффузии D , имеющий при данном выборе системы координат размерность энергии $[m][l]^2[t]^{-2}$, где l обозначает размерность непреобразованной координаты. Эти параметры удовлетворяют соотношениям, описанным в п. 7.2. В частности, наличие ненулевого затухания в классической теории в силу флуктуационно-диссипационной теоремы с неизбежностью приводит к наличию пропорционального затуханию и температуре коэффициента диффузии, т. е. влечет появление соответствующих флуктуаций. В квантовой теории в дополнение к этому ненулевые флуктуации имеют место и при нулевой температуре — в силу квантового обобщения описывающей уровень флуктуаций классической формулы Найквиста. Это обусловлено наличием не связанных с шумами термостата собственных квантовых флуктуаций осциллятора, включенных в динамику, описываемую рассматриваемым лиувиллианом.

Базис линейно-квадратичных переменных в представлении Вигнера имеет вид $\{1, q, p, q^2/2, qp/2, p^2\}$. В этом базисе матричное представление суммарного лиувиллиана с использованием формулы (7.3) может быть получено в виде

$$L = \begin{pmatrix} 0 & f \sin \varphi_L & f \cos \varphi_L & 2D & 0 & 2D \\ 0 & -\gamma & \delta & 2f \sin \varphi_L & f \cos \varphi_L & 0 \\ 0 & -\delta & -\gamma & 0 & f \sin \varphi_L & 2f \cos \varphi_L \\ 0 & 0 & 0 & -2\gamma & \delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\delta & -2\gamma & 2\delta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\delta & -2\gamma \end{pmatrix} \quad (7.29)$$

Стационарное состояние в рассматриваемом базисе характеризуется левым собственным вектором $\langle 0|$, определяемым уравнением $\langle 0| L = 0$ и описывающим первые и вторые

моменты стационарного распределения вероятностей.¹ Адекватная нормировка бра-векторов $\langle \hat{\rho} |$, очевидно, дается соотношением $\langle \hat{\rho} |_1 = 1$, поскольку $\langle 1 \rangle = \langle \hat{\rho} | e_0 \rangle = \langle \hat{\rho} |_1$. С учетом этого решение проблемы стационарного состояния для матрицы (7.29) имеет вид

$$\langle 0 | = \left(1, \langle q \rangle, \langle p \rangle, \langle q \rangle^2 + \frac{D}{\gamma}, \langle q \rangle \langle p \rangle, \langle p \rangle^2 + \frac{D}{\gamma} \right), \quad (7.30)$$

где

$$\begin{aligned} \langle q \rangle &= f \frac{\gamma \sin \varphi_L - \delta \cos \varphi_L}{\gamma^2 + \delta^2}, \\ \langle p \rangle &= f \frac{\gamma \cos \varphi_L + \delta \sin \varphi_L}{\gamma^2 + \delta^2}. \end{aligned}$$

Изложенный анализ является всего лишь иллюстрацией описанной техники расчетов, примененной для наглядности к хорошо изученной простейшей модели. В действительности, она может быть приложена и к другим более сложным системам, из которых наиболее очевидным примером являются системы с ненулевым, но малым ангармонизмом, когда представляет интерес расчет ангармонических вкладов.

¹Стандартный переход к смещенной системе координат с центром в точке математического ожидания $X_0 = \langle 0 | X \rangle$ описывается заменой супероператора $\Delta L = L - L_{D \rightarrow 0}$ для приведения решения стационарной задачи $\langle 0 | L = 0$ к виду $\langle 0 | = (1, 0, 0)$ в подпространстве линейных многочленов. После этого $\Delta L = L - L_{D \rightarrow 0}$ описывает лишь высшие моменты искомого распределения.

Глава 8

Теория релаксации двухуровневого атома

8.1 Общие соотношения

Двухуровневая модель атома (ДА) является частным случаем двухуровневых систем (ДС), структура которых описана в абстрактном виде в *Главы 3*. Теория случайных процессов в открытых ДС может быть изложена в абстрактном виде безотносительно к их физической природе. Здесь, однако, мы ограничимся рассмотрением только ДА, поскольку все наиболее важные эффекты ДС проявляются в его динамике. Специфика именно ДА связана с качественно различным физическим смыслом его базисных операторов \hat{s}_k . При $k = 1, 2$ они описывают операторы поляризации — недиагональные матричные элементы оператора дипольного момента, а \hat{s}_3 есть оператор разности населенностей. Невозмущенная динамика недиагональных операторов содержит быстрые осцилляции с частотой ω_{12} атомного перехода — *свободную прецессию*, в то время как оператор разности населенностей в отсутствие взаимодействия неизменен, а при действии умеренно сильного поля с интенсивностью $I \leq 10^{15}$ Вт/см² испытывает осцилляции — оптические нутации — с характерными частотами $\Omega \ll \omega_{12}$.

Гамильтониан взаимодействия ДА с резервуаром имеет стандартную структуру

$$\hat{\mathcal{H}}_\xi = \frac{\hbar}{2} \hat{\xi} \cdot \hat{\sigma}. \quad (8.1)$$

Здесь $\hat{\sigma}$ — набор операторов квазиспина, представленных матрицами Паули; $\hat{\xi}$ — набор переменных резервуара, описывающих результирующие шумы в ДА. При этом мы будем полагать $\langle \hat{\xi} \rangle_{\text{R}} = 0$, считая среднее значение гамильтониана $\langle \hat{\mathcal{H}}_\xi \rangle_{\text{R}}$ включенным в собственный гамильтониан ДА. В силу того, что любой оператор двухуровневой системы представляется в виде разложения по матрицам Паули, эта структура является, фактически, универсальной и, соответственно, для различных конкретных ДА специфика релаксационных процессов обусловлена только следующими двумя факторами. Первый — статистические характеристики случайного процесса

$$\hat{\xi}(t) = U_\xi^{-1}(t) \hat{\xi}(0) U_\xi(t),$$

определяемые физической природой резервуара. Второй — динамические свойства быстрых собственных движений ДА, описываемых в представлении взаимодействия преоб-

разованием

$$\hat{\sigma}(t) = [U_0^{-1}(t) \odot U_0(t)] \hat{\sigma}. \quad (8.2)$$

Основными физическими примерами резервуаров являются электромагнитное поле вакуума, другие атомы в газовой фазе и квазичастицы (элементарные возбуждения) в сплошных средах. Основными примерами быстрой динамики является невозмущенная прецессия свободного атома и оптические нутации в случае достаточно сильного лазерного поля.

Действие различных компонент шума $\hat{\xi}_k$ на ДА в силу качественно различного физического смысла сопряженных им операторов $\hat{\sigma}_k$ также качественно различно. Шумы $\hat{\xi}_{1,2}$ приводят к так называемой *неупругой дефазировке* атома, которая сопровождается реальными переходами между атомными уровнями. Шум $\hat{\xi}_3$ приводит к чисто *упругой дефазировке* атома, которая состоит только в дефазировке когерентных колебаний $1 \leftrightarrow 2$ -переходов, описываемых недиагональными матрицами $\hat{\sigma}_{1,2}$, без изменения населенностей уровней. При этом, с учетом собственных осцилляций атомных переменных $\hat{\sigma}_{1,2}$ в (8.1), существенно их взаимодействие лишь с шумами $\hat{\xi}_{1,2}$, в относительно узкой полосе частот δ (см. п. 6.1 *Главы 6*) в окрестности атомной частоты $\omega_{1,2}$. Качественно различная роль различных компонент шума $\hat{\xi}$ проиллюстрирована на рис. 8.1.

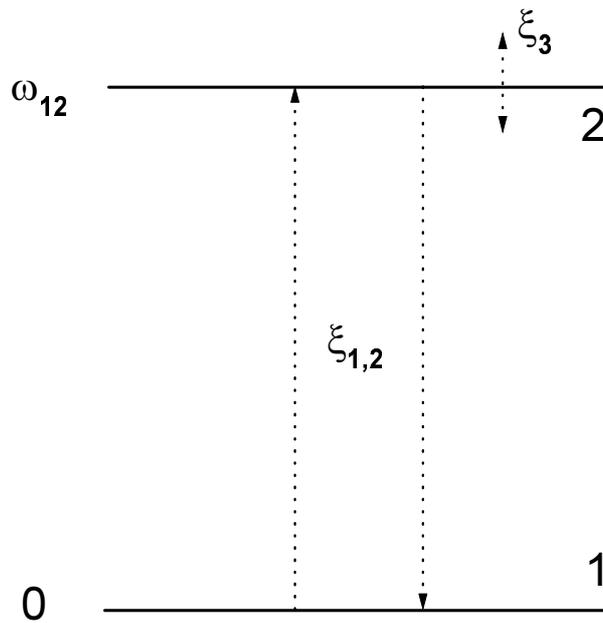


Рис. 8.1: Энергетическая схема ДА и его взаимодействие с различными компонентами шума ξ . Шумы $\hat{\xi}_{1,2}$ приводят к переходам между уровнями; шум $\hat{\xi}_3$ модулирует частоту перехода.

Аналитические результаты при наличии нескольких шумов ξ можно получить только для марковских процессов. Для процессов диффузионного типа из общего соотношения (6.9) *Главы 6* в данном случае после подстановки выражений (8.1), (8.2) с учетом представления супероператорного преобразования (8.2) в виде соответствующего преобразования $S_\sigma(t)\hat{\sigma}$ с 3×3 -матрицей $S_\sigma(t)$, получаем символическое представление релаксационного супероператора в наиболее общем виде, справедливом при наличии быстрых

собственных осцилляций ДА:

$$\mathcal{L}_r = \frac{1}{4} \text{tr} \left[(Q + Q^+) \hat{\sigma} \odot \hat{\sigma}^T - (Q \hat{\sigma} \hat{\sigma}^T \odot + Q^+ \odot \hat{\sigma} \hat{\sigma}^T) \right]. \quad (8.3)$$

Здесь символ tr обозначает взятие следа только по трехмерным индексам 3×3 -матриц, составленных из супероператорных выражений; символ T обозначает транспонирование трехмерного вектора-столбца $\hat{\sigma}$; матрица Q представляется следующим выражением:

$$Q = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \int_t^{t+\Delta} d\tau_2 \int_t^{\tau_2} d\tau_1 S_\sigma(\tau_1) \mathcal{K}_\xi(\tau_1, \tau_2) S_\sigma^T(\tau_2), \quad (8.4)$$

где

$$\mathcal{K}_\xi(\tau_1, \tau_2) = \langle \hat{\xi}(\tau_1) \hat{\xi}^T(\tau_2) \rangle_R - \quad (8.5)$$

корреляционная матрица шумов. Матрица Q учитывает влияние быстрых движений на процессы релаксации. Она выделяет из спектра флуктуаций, представленных корреляционной матрицей $\mathcal{K}_\xi(\tau_1, \tau_2)$, частоты, соответствующие быстрым движениям, представленным в матрице $S_\sigma(t)$.

Соответствующий выражению (8.3) для релаксационного супероператора вид матричных элементов может быть получен с использованием формулы (2.39), выражающей произведения базисных операторов \hat{e}_k через их линейные комбинации. Подставляя в (8.3) базисные операторы \hat{e}_k и используя фигурирующие там операторы $\hat{\sigma}_k$ и дополняющий их единичный оператор \hat{I} в качестве базиса, после замены всех произведений линейными комбинациям получаем преобразованные базисные элементы $\mathcal{L}_r \hat{e}_k$ в виде линейного разложения по этим же элементам \hat{e}_k с коэффициентами

$$L_{nk} = (Q_{ij} + Q_{ji}^*) G_{jkl} G_{lin} - (Q_{ij} + Q_{ij}^*) G_{jil} (G_{lkn} + G_{kln}). \quad (8.6)$$

Здесь использовано соглашение о суммировании дважды встречающихся индексов. С учетом конкретного вида структурных коэффициентов, определенных соотношением (3.12), получаем соответствующую выражению (8.6) релаксационную матрицу в виде

$$L_r = \begin{pmatrix} 0 & 2 \mathcal{I}m Q_{12} & 2 \mathcal{I}m Q_{31} & 2 \mathcal{I}m Q_{32} \\ 0 & & & \\ 0 & & \text{Re } Q - (\text{Tr } \text{Re } Q) I & \\ 0 & & & \end{pmatrix}, \quad (8.7)$$

где I обозначает единичную 3×3 -матрицу.

Рассмотрим структуру матрицы (8.7) для случая матриц Q вида¹

$$Q = \sum_{k=1}^3 \lambda_k |\lambda_k\rangle \langle \lambda_k|, \quad (8.8)$$

где $|\lambda_k\rangle, \langle \lambda_k|$ эрмитово сопряженные собственные векторы и строки некоторой вещественной антисимметричной матрицы, а собственные значения λ_k матрицы Q в общем случае произвольны. Общий вид собственных векторов описывается выражениями (3.20) при произвольных $\Omega_{1,2,3}$. При этом будем полагать, что $|\lambda_3\rangle$ — вещественный вектор, а

¹Это представление возникает после выполнения усреднения по s в соотношении (8.23).

$|\lambda_{1,2}\rangle$ комплексно сопряжены друг другу. С учетом этих выражений и представления матрицы Q в виде разложения (8.8) релаксационная матрица (8.7) записывается в виде

$$L_r = \begin{pmatrix} 0 & -w \langle \lambda_3 | \\ 0 & L_\sigma \\ 0 & \\ 0 & \end{pmatrix}, \quad (8.9)$$

где

$$L_\sigma = -\gamma |\lambda_3\rangle \langle \lambda_3| - (\Gamma + i\Lambda) |\lambda_1\rangle \langle \lambda_1| - (\Gamma - i\Lambda) |\lambda_2\rangle \langle \lambda_2|. \quad (8.10)$$

Параметры $w, \gamma, \Gamma, \Lambda$ связаны с λ_k соотношениями

$$w = \mathcal{R}e(\lambda_1 - \lambda_2), \quad \gamma = \mathcal{R}e(\lambda_1 + \lambda_2), \\ \Gamma = \mathcal{R}e \left[\lambda_3 + \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2) \right], \quad \Lambda = \mathcal{I}m(\lambda_2 - \lambda_1). \quad (8.11)$$

Выражение (8.9) соответствует общей структуре (2.19) супероператорных преобразований в ОС, а с учетом выражений (2.20), (2.21) для собственных векторов супероператора (8.9) получаем:

$$\lambda_0 = 0, \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \langle 0| = \left(1, -\frac{w}{\gamma} \langle \lambda_3 | \right), \\ \lambda_3 = -\gamma, \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} w/\gamma \\ |\lambda_3\rangle \end{pmatrix}, \quad \langle 3| = (1, \langle \lambda_3 |), \quad (8.12) \\ \lambda_{1,2} = -\Gamma \mp i\Lambda, \quad |1,2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |\lambda_{1,2}\rangle \end{pmatrix}, \quad \langle 1,2| = (0, \langle \lambda_{1,2} |).$$

Релаксационный супероператор можно записать в виде спектрального разложения

$$\mathcal{L}_r = -w |0\rangle \langle 3| - \gamma |3\rangle \langle 3| - (\Gamma + i\Lambda) |1\rangle \langle 1| - (\Gamma - i\Lambda) |2\rangle \langle 2|. \quad (8.13)$$

В базисе вещественных векторов $|0\rangle, |3\rangle, (|1\rangle \pm |2\rangle)/\sqrt{2}$ он имеет матричный вид

$$L_r = \begin{pmatrix} 0 & -w & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Gamma & \Lambda \\ 0 & 0 & -\Lambda & -\Gamma \end{pmatrix}. \quad (8.14)$$

Это представление релаксационного супероператора универсально для описания марковских двухуровневых систем [36].

8.2 Зависимость релаксационного супероператора от спектральной плотности шумов

Рассмотрим гауссовскую модель шумов $\hat{\xi}(t)$ в ДА, которая адекватно описывает реальный шум в марковской ОС с динамикой диффузионного типа. Самый общий вид таких шумов может быть задан выражением

$$\hat{\xi}_k(t) = \sum_{\nu} \chi_{\nu}^{(k)} \left[\hat{a}_{\nu}^{(k)} e^{-i\omega_{\nu} t} + \hat{a}_{\nu}^{+(k)} e^{i\omega_{\nu} t} \right], \quad (8.15)$$

где $\chi_\nu^{(k)}$ — константы взаимодействия ДА с ν -ой модой k -ой компоненты шумовых переменных резервуара, $\hat{a}_\nu^{(k)}$, $\hat{a}_\nu^{+(k)}$ — операторы уничтожения и порождения квантов, описываемые каноническими коммутационными соотношениями

$$\hat{a}_\nu^{(k)} \hat{a}_\mu^{+(n)} - \hat{a}_\mu^{+(n)} \hat{a}_\nu^{(k)} = \delta_{kn} \delta_{\mu\nu}. \quad (8.16)$$

При достаточно плотных на частотной оси последовательностях ω_ν и плавно изменяющихся $\chi_\nu^{(k)}$ данное представление описывает и шумы с непрерывным спектром частот. Пары операторов $\hat{a}_\nu^{(k)}$, $\hat{a}_\nu^{+(k)}$ в типичных случаях являются операторами статистически независимых нормальных осцилляторов многомерной линейной системы, которые находятся в термодинамически равновесном состоянии, описываемыми гауссовскими матрицами плотности. Последние задаются одним параметром — средним числом квантов, рассчитываемым по формуле Планка:

$$n_\nu^{(k)} = \langle \hat{a}_\nu^{+(k)} \hat{a}_\nu^{(k)} \rangle = [\exp(\hbar\omega_\nu/kT) - 1]^{-1}. \quad (8.17)$$

Рассчитаем для процесса (8.15) корреляционную матрицу (8.5) и соответствующие ей симметризованный коррелятор и коммутатор. Корреляционная матрица в данной модели диагональна и имеет вид

$$\mathcal{K}_k(\tau) = \sum_\nu \chi_\nu^{(k)2} \left[(n_\nu^{(k)} + 1) e^{i\omega_\nu\tau} + n_\nu^{(k)} e^{-i\omega_\nu\tau} \right]. \quad (8.18)$$

Здесь 1 в первом слагаемом описывает коммутатор (8.16).

Удобно представить корреляционную матрицу (8.5) в виде суммы эрмитовой части — коррелятора K , и антиэрмитовой — коммутатора :

$$\mathcal{K}_\xi = K + \frac{1}{2}C,$$

$$K = \frac{1}{2}(\mathcal{K}_\xi + \mathcal{K}_\xi^+), \quad C = \mathcal{K}_\xi - \mathcal{K}_\xi^+. \quad (8.19)$$

При этом в Фурье-представлении K и C имеют следующую структуру:

$$\begin{aligned} K_k(\tau) &= \int_0^\infty d\omega \left(e^{-i\omega\tau} + e^{i\omega\tau} \right) \tilde{K}_k(\omega), \\ \frac{1}{2}C_k(\tau) &= - \int_0^\infty d\omega \left(e^{-i\omega\tau} - e^{i\omega\tau} \right) \frac{1}{2}\tilde{C}_k(\omega) \end{aligned} \quad (8.20)$$

с положительно определенными плотностями $\tilde{K}_k(\omega)$, $\tilde{C}_k(\omega)/2$. Симметризованные корреляторы $K_k(\tau)$ и коммутаторы $C_k(\tau)$ получаются из (8.18) с помощью представления

$$n_\nu^{(k)} + 1 \longrightarrow \left(n_\nu^{(k)} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2}, \quad n_\nu^{(k)} \longrightarrow \left(n_\nu^{(k)} + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2},$$

которое выделяет в (8.18) симметричную и антисимметричную по τ составляющие. Соответственно, это приводит к представлению $K_k(\tau)$ и $C_k(\tau)$ в виде (8.20) с

$$\tilde{K}_k(\omega) = \frac{dN^{(k)}}{d\omega} \chi^{(k)2}(\omega) \times \left(n^{(k)} + \frac{1}{2} \right),$$

$$\frac{1}{2}\tilde{C}_k(\omega) = \frac{dN^{(k)}}{d\omega}\chi^{(k)2}(\omega) \times \frac{1}{2}. \quad (8.21)$$

Здесь $dN^{(k)}/d\omega$ описывает спектральную плотность числа осцилляторов, а $\chi^{(k)2}(\omega)$ — частотную зависимость констант взаимодействия.

Коммутаторы $\tilde{C}_k(\omega)$ не зависят от квантового состояния описываемых им осцилляторов и просто пропорциональны плотности $dN^{(k)}/d\omega$ этих осцилляторов в окрестности частоты ω . В то же время коррелятор определяется квантовым состоянием резервуара и для температурного равновесия содержит соответствующий фактор $\text{cth}(\hbar\omega/2kT)$:

$$\tilde{K}_k(\omega) \sim n^{(k)} + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}\text{cth}(\hbar\omega/2kT). \quad (8.22)$$

Соотношение $\tilde{K}_k(\omega)/\tilde{C}_k(\omega) = (1/2)\text{cth}(\hbar\omega/2kT)$ отвечает соотношению

$$\langle \hat{a}_k \hat{a}_k^+ \rangle / \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle = \exp(\hbar\omega/kT),$$

которое выражает одновременно и больцмановское соотношение вероятностей для соседних энергетических уровней гармонического осциллятора, отличающихся по величине энергии на величину кванта. Из него непосредственно следует формула Планка для среднего числа квантов $\langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle$.

Приведенные соотношения показывают, что квантовый характер шума, отображаемый ненулевым значением коммутатора, одновременно учитывает, помимо динамического характера взаимодействия, т. е. возможности обратного влияния ДА на себя посредством шума (см. п. 6.3 Главы 6), также и ненулевую величину кванта $\hbar\omega$ и, соответственно, асимметрию процессов поглощения и испускания, отображаемых в выражении (8.18), членами $n_k = \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle$, $n_k + 1 = \langle \hat{a}_k \hat{a}_k^+ \rangle$ соответственно.

8.2.1 Случай одночастотной прецессии

Преобразуем теперь выражение (8.4) для матрицы Q , подставив выражение для корреляционной матрицы стационарного шума в форме $\mathcal{K}(\tau_1, \tau_2) = \mathcal{K}(\tau)$, $\tau = \tau_2 - \tau_1$ и выполнив замену переменных: $\tau_1, \tau_2 \rightarrow \tau, s$, где $s = (\tau_1 + \tau_2)/2$. При этом соответствующая новая система координат также ортогональна, а для якобиана этого преобразования имеем $\partial(\tau_1, \tau_2)/\partial(\tau, s) = 1$. Область интегрирования представлена на рис. 8.2.

В этих переменных выражение (8.4) с учетом локализованности функции $\mathcal{K}(\tau)$ в узкой по сравнению с областью интегрирования области $\tau \sim \tau_c$ принимает вид

$$Q = \int_0^\infty d\tau \langle S_\sigma(s + \tau/2) \mathcal{K}_\xi(\tau) S_\sigma^T(s - \tau/2) \rangle_s, \quad (8.23)$$

где $\langle \rangle_s$ обозначает усреднение по s в интервале Δ , предполагающее, что включенные в $S_\sigma(t)$ динамические осцилляции происходят на масштабе времен τ_o , существенно меньших времени релаксации, так что можно выбрать Δ таким образом, чтобы выполнялось соотношение

$$\tau_o \ll \Delta \ll \tau_r. \quad (8.24)$$

Предположим, что временная динамика имеет вид осцилляций на одной частоте вида (3.23) с независимой от времени трехмерной матрицей поворотов вида

$$L_\sigma = \begin{pmatrix} 0 & \omega_1 & -\omega_2 \\ -\omega_1 & 0 & \omega_3 \\ \omega_2 & -\omega_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.25)$$

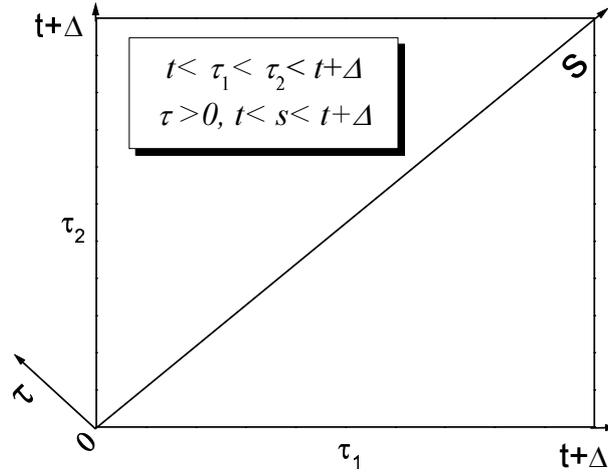


Рис. 8.2: Область интегрирования корреляционной функции в соотношении (7.5) в терминах переменных τ_1 , τ_2 и s , τ .

Соответствующая временная зависимость $S_\sigma(t) = \exp(L_\sigma t)$ задается согласно спектральному представлению (3.25) выражением

$$S_\sigma(t) = \sum_{k=1}^3 \exp(i\nu_k t) |\nu_k\rangle \langle \nu_k|, \quad (8.26)$$

где

$$\nu_3 = 0, \quad \nu_{1,2} = \pm\omega_0, \quad \omega_0 = (\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2)^{1/2}.$$

Подставляя это разложение в выражение (8.23) и выполняя усреднение по s , с учетом обнуления комбинаций разночастотных сомножителей получаем выражение вида (8.8) с собственными векторами $|\lambda_k\rangle = |\nu_k\rangle$ и собственными значениями

$$\lambda_k = \langle \nu_k | \tilde{S}(\nu_k) | \nu_k \rangle, \quad (8.27)$$

где

$$\nu_3 = 0, \quad \nu_{1,2} = \pm\omega_0 \quad - \quad (8.28)$$

собственные частоты осцилляций, а

$$\tilde{S}(\nu) = \int_0^\infty d\tau \mathcal{K}_\xi(\tau) \exp(i\nu\tau) - \quad (8.29)$$

матричная односторонняя спектральная плотность шума. Таким образом, релаксационный оператор определяется значениями односторонней спектральной плотности шума на частотах (8.28). При этом спектральные плотности для положительных и отрицательных частот различны, что связано с учетом ненулевой энергии кванта и соответствующей асимметрией процесса поглощения–испускания. В частности, при $T = 0$ реальная часть спектральной плотности (8.29) на положительных частотах равна нулю. Именно это обстоятельство определяет ненулевое значение параметра w , определяемого первым из соотношений (8.11), поскольку с учетом выражений (8.27)

$$\operatorname{Re}(\lambda_1 - \lambda_2) \sim \operatorname{Re} \tilde{S}(-\omega_0) - \operatorname{Re} \tilde{S}(\omega_0) = \pi \tilde{C}(\omega_0).$$

Из теории излучения ДА рассматриваемой в Главы 9 следует, что, с учетом выражения (8.11) для релаксационных параметров, этот факт отражает преобладание испускания над поглощением на температурно независимую величину, описывающую спонтанное испускание кванта $\hbar\omega_0$, которое приводит к установлению температурного равновесия с резервуаром. Если использовать классическое описание шума, то $w = 0$ и равновесным состоянием является в соответствии с формулами (8.12) для собственных векторов состояние $\langle 0| = (1, 0)$, соответствующее матрице плотности $\hat{\rho} = \hat{I}/2$ с нулевой разностью населенностей, т. е. с бесконечной температурой T . В соответствии с общим выражением

$$\langle 0| = \left(1, -\frac{w}{\gamma} \langle \lambda_3| \right) \rightarrow \frac{1}{2} (\hat{I} - \frac{w}{\gamma} \langle \lambda_3| \vec{\sigma})$$

безразмерный параметр w/γ определяет распределение населенности между состояниями $(\hat{I} \pm \langle \lambda_3| \vec{\sigma})/2$, одно из которых соответствует положительной температуре $T = +0$, $1/T = +\infty$, а другое — отрицательной температуре $T = -0$, $1/T = -\infty$. В частном случае значений $\omega_1 = \omega_2 = 0$, $\omega_3 = \omega_{12}$ в выражении (8.25) для матрицы прецессии, которая в этом случае описывает свободную прецессию изолированного атома, указанные состояния соответствуют верхнему уровню ($\pm = +$) и нижнему ($\pm = -$) атома. По этой причине параметр w называется *параметром накачки*. Из условия сохранения положительности супероператора следует ограничение области изменения параметра накачки

$$|w| \leq \gamma.$$

В определенных условиях он может быть отрицателен и, соответственно, определять равновесные состояния с отрицательной температурой, т. е. состояния с *инверсной населенностью*. Параметры γ , Γ называются, соответственно, скоростью *продольного* и *поперечного* затухания. Продольное затухание описывает релаксацию неосциллирующих переменных, соответствующих линейным комбинациям векторов $|0\rangle$, $|3\rangle$, а поперечное — релаксацию осциллирующих переменных с частотами $\pm\omega_0$, описываемых линейными комбинациями векторов $|1, 2\rangle$. Для свободного атома продольное затухание описывает релаксацию населенностей, а поперечное — затухание поляризации. Параметр Λ описывает *частотное смещение*, которое связано с реакцией резервуара на возмущение атомом.

8.2.2 Случай двухчастотной прецессии

Предположим теперь, что временная динамика имеет вид осцилляций на одновременно на двух частотах и описывается суперпозицией двух временных преобразований вида (3.23)

$$S_\sigma(t) = \exp(L_\Omega t) \exp(L_0 t) \quad (8.30)$$

с независимыми от времени трехмерными матрицами поворотов:

$$L_0 = \begin{pmatrix} 0 & \omega_1 & -\omega_2 \\ -\omega_1 & 0 & \omega_3 \\ \omega_2 & -\omega_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_\Omega = \begin{pmatrix} 0 & \Omega_1 & -\Omega_2 \\ -\Omega_1 & 0 & \Omega_3 \\ \Omega_2 & -\Omega_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.31)$$

Применяя для представления этого преобразования дважды разложение (8.26), предполагая, что частоты ω_0 и Ω имеют различный порядок, так что их комбинация $\omega_0 - \Omega$ не

мала, после повторения примерно тех же выкладок, из которых следует представление матрицы Q в форме (8.8), нетрудно получить соответствующее обобщение результата (8.27):

$$\lambda_k = \sum_{i=1}^3 |\langle \delta_k | \nu_i \rangle|^2 \langle \nu_i | \tilde{S}(\delta_k + \nu_i) | \nu_i \rangle, \quad (8.32)$$

где δ_k обозначает соответствующие собственные числа оператора прецессии L_Ω : $\delta_3 = 0$, $\delta_{1,2} = \pm\Omega$, где $\Omega = (\Omega_1^2 + \Omega_2^2 + \Omega_3^2)^{1/2}$. Частота Ω здесь условно может быть названа частотой нутаций, в то время как ω_0 частотой прецессии. Таким образом, при двухчастотной динамике ДА релаксационный супероператор выражается через односторонние спектральные плотности шумов на всех возможных комбинациях частот прецессии и нутации:

$$\omega = 0, 0 \pm \Omega, \pm\omega_0, \omega_0 \pm \Omega, -\omega_0 \pm \Omega. \quad (8.33)$$

8.3 Релаксация свободного двухуровневого атома

Для свободного атома источником шумов является свободное поле электромагнитного вакуума, которое в квантовой теории не равно нулю даже в отсутствие источников вследствие ненулевых коммутаторов поля и, соответственно, наличия вакуумных флуктуаций. Гамильтониан взаимодействия электромагнитного поля и атома имеет вид $-\hat{\mathbf{d}}\hat{\mathbf{E}}_0$, где $\hat{\mathbf{d}}$ описывает оператор дипольного момента атома, а $\hat{\mathbf{E}}_0$ — оператор вакуумного электромагнитного поля. С учетом нелокальности распределения заряда в атоме это выражение следует записывать в виде пространственного интеграла, который для двухуровневого атома (ДА) имеет вид:

$$\hat{\mathcal{H}}_\xi = \int \mathbf{d}_{12}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{E}}_0(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \cdot \hat{\sigma}_1(t). \quad (8.34)$$

Здесь $\hat{\mathbf{E}}_0(\mathbf{r}, t)$ — зависящий от времени оператор напряженности вакуумного электромагнитного поля в точке \mathbf{r} ; $\hat{\sigma}_1(t)$ — оператор комплексной амплитуды квантового дипольного момента атома; $\mathbf{d}_{12}(\mathbf{r})$ — плотность матричного элемента дипольного момента, определяемая формулой

$$\mathbf{d}_{12}(\mathbf{r}) = \sum e_k(\psi_2, \mathbf{r}\delta(\hat{\mathbf{r}}_k - \mathbf{r})\psi_1), \quad (8.35)$$

где $e_k, \hat{\mathbf{r}}_k$ — заряды и операторы координат атомных частиц, ψ_1, ψ_2 — волновые функции атома.

Сравнивая выражения (8.1) и (8.34) для гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_\xi$, получаем конкретный вид шумов $\hat{\vec{\xi}} = (\hat{\xi}, 0, 0)$, где

$$\hat{\xi}(t) = -\frac{2}{\hbar} \int \mathbf{d}_{12}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{E}}_0(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (8.36)$$

в представлении взаимодействия с учетом невозмущенной динамики переменных резервуара. Это выражение описывает оператор случайной силы, действующей со стороны электрического поля вакуума на обобщенную координату атома, описываемую матрицей $\hat{\sigma}_1(t)$. Для выполнения конкретных расчетов в (8.36) удобно использовать каноническое Фурье-представление операторов электромагнитного поля [20] в виде:

$$\hat{\mathbf{E}}_0(\mathbf{r}, t) = i \int \sqrt{\frac{\hbar\omega}{4\pi^2}} \sum_{\lambda=1,2} \mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k}) [\hat{a}_\lambda(\mathbf{k})e^{-i\omega t+i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{k})e^{i\omega t-i\mathbf{k}\mathbf{r}}] d\mathbf{k}. \quad (8.37)$$

Здесь \mathbf{k} — волновой вектор полевого осциллятора, $\omega = ck$ — соответствующая частота; \mathbf{e}_λ — векторы поляризации волны, ортогональные к \mathbf{k} ; $\hat{a}_\lambda(\mathbf{k})$ — операторы уничтожения квантов, используемые здесь в континуальном представлении, в котором они размерны² в соответствии с коммутационными соотношениями

$$\hat{a}_\lambda(\mathbf{k})\hat{a}_\lambda^+(\mathbf{k}') - \hat{a}_\lambda^+(\mathbf{k}')\hat{a}_\lambda(\mathbf{k}) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') . \quad (8.38)$$

Соответственно, для расчета корреляционной функции следует исходить из формулы

$$\langle \hat{a}_\lambda^+(\mathbf{k})\hat{a}_\lambda(\mathbf{k}') \rangle = n_\lambda(\omega)\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') , \quad (8.39)$$

где $n_\lambda(\omega)$ есть среднее число квантов для осцилляторов с частотой ω . Для теплового равновесия оно задается формулой Планка

$$n_\lambda(\omega) = (e^{\hbar\omega/kT} - 1)^{-1} . \quad (8.40)$$

При $T = 0$ из соотношения (8.21) следует равенство $\tilde{K} = |\tilde{C}|/2$. Это означает, что флуктуации являются вакуумными и имеют чисто квантовое происхождение. При рассмотрении релаксации ДА в оптическом диапазоне это приближение справедливо для температур вплоть до $\sim 10^4 K$. Соответствующий формулам (8.36), (8.37) вид спектральной плотности $\tilde{C}(\omega)$ для ДА представлен на рис. 8.3.

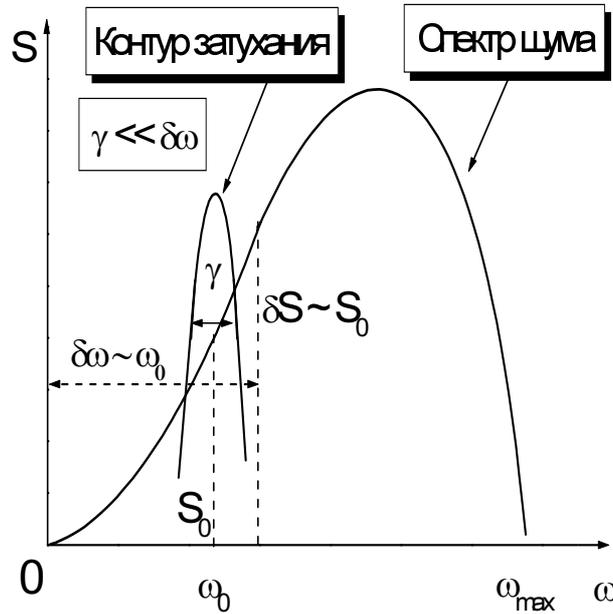


Рис. 8.3: Спектральная плотность вакуумного шума, действующего на ДА.

В области низких частот зависимость имеет вид $\sim \omega^3$ в соответствии с плотностью числа полевых осцилляторов $\sim \omega^2$, определяющей также и частотную зависимость в известной формуле Релея–Джинса. Эта зависимость сохраняется до диапазона высоких частот $\omega_{\max} \sim 10^{18} \text{ сек}^{-1}$, начиная с которых начинается спадание до нуля, обусловленное распределенностью дипольного момента, что приводит к обрезанию высших

²Это означает, что они описывают операторы порождения-уничтожения отдельного осциллятора с множителем, равным квадратному корню из плотности числа осцилляторов в \mathbf{k} -пространстве

частот, превосходящих обратное время пробега световой волны через атом. Область частот, существенных для взаимодействия с атомом, лежит в окрестности его резонансной частоты $\omega_0 = \omega_{12}$, показанной на рис. 8.3. В этой области ширина участка постоянства спектральной плотности шума оценивается по порядку величины самой величиной ω_{12} , а ее обратное значение и есть эффективное время корреляции радиационного шума в ДА:

$$\tau_c \sim \omega_{12}^{-1}. \quad (8.41)$$

Очевидно, что эта величина существенно больше обратной ширины всей кривой, которая не имеет значения для процессов релаксации, протекающих на существенно больших масштабах времен $\tau_r = \gamma^{-1}$, где

$$\gamma \ll \omega_{12}. \quad (8.42)$$

Последнее соотношение и есть условие марковости для процессов радиационного затухания свободного ДА [17], проверка которого может быть выполнена после расчета релаксационного оператора.

Супероператор временной динамики свободного ДА определяется собственным гамильтонианом $\hbar\omega_{12}\hat{\sigma}_3$, которому соответствует лиувиллиан (8.25) и спектральное представление супероператора собственной динамики в форме (3.25) с частотами $\omega_{1,2} = 0$, $\omega_3 = \omega_{12}$, $\omega_0 = \omega_{12}$ и собственными векторами

$$|\nu_3\rangle = |\hat{\sigma}_3\rangle, \quad |\nu_{1,2}\rangle = (|\hat{\sigma}_1\rangle \pm i|\hat{\sigma}_2\rangle)/\sqrt{2}. \quad (8.43)$$

В соответствии с видом гамильтониана взаимодействия (8.34) вакуумный шум имеет всего одну составляющую $\hat{\xi}_1$, а соответствующая корреляционная матрица (6.4) имеет вид

$$\mathcal{K}_\xi(\tau) = \mathcal{K}_1(\tau) |\hat{\sigma}_1\rangle \langle \hat{\sigma}_1|. \quad (8.44)$$

Из выражения (8.27) получаются следующие значения для параметров λ_k , определяющих, в свою очередь, в соотношении (8.11) параметры релаксационного оператора (8.13), (8.14):

$$\lambda_k = \langle \nu_k | |\hat{\sigma}_1\rangle \langle \hat{\sigma}_1 | | \nu_k \rangle \tilde{S}(\nu_k),$$

где в соответствии с определением односторонней спектральной плотности (8.29) в данном случае

$$\tilde{S}(\nu) = \int_0^\infty d\tau \mathcal{K}_1(\tau) \exp(i\nu\tau). \quad (8.45)$$

После учета конкретного вида (8.43) собственных векторов оператора прецессии получаем

$$\lambda_3 = 0, \quad \lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \tilde{S}(\pm\omega_{12}). \quad (8.46)$$

Параметры результирующей релаксационной матрицы (8.14), принимающей в данном случае форму

$$L_r = \begin{pmatrix} 0 & -w & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\gamma/2 & \Lambda \\ 0 & 0 & -\Lambda & -\gamma/2 \end{pmatrix}, \quad (8.47)$$

с учетом представления корреляционной матрицы соотношениями (8.19), (8.20) имеют вид:

$$w = \frac{\tilde{C}(\omega_{12})}{2}, \quad \gamma = \frac{\tilde{C}(\omega_{12})}{2} \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \omega_{12}}{kT} \right), \quad \Lambda = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{\tilde{C}(\omega)}{2} \frac{d\omega}{\omega - \omega_{12}}. \quad (8.48)$$

Здесь символ \mathcal{P} обозначает интегрирование в главном смысле. При этом на основе выражений (8.36) – (8.38) в дипольном приближении, когда интегрирование по координатной зависимости плотности дипольного момента $\mathbf{d}(\mathbf{r})$ при расчете его преобразования Фурье дает интегральный дипольный момент перехода \mathbf{d}_{12} , получаем

$$\frac{1}{2} \tilde{C}(\omega_{12}) = \frac{4}{3} \frac{d_{12}^2 \omega_{12}^3}{\hbar c^3}.$$

Это и есть хорошо известное выражение для скорости радиационного распада γ двухуровневого атома.

При $T = 0$ из (8.48) получаем $w = \gamma$, что определяет в качестве равновесного состояния нижний энергетический уровень. Параметр Λ в данном случае описывает радиационный лэмбовский сдвиг ДА. Он аналогичен хорошо известному в теории колебаний частотному смещению гармонического осциллятора, взаимодействующего с одним или набором осцилляторов. В расчетах конкретных эффектов можно его считать априори включенным в частоту атомного перехода ω_{12} . Параметр $\gamma/2$ есть минимальное значение скорости поперечного затухания свободного ДА, совместимая с его затуханием со скоростью γ к нижнему энергетическому состоянию при учете условия положительности преобразования.

Смысл полученного оператора очевиден после применения матрицы L_r^T к матрице плотности $\langle \hat{\rho} | = (1, w_3, w_1, w_2)$. Параметры Λ описывают осцилляции недиагонального элемента матрицы плотности ρ_{12} (и, соответственно, дипольного момента), описываемого векторными элементами w_1, w_2 . Они дают просто сдвиг исходной частоты резонанса ω_{12} , обусловленный взаимодействием с вакуумным электромагнитным полем — это основная составляющая так называемого лэмбовского сдвига атомной частоты [6]. Параметры $\gamma/2$ описывают затухание недиагонального элемента (дипольного момента). Верхняя левая угловая 2×2 -подматрица

$$L_{\parallel} = \begin{pmatrix} 0 & -w \\ 0 & -\gamma \end{pmatrix} \quad (8.49)$$

в (8.47) описывает релаксацию диагональных элементов, то-есть населенностей уровней. Применяя L_{\parallel} к кет-вектору $|\hat{n}(t)\rangle$ с компонентами $n_0(t), n_3(t), 0, 0$, который описывает оператор разности населенностей уровней $n_2 - n_1$ в момент времени t , получаем кинетическое уравнение в виде

$$\frac{d}{dt} n_0 = -w n_3, \quad \frac{d}{dt} n_3 = -\gamma n_0.$$

Решая его и возвращаясь к операторам, получаем временную зависимость оператора разности населенностей

$$\hat{n}(t) = \exp(-\gamma t) \hat{\sigma}_3 - \frac{w}{\gamma} [1 - \exp(-\gamma t)] \hat{I}. \quad (8.50)$$

Его начальное значение, в соответствии с определением, есть $\hat{\sigma}_3$, а конечное описывается единичным оператором с множителем $-w/\gamma$, определяющим стационарную разность населенностей.

Стационарная разность населенностей описывается собственным вектором $\langle \hat{\rho}_{st} | = (1, w_3, 0, 0)$ матрицы (8.47), соответствующим нулевому собственному значению. Соответствующие населенности уровней описываются соотношениями

$$\bar{n}_1 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{w}{\gamma} \right), \quad \bar{n}_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{w}{\gamma} \right), \quad (8.51)$$

которое, как легко убедиться в соответствии с выражениями (8.48) для параметров, соответствует больцмановскому отношению вероятностей

$$\bar{n}_2/\bar{n}_1 = \exp(-\hbar\omega_{12}/kT),$$

что аналогично случаю гармонического осциллятора. Оно дает нулевую населенность \bar{n}_2 при нулевой температуре и $\bar{n}_2 = 1/2$ при температуре, стремящейся к бесконечности, и совпадает с формулой распределения Ферми с химическим потенциалом $\mu = 0$:

$$\bar{n}_1 = \left[\exp\left(\frac{-\hbar\omega_{12}}{kT}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad \bar{n}_2 = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{12}}{kT}\right) + 1 \right]^{-1}.$$

Здесь энергия фермиевской частицы считается равной $-\hbar\omega_{12}$ в состоянии 1 и $\hbar\omega_{12}$ в состоянии 2. Это распределение отличается от стандартного распределения Ферми $\{\exp[(\varepsilon_k - \mu)/kT] + 1\}^{-1}$ для электрона, заполняющего атомные состояния 1, 2, у которых разность энергий $\varepsilon_2 - \varepsilon_1$ равна $\hbar\omega_{12}$ и, соответственно, сами значения энергий равны $\pm\hbar\omega_{12}/2$ и $\mu = 0$. Это расхождение означает, что релаксационные процессы, ответственные за установление распределения Ферми для электронных систем, рассматриваемых в статистической физике, качественно отличаются от радиационного затухания в ДА. Для них резонансные процессы с большими частотами перехода не учитываются, что вполне оправдано в представляющем интерес диапазоне значений параметра $\hbar\omega_{12}/kT$.³

8.4 Супероператор фазовой релаксации

Наряду с радиационным затуханием для релаксации ДА в оптике во многих случаях существенны механизмы, приводящие к случайной модуляции частоты атомного перехода ω_{12} в соответствии с преобразованием невозмущенного гамильтониана атома

$$\frac{\hbar}{2}\omega_{12}\hat{\sigma}_3 \rightarrow \frac{\hbar}{2}(\omega_{12} + \hat{\xi}_{ph})\hat{\sigma}_3,$$

где $\hat{\xi}_{ph}$ обозначает операторную переменную резервуара, описывающую флуктуации частоты ДА и определяемую соответствующим механизмом дефазировки. В шумовом гамильтониане (8.1) дефазировка этого типа представлена компонентой $\hat{\xi}_3 = \hat{\xi}_{ph}$ вектора шумов $\hat{\xi}$. Когда этот шум является единственным, гамильтониан взаимодействия (8.1) имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}_{\xi} = \frac{\hbar}{2}\hat{\xi}_3\hat{\sigma}_3. \quad (8.52)$$

³Аналогия ДА и Ферми-систем может быть прослежена более подробно с учетом алгебраической связи операторов атомных переходов с операторами порождения—уничтожения Ферми-частиц [20].

Механизм релаксации такого типа реализуется, например, (а) в примесных ДА (или молекулах) в твердых телах за счет взаимодействия с фоновыми колебаниями; (б) в атомах газа, испытывающих столкновения с другими атомами. В первом случае процесс в ДА носит диффузионный характер, в то время как в последнем случае он имеет скачкообразную природу. В зависимости от конкретных параметров реального шума процесс в ДА может быть как марковским, так и немарковским, и описываться моделью диффузионный или ступенчатого процесса.

8.4.1 Марковская упругая дефазировка

Рассчитаем сначала марковский супероператор \mathcal{L}_{ph} , исходя из общей формулы (8.3) для процессов диффузионного типа. В случае столкновительного уширения в газах в этом приближении может рассматриваться только вклад, обусловленный дальними столкновениями, приводящими к малому сбою фазы $\Delta\varphi \ll 1$. В диффузионном приближении в (8.5) следует положить

$$\mathcal{K}_{\xi}(t) = \mathcal{K}_{\text{ph}}(t)e_{\text{ph}}, \quad (8.53)$$

где $\mathcal{K}_{\text{ph}}(t) = \langle \hat{\xi}_{\text{ph}}(0)\hat{\xi}_{\text{ph}}(t) \rangle = \mathcal{K}_{\text{ph}}^*(-t)$ — скалярная корреляционная функция; e_{ph} — 3×3 -матрица с единственным ненулевым элементом $(e_{\text{ph}})_{33} = 1$. При этом в (8.4) в качестве $S_{\sigma}(t)$ можно подставить просто 1, входящую в качестве матричного элемента в (8.26) и отображающую тот простой факт, что в представлении взаимодействия для невозмущенного движения в виде свободной прецессии матрица $\hat{\sigma}_3$ не зависит от времени. Соответственно, из (8.4) получаем матрицу Q в виде

$$Q = \tilde{S}_{\text{ph}}(0)e_{\text{ph}},$$

где

$$\tilde{S}_{\text{ph}}(\omega) = \int_0^{\infty} K_{\text{ph}}(t)e^{i\omega t} dt -$$

спектральная плотность фазовых флуктуаций. С использованием приведенного выражения для матрицы Q из (8.3) получаем символическое представление лиувиллиана, описывающего чисто фазовую релаксацию:

$$\mathcal{L}_{\text{ph}} = -\Gamma_{\text{ph}}\mathcal{J}_3, \quad (8.54)$$

где

$$\Gamma_{\text{ph}} = \mathcal{R}e\tilde{S}_{\text{ph}}(0) - \quad (8.55)$$

скорость упругой дефазировки,

$$\mathcal{J}_3 = \frac{1}{2}(1 - \hat{\sigma}_3 \odot \hat{\sigma}_3) - \quad (8.56)$$

безразмерный супероператор, единичный по недиагональным матрицам Паули $\hat{\sigma}_{1,2}$ и нулевой по $\hat{\sigma}_3$:

$$\mathcal{J}_3\hat{\sigma}_{1,2} = \hat{\sigma}_{1,2}, \quad \mathcal{J}_3\hat{\sigma}_3 = 0. \quad (8.57)$$

В матричном представлении

$$\mathcal{L}_{\text{ph}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Gamma_{\text{ph}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Gamma_{\text{ph}} \end{pmatrix}. \quad (8.58)$$

При этом супероператору \mathcal{J}_3 отвечает единичная матрица в двумерном подпространстве, соответствующем осциллирующим переменным $\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2$, т. е. \mathcal{J}_3 есть идемпотентный супероператор: $\mathcal{J}_3^2 = \mathcal{J}_3$. Супероператор \mathcal{L}_{ph} в обычных условиях аддитивно складывается с рассчитанным ранее супероператором \mathcal{L}_r радиационного затухания свободного атома. В последнем просто следует затухание недиагональных элементов описывать вместо параметра $\gamma/2$ параметром фазового ("поперечного") затухания

$$\Gamma = \gamma/2 + \Gamma_{\text{ph}}. \quad (8.59)$$

Благодаря относительной простоте гамильтониана, описывающего упругую дефазировку, расчет соответствующего супероператора удастся выполнить аналитически не только для процессов диффузионного типа, но и для скачкообразных процессов, когда диффузионное приближение (6.14) неприменимо. В этом случае следует исходить из самой общей марковской формулы (5.3) Главы 5, которая для импульсного шума представляется в виде усреднения и предельного перехода (6.12) Лекции 6. Здесь мы ограничимся случаем классического шума $\hat{\xi}_{\text{ph}}(t)$, что соответствует пренебрежению динамическим характером взаимодействия и исключает возможность учета самодействия ДА через посредство шумовой подсистемы. Для классического шума, подставляя в (6.12) гамильтониан взаимодействия (6.12), получаем

$$\tilde{S}(t, t + \Delta) = \langle \exp \left[\frac{i}{2} \int_t^{t+\Delta} \hat{\xi}_{\text{ph}}(\tau) d\tau \mathcal{S}_3 \right] \rangle, \quad (8.60)$$

где супероператор

$$\mathcal{S}_3 = \frac{1}{2} [\hat{\sigma}_3, \odot] \quad (8.61)$$

связан с идемпотентным супероператором (8.56) соотношением $\mathcal{J}_3 = \mathcal{S}_3^2$. Использование алгебраических соотношений такого рода для основных динамических супероператоров позволяет выполнять расчеты непосредственно на уровне символического представления, не прибегая к представлению матрицами.

Выделяя в мнимой экспоненте (8.60) четную и нечетную части и учитывая, что функция $\cos(x) - 1$ содержит только четные степени разложения по x , начиная со второй, из (8.60) получаем после вычета 1, деления на Δ и перехода к пределу $\Delta \rightarrow 0$:

$$\mathcal{L}_{\text{ph}} = -\Gamma_{\text{ph}} \mathcal{J}_3 + i \Lambda_{\text{ph}} \mathcal{S}_3, \quad (8.62)$$

где

$$\Gamma_{\text{ph}} = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \langle 1 - \cos \left[\int_t^{t+\Delta} \xi_{\text{ph}}(\tau) d\tau \right] \rangle - \quad (8.63)$$

скорость дефазировки,

$$\Lambda_{\text{ph}} = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \langle \sin \left[\int_t^{t+\Delta} \xi_{\text{ph}}(\tau) d\tau \right] \rangle - \quad (8.64)$$

частотное смещение. Для импульсного случайного процесса с плотность потока импульсов β (sec^{-1}) и длительностью импульсов $\tau_p \ll 1/\beta$ из этих выражений получаем

$$\Gamma_{\text{ph}} = \beta(1 - \langle \cos \varphi \rangle),$$

$$\Lambda_{\text{ph}} = \beta \langle \sin \varphi \rangle.$$

Здесь $\varphi = \int \xi_{\text{ph}}(\tau) d\tau$ — случайный набег фазы при взаимодействии с одним импульсом, который в случае столкновительного уширения в газах соответствует одному столкновению. Таким образом, структура релаксационного супероператора для столкновительного уширения совпадает со структурой этого супероператора в диффузионном приближении и отличие сводится к разным аналитическим выражениям для параметров.

8.4.2 Немарковская упругая дефазировка свободного ДА

Рассчитаем переходной супероператор, определенный соотношениями (4.5) Главы 4 без предположения о марковском характере процесса, но предполагая гауссовский характер дефазировочных флуктуаций. С учетом вида гамильтониана взаимодействия (8.52) и того, что для свободного атома оператор $\hat{\sigma}_3$ не зависит от времени, фигурирующий в выражениях (4.5) оператор временной эволюции имеет вид

$$U_{\xi}(t) = T \exp \left[-\frac{i}{2} \int_0^t \hat{\xi}_3(\tau) \hat{\sigma}_3 d\tau \right]. \quad (8.65)$$

Расчет данного хронологически упорядоченного выражения может быть выполнен с использованием формулы Бейкера-Хаусдорфа для операторов с числовым коммутатором C :

$$\exp(\hat{f}) \exp(\hat{g}) = \exp(\hat{f} + \hat{g} + C/2).$$

С ее помощью, отождествляя операторы \hat{f}, \hat{g} с $-(i/2)\hat{\xi}_3(\tau_{1,2})\hat{\sigma}_3$, нетрудно привести хронологически упорядоченную экспоненту к виду экспоненты от интеграла:

$$U_{\xi}(t) = \exp \left[-\frac{i}{2} \int_0^t \hat{\xi}_3(\tau) \hat{\sigma}_3 d\tau \right] \exp \left[-\frac{1}{8} \int_0^t d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 C(\tau_2, \tau_1) \right],$$

где $C(\tau_2, \tau_1) = [\hat{\xi}_3(\tau_2), \hat{\xi}_3(\tau_1)]$ — коммутатор шумовых переменных, являющийся числовым в соответствии с предположением гауссовости шумов. Подставляя это выражение в определение переходного супероператора (4.5), после очевидного сокращения неоператорных сомножителей, получаем

$$\mathcal{S}(t) = \langle \exp\{-i\hat{\varphi}[\hat{\sigma}_3, \odot]\} \rangle_{\text{R}},$$

где $\hat{\varphi} = \int_0^t \hat{\xi}_3(\tau) d\tau/2$ — набег флуктуаций фазы колебаний атомного перехода за время t . Присутствие в этом выражении одного не зависящего от времени супероператора не вносит в расчет никаких осложнений, и при выполнении усреднения с ним можно обращаться как с числовым множителем, так же как и с оператором фазы (алгебра функций одного оператора или набора коммутирующих операторов эквивалентна алгебре функций соответствующих числовых переменных). Поэтому, используя известное правило усреднения экспоненты от гауссовской случайной величины с нулевым средним значением $\langle \exp(\varphi) \rangle = \exp(\langle \varphi^2 \rangle / 2)$ и учитывая соотношение $[\hat{\sigma}_3, \odot]^2 = 4\mathcal{J}_3$, получаем

$$\mathcal{S}(t) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t K(\tau_1, \tau_2) d\tau_1 d\tau_2 \mathcal{J}_3 \right\}. \quad (8.66)$$

При этом для стационарного шума корреляционная матрица имеет вид функции разности аргументов $K(\tau_1, \tau_2) = K(\tau)$, $\tau = \tau_2 - \tau_1$.

При $t \gg \tau_c$ нетрудно убедиться, что двойной интеграл в выражении пропорционален t и равен

$$t \int_{-\infty}^{+\infty} K(\tau) d\tau,$$

а переходной супероператор (8.66) имеет асимптотический вид

$$\mathcal{S}(t) = \exp(-\Gamma_{\text{ph}} \mathcal{J}_3 t) = \mathcal{J}_n \oplus e^{-\Gamma_{\text{ph}} t} \mathcal{J}_t. \quad (8.67)$$

Здесь пара единичных супероператоров $\mathcal{J}_{n,t}$ отвечает единичным преобразованиям в подпространстве диагональных и недиагональных 2×2 -матриц. Данный результат совпадает с переходным супероператором $\exp(\mathcal{L}_t)$, соответствующим марковской теории п. 8.4, поскольку на больших временах затухание любого процесса с конечным временем корреляции шума имеет экспоненциальный характер. При этом затухание Γ_{ph} может быть представлено через максимум корреляционной функции $K(0)$ и ее эффективную ширину $\hat{\tau}_c$ в виде произведения

$$\Gamma_{\text{ph}} = K(0) \tau_c. \quad (8.68)$$

Экспоненциальный закон для немарковского процесса справедлив лишь для

$$t \gg \tau_c. \quad (8.69)$$

На малых временах $t \ll \tau_c$ экспоненциальное затухание недиагональных матриц сменяется законом вида

$$\mathcal{S}_t(t) = \exp\left[-\frac{1}{2} K(0) t^2\right]. \quad (8.70)$$

Если среднее значение шума не равно нулю, то, помимо затухания, он порождает еще и детерминированные осцилляции с соответствующим дополнительным частотным сдвигом $\delta\omega$ относительно частоты ω_{12} невозмущенной прецессии. При малых $t \ll 1/\sqrt{K(0)}$ затухание становится пренебрежимым, в то время как осцилляции могут быть существенны, если $\delta\omega \geq \sqrt{K(0)}$. В то же время по марковской теории затухание определяется показателем $K(0)\tau_c t$. При $t \ll \tau_c$ предсказываемое марковской теорией затухание в τ_c/t больше, чем истинный в формуле (8.70). Описанные закономерности в самом грубом приближении можно охарактеризовать как (а) “потеря стохастичности” на малых временах меньших времени корреляции и (б) “насыщение затухания” при увеличении интенсивности шума, приводящем к переходу от марковского процесса к немарковскому. Последний эффект поясняется графиками, приведенными на рис. 8.4.

Для процессов с большими по сравнению со временем корреляции временами затухания точное значение затухания и марковское предсказание совпадают для всех времен. Для очень же интенсивной релаксации точное значение затухания на временах порядка времен корреляции существенно меньше марковского. При этом даже в немарковском случае, как это можно видеть из случая $\tau_r = \tau_c$, при больших временах t затухание, как это и было показано выше, носит экспоненциальный характер: приведенное на рис. 8.4 отношение стремится к константе, что означает совпадение скоростей марковского и немарковского затухания.

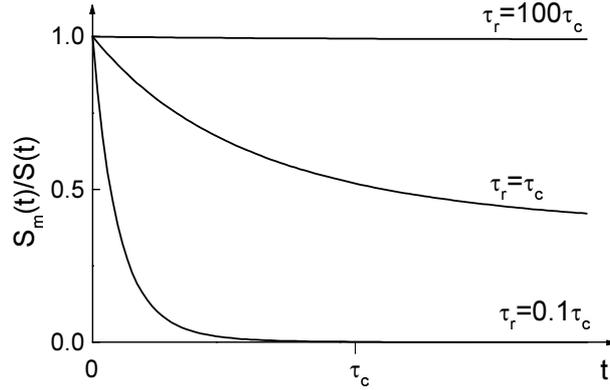


Рис. 8.4: Проявление немарковости в зависимости от времени отношения затухания $S_m(t)$, предсказанного марковским расчетом, к затуханию $S(t)$, предсказываемому точной формулой, для случая экспоненциальной корреляционной функции шума $K(\tau)$ при различных значениях времени релаксации τ_r .

8.4.3 Связь с теорией квантового измерения

Рассмотрим стационарное состояние атома в условиях, когда действует только рассмотренный механизм упругой релаксации. Этот случай вполне физичен и соответствует реальному атому при наличии интенсивной упругой дефазировки, преобладающей по порядку величины над неупругим затуханием, $\Gamma \gg \gamma$. Тогда на временах $\Gamma^{-1} \ll t \ll \gamma^{-1}$ можно рассматривать квазиравновесные состояния, соответствующие $t \rightarrow \infty$ в супероператоре временной эволюции (8.67). В этой асимптотике получаем

$$\mathcal{S} = \mathcal{J}_n = \frac{1}{2}(\hat{I} + \sigma_3 \odot \sigma_3).$$

Соответственно, стационарное состояние атома отвечает полному затуханию поляризации и строгому сохранению переменных, связанных с населенностями $\hat{n}_1 = (\hat{I} - \hat{\sigma}_3)/2$, $\hat{n}_2 = (\hat{I} + \hat{\sigma}_3)/2$. Это преобразование состояния в точности соответствует тому, которое предполагается в так постулате квантового измерения, обсуждаемом в Главе 14, а именно, такому преобразованию, при котором чистые состояния с точно определенными населенностями неизменны, а конечное состояние есть смешанное состояние, составленное из состояний с точно определенными значениями населенностей, которые играют здесь роль измеряемых величин. Это смешанное состояние имеет вид

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 \mathcal{S} = \frac{1}{2}(\hat{I} + \sigma_3 \odot \sigma_3)\hat{\rho}_0.$$

Разлагая $\hat{\rho}_0$ по собственным векторам операторов числа квантов, т. е. по собственным уровням свободного атома в виде

$$\hat{\rho}_0 = \langle 1|\hat{\rho}_0|1\rangle|1\rangle\langle 1| + \langle 2|\hat{\rho}_0|2\rangle|2\rangle\langle 2| - \langle 1|\hat{\rho}_0|2\rangle|1\rangle\langle 2| - \langle 2|\hat{\rho}_0|1\rangle|2\rangle\langle 1|,$$

в результате получаем

$$\hat{\rho} = \mathcal{P}(1)|1\rangle\langle 1| + \mathcal{P}(2)|2\rangle\langle 2|, \quad (8.71)$$

где $\mathcal{P}(k) = \langle k | \hat{\rho}_0 | k \rangle$. В случае чистого начального состояния $\hat{\rho}_0 = |0\rangle\langle 0|$ имеем $\mathcal{P}(k) = |\langle k | 0 \rangle|^2$ в соответствии с интерпретацией Борна физического смысла квадрата модуля волновой функции.

Рассмотренный пример является лишь простейшей иллюстрацией процессов, моделирующих преобразование квантовомеханической редукции. Результаты Главы 10 позволяют таким же образом рассмотреть и менее тривиальные процессы редукции, возникающие при воздействии сильного лазерного поля, когда роль измеряемой переменной играет не населенность, а переменная, соответствующая оператору вращающего момента лазерного поля $\vec{\Omega} \hat{\sigma}$.

Глава 9

Кинетика и флуоресценция двухуровневого атома

9.1 Общие соотношения для двухуровневого атома

Результаты *Главы 8* для релаксационного супероператора ДА в свободном пространстве, описываемые формулами (8.47), (8.48), и формулами (8.55), (8.58) для марковско-го супероператора упругой дефазировки, позволяют рассчитать временную динамику и спектр флуоресценции как свободного ДА, т. е. в отсутствие внешнего поля, так и ДА в лазерном поле. В данной лекции рассматривается такой класс собственной динамики ДА, для которой справедливы указанные формулы для релаксационных параметров, не учитывающие возможную зависимость от внешнего поля, потенциально присутствующую в общем выражении для релаксационных параметров (8.11), определяемых в соответствии с выражениями (8.27), (8.32) спектральной матрицей шумов. Здесь мы будем полагать, что релаксационный супероператор определяется лишь одночастотной собственной прецессией ДА на частоте перехода ω_{12} , т. е. зависимость от параметров внешнего поля отсутствует.

Выясним, при каких условиях результаты расчетов, приведенных в п. п. (8.3), (8.4.1), могут быть использованы и в условиях действия лазерного поля с напряженностью

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_L \cos(\omega_L t + \varphi). \quad (9.1)$$

В этом случае гамильтониан ДА помимо собственной энергии и взаимодействия с резервуаром содержит и гамильтониан взаимодействия с лазерным полем, которому соответствует лиувиллиан

$$\mathcal{L}_\Omega = i\Omega_0 \cos(\omega_L t + \varphi) [\hat{\sigma}_1, \odot], \quad (9.2)$$

где

$$\Omega_0 = \frac{(\mathbf{E}_L \mathbf{d}_{12})}{\hbar} -$$

частота Раби. В случае точного резонанса она описывает частоту индуцированных полем осцилляций населенностей уровней n_1, n_2 . Это взаимодействие при расчете эволюционного супероператора может рассматриваться наряду с взаимодействием с шумами $\hat{\mathcal{H}}_\xi$ как малое на рассматриваемых временах $\Delta \gg \tau_c$, если оно удовлетворяет условию

$$\Omega_0 \tau_c \ll 1. \quad (9.3)$$

В этом случае дополнительные изменения динамики, связанные с данным взаимодействием, учитываются в расчетах наблюдаемых эффектов путем добавления супероператора (9.2) к релаксационному. Последний же рассчитывается с учетом только одночастотной динамической прецессии с собственной частотой ДА. При этом поле может быть довольно сильным — *насыщающим*, так что выполнено соотношение

$$\Omega_0 \tau_r \geq 1, \quad (9.4)$$

которое является выражением условия наблюдаемости осцилляций населенностей на фоне затухания с характерным временем релаксации τ_r . Поле, для которого выполнено обратное соотношение, называется *слабым*. Поскольку на временах релаксации связанные с ним изменения динамики малы, они могут учитываться с использованием теории возмущений по лазерному полю. Этот метод позволяет выполнять расчеты и без использования методов теории ОС 1001 [39].

Для расчета излучения атома следует исходить из стандартной формулы классической электродинамики [40] для напряженности поля, излучаемого диполем, с соответствующей заменой классических динамических переменных квантовыми операторами:

$$\hat{\mathbf{E}} = \frac{1}{c^2 R} [[\hat{\mathbf{d}} \times \mathbf{n}] \times \mathbf{n}], \quad (9.5)$$

где, соответственно, R обозначает расстояние до точки наблюдения, а \mathbf{n} — единичный вектор направления распространения поля. Выражая оператор дипольного момента через матричный элемент дипольного момента и матрицы Паули, для перехода с линейной поляризацией получаем $\hat{\mathbf{E}} = \mathbf{F}_{12} \hat{\sigma}_1$, где $\mathbf{F}_{12} = [[\mathbf{d}_{12} \times \mathbf{n}] \times \mathbf{n}] / c^2 R$. При этом с учетом узкополосного характера осцилляций оператора $\hat{\sigma}_1$ можно заменить вторую производную на $-\omega_{12}^2$ и исходить из выражения для излучаемого поля в виде

$$\hat{\mathbf{E}} = \mathbf{E}_{12} \hat{\sigma}_1, \quad (9.6)$$

$$\mathbf{E}_{12} = -\frac{\omega_{12}^2}{c^2 R} [[\mathbf{d}_{12} \times \mathbf{n}] \times \mathbf{n}]. \quad (9.7)$$

Для расчета когерентного отклика системы атомов, когда складываются средние значения полей вида (9.6), достаточно рассчитать среднее значение этого оператора путем его усреднения с помощью одномоментного переходного супероператора $\mathcal{S}(t)$. При этом спонтанное излучение, являющееся случайным процессом, не будет учтено. По аналогии с ролью классических корреляционных функций в расчете спектрального распределения энергии случайных процессов [41], оно, очевидно, содержится в квадратичной корреляционной функции

$$\mathcal{K}(\tau) = \mathbf{E}_{12} \mathbf{E}_{12}^T \langle \hat{\sigma}_1(t) \hat{\sigma}_1(t + \tau) \rangle,$$

где усреднение включает также сглаживание по самым быстрым осцилляциям операторов как функции момента времени t . Здесь, однако, для квантовой системы, для которой вследствие ненулевой величины энергии кванта $\hbar\omega_{12}$ процессы взаимодействия с другими системами характеризуются неравноправием поглощения и испускания, вопрос о том, какая именно информация извлекается прибором из корреляционной функции, требует специального рассмотрения путем анализа процесса поглощения квантов детекторами. Такой анализ был проделан Глаубером [23] и было показано, что в наблюдаемой

корреляционной функции операторы порождения и уничтожения¹ квантов двухуровневой системы

$$\hat{\sigma}^- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

описывающие, соответственно, переход с нижнего уровня на верхний и наоборот, должны быть *нормально* упорядочены. Это упорядочение отделяет процессы испускания от процессов поглощения. В результате наблюдаемые эффекты выражаются через нормально упорядоченную корреляционную функцию

$$\mathcal{K}(\tau) = \mathbf{E}_{12} \mathbf{E}_{12}^T \langle \hat{\sigma}^-(t) \hat{\sigma}^+(t + \tau) \rangle. \quad (9.8)$$

Здесь зависимость $\hat{\sigma}^\pm(t)$ описывает случайный процесс, т. е. включает как собственную динамику, так и шумовые флуктуации. Это выражение определяет спектральное распределение как когерентной, так и спонтанно излучаемой атомом энергии, поскольку средний квадрат случайной величины есть сумма квадрата среднего значения и среднего квадрата флуктуационного отклонения от среднего. С использованием представления многомоментного усреднения для марковского процесса с помощью многовременной условной матрицы плотности (5.17), (5.21) оно может быть записано в виде

$$\mathcal{K}(\tau) = \begin{cases} \mathbf{E}_{12} \mathbf{E}_{12}^T \langle \hat{\rho}_0 | \mathcal{S}(t) \otimes \mathcal{S}(t, t + \tau) \{ \hat{\sigma}_0^-(t) \otimes \hat{\sigma}_0^+(t + \tau) \}, & \tau > 0 \\ \mathbf{E}_{12} \mathbf{E}_{12}^T \langle \hat{\rho}_0 | \mathcal{S}(t + \tau) \otimes \mathcal{S}(t + \tau, t) \{ \hat{\sigma}_0^-(t) \otimes \hat{\sigma}_0^+(t + \tau) \}, & \tau \leq 0, \end{cases} \quad (9.9)$$

где $\hat{\sigma}_0^\pm(t)$ описывают невозмущенное движение, задаваемое соответствующим супероператором $\mathcal{S}_0(t)$. При этом отличие нижнего соотношения от верхнего состоит в том, что если в верхнем переходное распределение $\mathcal{S}(t, t + \tau)$ описывает усреднение по более позднему моменту времени $t + \tau$ второго сомножителя, в нижнем $\mathcal{S}(t + \tau, t)$ описывает усреднение по более позднему аргументу t первого сомножителя. При этом для стационарного процесса усреднение по более раннему моменту t или $t + \tau$ для стационарного процесса отображается заменой $\langle \hat{\rho}_0 | \rightarrow \langle 0 | = \langle \hat{\rho}_0 | \mathcal{S}(\infty)$ с последующим усреднением по стационарной матрице плотности, описываемой бра-вектором $\langle 0 |$.

При рассмотрении задач с внешним монохроматическим резонансным полем представление взаимодействия удобно применять в следующей форме. В качестве невозмущенного оператора временной эволюции удобно рассматривать гамильтониан собственной энергии атома с частотой атома, замененной на частоту лазерного поля ω_L , а остаток, выражающийся через частотную расстройку внешнего поля $\delta = \omega_L - \omega_{12}$, отнести к возмущению. Это соответствует записи гамильтониана в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_L + \hat{\mathcal{H}}_\Omega, \quad (9.10)$$

где

$$\hat{\mathcal{H}}_L = \frac{\hbar}{2} \omega_L \hat{\sigma}_3, \quad (9.11)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_\Omega = -\frac{\hbar}{2} \delta \hat{\sigma}_3 + \hbar \Omega_0 \cos(\omega_L t + \varphi) \hat{\sigma}_1.$$

¹Оператор $\hat{\sigma}_1(t)$ выражается в виде осциллирующей во времени линейной комбинации матриц Паули $\hat{\sigma}_{1,2}$, а последние, в свою очередь, выражаются в виде линейной комбинации вводимых здесь матриц $\hat{\sigma}^-$, $\hat{\sigma}^+$. Здесь индексы \pm соответствуют положительно и отрицательно частотным осцилляциям $\exp(\mp i\omega t)$ этих операторов в случае свободной прецессии и противоположны индексации матриц Паули $\hat{\sigma}_\pm$ [42].

В представлении взаимодействия, описываемом невозмущенным гамильтонианом (9.11), в гамильтониане $\hat{\mathcal{H}}_\Omega$ оператор $\hat{\sigma}_1$ зависит от времени по закону

$$\hat{\sigma}_1(t) = \hat{\sigma}_1 \cos(\omega_L t) + \hat{\sigma}_2 \sin(\omega_L t). \quad (9.12)$$

Поскольку эти осцилляции являются самыми быстрыми, то при расчете динамики, если только не интересоваться откликом на гармониках, все результаты представляются через гамильтониан взаимодействия ДА с лазерным полем, усредненный по времени:

$$\hat{\mathcal{H}}_\Omega = -\frac{\hbar}{2}\delta\hat{\sigma}_3 + \frac{1}{2}\hbar\Omega_0(\cos\varphi\hat{\sigma}_1 - \sin\varphi\hat{\sigma}_2). \quad (9.13)$$

Ему в базисе $\hat{I}, \hat{\sigma}_3, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2$ с учетом правила коммутации операторов квазиспина (3.6) соответствует лиувиллиан вида

$$L_\Omega = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Omega_1 & \Omega_2 \\ 0 & \Omega_1 & 0 & -\delta \\ 0 & -\Omega_2 & \delta & 0 \end{pmatrix}, \quad (9.14)$$

где компоненты $\Omega_1 = \Omega_0 \sin\varphi$, $\Omega_2 = \Omega_0 \cos\varphi$ учитывают фазу лазерного поля, от которой, очевидно, зависит фаза колебаний наведенного в атоме полем дипольного момента. Описанное приближение в теории резонансных процессов в ДС известно как *приближение вращающихся волн* (ПВВ). Выполненное усреднение по гамильтониану взаимодействия по осцилляциям лазерного поля эквивалентно его приближенной замене на гамильтониан взаимодействия

$$\hat{\mathcal{H}}_\Omega = H_0(\hat{\sigma}_1 \cos\varphi + \hat{\sigma}_2 \sin\varphi)$$

электронного спина с вращающимся магнитным полем, помимо которого в рассматриваемом гамильтониане взаимодействия диполь–лазерное поле содержатся еще и составляющие, осциллирующие с удвоенными частотами.

С учетом описанного представления динамики для расчета стационарного отклика представление корреляционной функции (9.9) можно преобразовать следующим образом. Во-первых, обобщенный лиувиллиан $L_I = L_r + L_\Omega$ имеет одно нулевое собственное значение $\lambda_0 = 0$, описывающее сохранение стационарного состояния, и три ненулевых λ_k с отрицательной вещественной частью, описывающих затухание к стационарному состоянию. При $t \rightarrow \infty$ поэтому имеем $\mathcal{S}(t) \rightarrow |0\rangle\langle 0|$, где $|0\rangle$, $\langle 0|$ описывают k -ый правые и левый собственные векторы при $k = 0$. Собственная динамика ДА задается соотношениями $\hat{\sigma}_0^\pm(t) = \hat{\sigma}^\pm \exp(\mp\omega_L t)$. С учетом этих соотношений и определений (5.12), (5.22) полупрямого произведения супероператоров получаем

$$\mathcal{K}(\tau) = \mathbf{E}_{12}\mathbf{E}_{12}^\top e^{-i\omega_L\tau} \sum_{k=0}^3 \begin{cases} e^{\lambda_k\tau}(\langle 0| \hat{\otimes} |k\rangle \langle k|)(\hat{\sigma}^- \otimes \hat{\sigma}^+), & \tau > 0 \\ e^{-\lambda_k\tau}(\langle 0| \hat{\otimes} |k\rangle \langle k|)(\hat{\sigma}^- \otimes \hat{\sigma}^+), & \tau \leq 0. \end{cases} \quad (9.15)$$

Здесь использовано векторное представление $\langle 0|$ матрицы стационарной матрицы плотности $\hat{\rho}$ матричное представление собственного проектора $\mathcal{P}_k = |k\rangle\langle k|$ переходного супероператора в выражениях $\hat{\rho} \hat{\otimes} \mathcal{P}_k$, $\hat{\rho} \hat{\otimes} \mathcal{P}_k$ для функционалов двухмоментного квантового распределения вероятностей, введенных ранее для произвольного n соотношениями (5.17), (5.21). Учтено также соотношение $\langle \hat{\rho}_0 | 0\rangle = 1$, очевидное с учетом того, что

собственный вектор $|0\rangle$ описывает просто инвариантный единичный оператор \hat{I} , а след матрицы плотности нормирован на единицу. Приведенные здесь соотношения задают необходимый математический аппарат для выполнения расчетов марковской динамики и флуоресценции ДА.

9.2 Равновесное состояние ДА в лазерном поле

В присутствии лазерного поля не более сильного, чем насыщающее, стационарное — равновесное — состояние атома описывается решением задачи

$$\langle 0| L_I = 0 \quad (9.16)$$

на определение левого нулевого собственного вектора лиувиллиана преобразования атомных переменных. Здесь динамика атома описывается в представлении взаимодействия с невозмущенным движением в виде свободной прецессии на частоте лазерного поля. В соответствии с п. 9.1 она описывается невозмущенным гамильтонианом (9.11) и в одночастотном представлении взаимодействия отображается преобразованием невозмущенной временной динамики (9.12) и дополняющего его соотношения

$$\hat{\sigma}_2(t) = \hat{\sigma}_2 \cos(\omega_L t) - \hat{\sigma}_1 \sin(\omega_L t), \quad (9.17)$$

в котором фаза лазерного поля φ положена равной нулю. Супероператор L_I , описывает возмущение за счет взаимодействия с лазерным полем, представленного частотой Раби и частотной расстройкой лазерного поля, и процессов релаксации. Он складывается из релаксационного супероператора (8.47), дополненного в общем случае супероператором упругой дефазировки (8.58), и супероператора ПВВ (9.14):

$$L_I = \begin{pmatrix} 0 & -w & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma & 0 & \Omega_0 \\ 0 & 0 & -\Gamma & -\delta \\ 0 & -\Omega_0 & \delta & -\Gamma \end{pmatrix}. \quad (9.18)$$

Соответствующее лиувиллиану (9.18) решение уравнения (9.16) $\langle 0| = (1, s_3, s_1, s_2)$ позволяет рассчитать с использованием правила усреднения $\langle \hat{A} \rangle = \langle 0| \hat{A} \rangle$ все представляющие интерес средние. Однако, представляет интерес выразить стационарное состояние также и в терминах обычной квантовой механики, т. е. с помощью соответствующей матрицы плотности. После использования соотношения $\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{I} + \vec{s} \cdot \hat{\vec{\sigma}})$ получаем следующий результат

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{2} \hat{I} - \frac{w}{2\gamma} \frac{|\bar{\delta}|^2}{|\bar{\delta}|^2 + \Omega_0^2 \Gamma / \gamma} \begin{pmatrix} 1 & \Omega_0 \bar{\delta}^* / |\bar{\delta}|^2 \\ \Omega_0 \bar{\delta} / |\bar{\delta}|^2 & -1 \end{pmatrix}, \quad (9.19)$$

где $\bar{\delta} = \delta - i\Gamma$ — эффективная расстройка лазерного поля, учитывающая наряду со средней расстройкой δ в виде мнимой части также и флуктуационную часть расстройки, описываемую скоростью Γ дефазировки осцилляций дипольного момента. С помощью этого выражения нетрудно рассчитать все стационарные средние ДА.

Для средней комплексной амплитуды $\langle \hat{\sigma}^+ \rangle = \rho_{21}$ колебаний дипольного момента имеем

$$\langle \hat{\sigma}^\pm \rangle = -\frac{w}{2\gamma} \frac{\Omega_0 (\delta \mp i\Gamma)}{|\bar{\delta}|^2 + \Omega_0^2 \Gamma / \gamma}. \quad (9.20)$$

Введем безразмерную комплексную восприимчивость атома в виде

$$\chi = \gamma \langle \hat{\sigma}^+ \rangle / \Omega_0, \quad (9.21)$$

реальная часть которой определяет дисперсию, а мнимая часть — поглощение атома [6, 43]. Из выражения (9.20), соответственно, получаем:

$$\chi'(\omega_L) = -\frac{1}{2} \frac{w\delta}{\delta^2 + \Gamma^2 + \Omega_0^2\Gamma/\gamma}, \quad \chi''(\omega_L) = \frac{1}{2} \frac{w\Gamma}{\delta^2 + \Gamma^2 + \Omega_0^2\Gamma/\gamma}. \quad (9.22)$$

Отличие этой формулы от соответствующей классической состоит в появлении в знаменателе слагаемого $\Omega_0^2\Gamma/\gamma$, описывающего насыщение перехода лазерным полем, и в появлении параметра w некогерентной накачки $\gamma - w \neq 0$, учитывающей насыщение за счет некогерентного (в частности, теплового) возбуждения. Насыщение полем при этом проявляется как *полевое уширение* линии поглощения

$$\Gamma \rightarrow \sqrt{\Gamma^2 + \Omega_0^2\Gamma/\gamma}.$$

При этом, однако, следует учитывать, что интерпретация этого уширения как увеличения скорости дефазировки некорректна. Дело в том, что эта дефазировка обязана когерентным осцилляциям Раби, перераспределяющим энергию возбуждения атома с колебаний на лазерной частоте на другие частоты, описываемые частотными сдвигами $\mathcal{Jm} \lambda_k$. Из результатов п. 9.5 следует, что в пределе бесконечно сильного поля интенсивность осцилляций на лазерной частоте стремится к нулю. По этой причине в конечном счете в отклике на лазерной частоте начинают преобладать колебания на других частотах, трансформированных на частоту лазерного поля только шумами, связанными с процессами релаксации, что и приводит к растяжению спектра, который, фактически, при каждом фиксированном значении ω_L образуется из хвостов откликов, отвечающих резонансам на частотах, смещенных на частоту Раби $\Omega = \sqrt{\Omega_0^2 + \delta^2}$. Эту физическую картину можно проследить математически в приближении сильного поля, рассматривая, как это делается в Главе 10, в качестве невозмущенного движения ДА суперпозицию прецессий на частоте лазерного поля и прецессию на частоте Раби и рассчитывая релаксацию в этом базисе. При этом стационарное состояние, осциллирующее на частоте ω_L и определяющее средний отклик атома, зависит от релаксационных параметров, определяемых также и флуктуациями шумов на частотах, смещенных на частоту Раби, что и означает наличие вклада атомных гармоник в отклик на центральной частоте.

Населенность верхнего уровня имеет вид

$$n_2 = \frac{1}{2} \frac{(\gamma - w)(\delta^2 + \Gamma^2) + \Omega_0^2\Gamma}{\gamma(\delta^2 + \Gamma^2) + \Omega_0^2\Gamma}. \quad (9.23)$$

Для степени когерентности возбуждения, определяемой соотношением

$$\mu = \frac{|\rho_{12}|^2}{\rho_{22}\rho_{11}},$$

и флуктуации комплексной амплитуды

$$\mathcal{D}\sigma^+ = \langle (\hat{\sigma}^- - \langle \hat{\sigma}^- \rangle)(\hat{\sigma}^+ - \langle \hat{\sigma}^+ \rangle) \rangle = \rho_{22} - |\rho_{12}|^2$$

получаем

$$\mu = \frac{(\delta^2 + \Gamma^2)\Omega_0^2 w^2}{[\Gamma\Omega_0^2 + (\delta^2 + \Gamma^2)(\gamma - w)][\Gamma\Omega_0^2 + (\delta^2 + \Gamma^2)(\gamma + w)]}, \quad (9.24)$$

$$\mathcal{D}\sigma^+ = \frac{2\Gamma^2\Omega_0^4 + 2(\delta^2 + \Gamma^2)(\delta^2\gamma + \gamma\Gamma^2 + \Gamma\Omega_0^2)(\gamma - w) + (\delta^2 + \Gamma^2)\Omega_0^2(2\gamma\Gamma - w^2)}{4(\delta^2\gamma + \gamma\Gamma^2 + \Gamma\Omega_0^2)^2}.$$

В пределе бесконечной интенсивности поля из этих соотношений следует, что степень когерентности стремится к нулю, а флуктуация достигает предельного значения $1/2$, совпадающего с населенностью уровней. В специальном случае чисто радиационного затухания атома в оптическом диапазоне с учетом соотношений релаксационных параметров $\Gamma = \gamma/2$, $w = \gamma$ приведенные соотношения упрощаются:

$$\mu = \frac{4\delta^2 + \gamma^2}{4\delta^2 + \gamma^2 + \Omega_0^2}, \quad (9.25)$$

$$\mathcal{D}\sigma^+ = \frac{2\Omega_0^4}{(4\delta^2 + \gamma^2 + 2\Omega_0^2)^2}. \quad (9.26)$$

В этом случае в слабом поле или при больших расстройках степень когерентности стремится к единице, в то время как дисперсия комплексной амплитуды обращается в ноль. В этом отношении радиационное затухание в оптическом диапазоне качественно отличается от радиационного затухания в радиодиапазоне, поскольку там в силу соотношений (8.48) параметр тепловой накачки верхнего уровня $\gamma - w$ отличен от нуля. При этом условии в асимптотике больших расстройк соотношения (9.24) дают для степени когерентности $\mu = \Omega_0^2 w^2 / [\delta^2(\gamma^2 - w^2)]$ и $\mathcal{D}\sigma^+ = (\gamma - w)/2\gamma$ для флуктуации. Что же касается роли чистой (упругой) дефазировки, описываемой величиной $\Gamma_e = \Gamma - \gamma/2$, то она обнаруживается для случая отсутствия тепловой накачки в иной скорости спада флуктуаций с ростом расстройки. Если при $\Gamma_e = 0$ дисперсия спадает как $\Omega_0^4/(8\delta^4)$, то при наличии чистой дефазировки получаем $\mathcal{D}\sigma^+ = \Gamma_e\Omega_0^2/(2\gamma\delta^2)$. Это означает, что соответствующая флуктуационная составляющая возбуждения ДА возникает за счет резонансов, обязанных случайной модуляции собственной частоты атома дефазирующим возмущением. Соответствующая же зависимость от поля в слабых полях при этом трансформируется от $\sim \Omega_0^4$ к $\sim \Omega_0^2$. Зависимости степени когерентности и дисперсии флуктуаций двухуровневого атомного перехода в оптическом диапазоне от интенсивности поля и скорости упругой дефазировки представлены на рис. 9.1.

Представляет интерес рассмотреть структуру равновесной матрицы плотности, описываемую спектральным разложением

$$\hat{\rho}_0 = \mathcal{P}_1\psi_{01}\psi_{01}^+ + \mathcal{P}_2\psi_{02}\psi_{02}^+.$$

Здесь волновые функции ψ_{01} , ψ_{02} описывают, соответственно, основное и возбужденное равновесные чистые состояния ДА в лазерном поле, а \mathcal{P}_1 , \mathcal{P}_2 — соответствующие вероятности этих состояний. В отсутствие поля, при наличии только тепловой накачки, они совпадают с основным и возбужденным состоянием свободного атома и, соответственно, вероятности \mathcal{P}_1 , \mathcal{P}_2 совпадают с населенностями основного и возбужденного уровня. Разрешая спектральную задачу для матрицы плотности (9.19), получаем

$$\mathcal{P}_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{w\sqrt{(\delta^2 + \Gamma^2)(\delta^2 + \Omega_0^2 + \Gamma^2)}}{\delta^2\gamma + \Omega_0^2\Gamma + \gamma\Gamma^2},$$

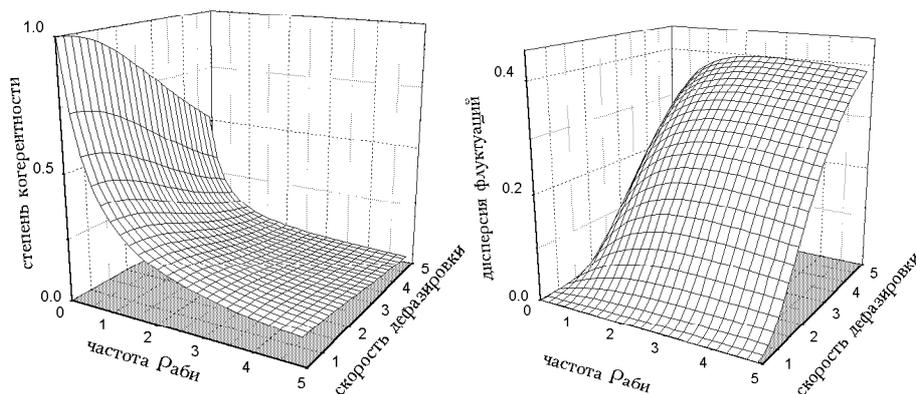


Рис. 9.1: Зависимость а) степени когерентности и б) дисперсии флуктуаций комплексной амплитуды от интенсивности лазерного поля и полной скорости дефазировки. Тепловая накачка на верхний уровень равна нулю. Частота Раби и скорость дефазировки выражены в единицах скорости распада γ .

$$\mathcal{P}_2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{w \sqrt{(\delta^2 + \Gamma^2)} (\delta^2 + \Omega_0^2 + \Gamma^2)}{\delta^2 \gamma + \Omega_0^2 \Gamma + \gamma \Gamma^2},$$

$$\psi_1 = \frac{\{-(\delta - i\Gamma)(Q - 1), \Omega_0\}}{\sqrt{2[\Omega_0^2 + (\delta^2 + \Gamma^2)(Q - 1)]}},$$

$$\psi_2 = \frac{\{(\delta - i\Gamma)(Q + 1), \Omega_0\}}{\sqrt{2[\Omega_0^2 + (\delta^2 + \Gamma^2)(Q - 1)]}},$$

$$Q = \sqrt{\frac{\delta^2 + \Gamma^2 + \Omega_0^2}{\delta^2 + \Gamma^2}}.$$

Специфика упругого уширения в терминах вероятностей \mathcal{P}_1 , \mathcal{P}_2 качественно проявляется в зависимости вероятности равновесного возбужденного чистого состояния \mathcal{P}_2 от напряженности поля в слабом поле при точном резонансе, $\delta = 0$. В этой асимптотике из соотношений (9.2), (9.19) для вероятности равновесного и населенности невозмущенного основного состояний, соответственно, получаем

$$\mathcal{P}_2 = \frac{\Omega_0^2 \Gamma_e}{2\gamma \Gamma^2}, \quad n_2 = \frac{\Omega_0^2}{2\gamma \Gamma}.$$

Эти выражения совпадают в асимптотике большой упругой дефазировки $\Gamma \gg \gamma/2$, в то время как в ее отсутствие в данном приближении $\mathcal{P}_2 = 0$, т. е. равновесное состояние атома в отсутствие упругой дефазировки является чистым.

9.3 Энергетические потоки в системе атом – электромагнитное поле

Обсудим рассматриваемую систему атом + электромагнитное поле вакуума + поле лазерного излучения с точки зрения обмена энергией между ее компонентами. Существенно отметить, что при этом лазерное поле рассматривается лишь как источник заданной

силы, действующей на атом, а с полем вакуума взаимодействует только атом посредством своего дипольного момента, в то время как моды поля, возбуждаемые лазером непосредственно и, соответственно, их возможная интерференция с излучением атома, не представляют интереса. В рассматриваемой постановке задачи имеются два потока энергии: от лазерного поля к атому и от атома к полю вакуума, в то время как в общем случае можно включить в рассмотрение и поток от лазерного источника, частично рассеиваемый атомом.

Для временной производной усредненного по всем переменным полного гамильтониана атома и поля получаем

$$\frac{d}{dt}E_{\Sigma} = \frac{d}{dt}E_a + \frac{d}{dt}V_L + \frac{d}{dt}V_f + \frac{d}{dt}E_r, \quad (9.27)$$

где E_{Σ} — полная энергия системы атом–поле, E_a — внутренняя энергия атома, V_L — энергия взаимодействия с лазерным полем, V_f — энергия взаимодействия с вакуумным полем, E_r — энергия поля вакуума, \mathbf{E}_L — напряженность лазерного поля, $\hat{\mathbf{d}}$ — оператор атомного дипольного момента. При этом из уравнения Гейзенберга для полного гамильтониана $\frac{d}{dt}\hat{\mathcal{H}}_{\Sigma} = \frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathcal{H}}_{\Sigma} + \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}}_{\Sigma}, \hat{\mathcal{H}}_{\Sigma}] = \frac{\partial}{\partial t}\hat{V}_L$ для правой части разложения (1.1) следует

$$\frac{d}{dt}E_{\Sigma} = W_L \equiv -\langle \hat{\mathbf{d}} \rangle \cdot \frac{d\mathbf{E}_L}{dt} \quad (9.28)$$

описывает среднюю мощность, выделяемую лазерным полем на атомном дипольном моменте [53]. Таким образом, это соотношение выражает тот факт, что система атом + поле вакуума получает энергию только вследствие возбуждения атома лазерным полем. Для изменения энергии вакуумного поля из соотношения $\frac{d}{dt}\hat{\mathcal{H}}_r = \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}}_{\Sigma}, \hat{\mathcal{H}}_r]$ получаем, аналогично,

$$\frac{d}{dt}E_r = \left\langle \hat{\mathbf{d}} \cdot \frac{\partial_0 \mathbf{E}_0}{\partial t} \right\rangle, \quad (9.29)$$

где $\frac{\partial_0}{\partial t}$ обозначает производную при изменении поля только за счет его свободной динамики, без учета вклада излучения атома. Для изменения энергии атома подобным же образом получаем

$$\frac{d}{dt}E_a = \left\langle \frac{\partial_0 \hat{\mathbf{d}}}{\partial t} \right\rangle \cdot \mathbf{E}_L + \left\langle \frac{\partial_0 \hat{\mathbf{d}}}{\partial t} \right\rangle \cdot \mathbf{E}_0, \quad (9.30)$$

где частная производная соответствует учету только свободной динамики атома в отсутствие электромагнитного поля. Выражение (9.30) описывает баланс между лазерным возбуждением и излучением атома: первый член описывает накачку атома лазерным полем, а второй член описывает энергию, излучаемую атомом и возбуждающую поле вакуума.

Практически приведенные соотношения представляют основной интерес в резонансном приближении, в пренебрежении осцилляциями на оптических частотах. С учетом того, что в представлении взаимодействия зависящий от времени оператор дипольного момента имеет вид $\hat{\mathbf{d}}(t) = \hat{\mathbf{d}}^+ \exp(-i\omega_L t) + \hat{\mathbf{d}}^- \exp(i\omega_L t)$, где $\hat{\mathbf{d}}^{\pm}$ — положительно- и отрицательно-частотные составляющие оператора дипольного момента, а $\mathbf{E}_L(t) = [\mathbf{E}_L^+ \exp(-i\omega_L t) + \mathbf{E}_L^- \exp(i\omega_L t)]/2$, в приближении вращающихся волн выражение (9.28) приводится к виду $W_L = \omega_L \mathcal{Jm} \langle \hat{\mathbf{d}}^+ \rangle \cdot \mathbf{E}_L^-$. При этом первый член в выражении (9.30) для

изменения энергии атома, как это очевидно после аналогичного преобразования, совпадает с W_L . Это выражает факт совпадения притока энергии от лазерного поля с мощностью, выделяемой последним на атомном дипольном моменте. Аналогичным образом второй член в выражении (9.30) совпадает с точностью до знака с изменением энергии вакуумного поля (9.29). Выражая оператор поляризации через частоту Раби $g = \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_L$ и оператор положительно-частотного перехода $\hat{\sigma}^+$, представляем поглощаемую мощность в виде

$$W_L = \hbar\omega_L \mathcal{I}m g \langle \hat{\sigma}^+ \rangle. \quad (9.31)$$

Рассматривая уравнение стационарного состояния (9.16), для ДА легко получить соотношение

$$\mathcal{I}m g \langle \hat{\sigma}^+ \rangle = \gamma \langle \hat{n}_2 \rangle$$

и показать эквивалентность выражения для мощности в форме (9.31) и ее представления через скорость радиационного распада и населенность возбужденного уровня в виде $\hbar\omega_L \gamma \langle \hat{n}_2 \rangle$.

9.4 Кинетика поляризации и населенностей

Рассмотрим сначала временную динамику поляризации и населенностей ДА в присутствии лазерного поля не более сильного, чем насыщающее. Соответствующий супероператор перехода имеет вид

$$S_I = \exp(L_I t). \quad (9.32)$$

Его расчет в общем случае может быть выполнен в соответствии со спектральной формулой

$$S_I(t) = |0\rangle \langle 0| + \sum_{k=1}^3 \exp(\lambda_k t) |k\rangle \langle k|, \quad (9.33)$$

где λ_k описывают три ненулевых собственных значения матрицы (9.18), из которых одно — λ_3 — вещественно, а два других — $\lambda_{1,2}$ — комплексно сопряжены; $|k\rangle$, $\langle k|$ описывают, соответственно, биортонормированные правые и левые собственные векторы, а $|0\rangle$, $\langle 0|$ соответствуют нулевому собственному значению. При этом

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \langle 0| = (1, n_0, a_0, b_0), \quad (9.34)$$

где в последнем выражении n_0 , a_0 , b_0 просто некоторые параметры, определяемые наряду с остальными путем решения одного из взаимно связанных уравнений

$$L_I |k\rangle = \lambda_k |k\rangle, \quad \langle k| L_I = \lambda_k \langle k|. \quad (9.35)$$

Как известно из теории матриц, для получения решения достаточно найти все собственные значения λ_k , через которые могут быть выражены и собственные проекторы $|k\rangle \langle k|$. Поскольку одно собственное значение уже известно, нахождение трех остальных связано с решением кубического уравнения. Хотя это возможно сделать даже аналитически, это не имеет особого смысла в виду ненаглядного характера соответствующих выражений. Во

всяком случае, приведенные соотношения дают очень простой алгоритм расчета, легко реализуемый с помощью простейшего компьютера. Для случая нулевой расстройки, однако, это уравнение допускает относительно простое решение, с помощью которого можно аналитически рассчитать, в частности, спектр флуоресценции [3]. Для общего же случая обсудим здесь лишь качественную структуру решения. Указанное нулевое собственное значение обязано своим происхождением общему свойству переходного супероператора — инвариантности единичного оператора и сохранению следа матрицы плотности, которое в выбранной гейзенберговской форме динамики отвечает нулевому столбцу в матрице (9.18). Наличие на диагоналях только отрицательных величин влечет отрицательность реальной части всех остальных собственных значений. Это позволяет представить λ_k в более наглядной форме:

$$\lambda_0 = 0, \quad \lambda_3 = -\gamma_1, \quad \lambda_{1,2} = -\Gamma_1 \pm i\Omega_1, \quad (9.36)$$

где все введенные константы вещественны и положительны. Они совпадают в асимптотике $\Omega_0 \rightarrow 0$ с исходными постоянными $-\gamma$, $-\Gamma \pm i\Omega$, где полная частота Раби

$$\Omega = (\Omega_0^2 + \delta^2)^{1/2} \quad (9.37)$$

в асимптотике слабого поля близка к частотной расстройке:

$$\Omega \longrightarrow |\delta| + \frac{\Omega_0^2}{2|\delta|}. \quad (9.38)$$

Здесь второе слагаемое описывает квадратичный штарковский сдвиг резонансной частоты $\omega_L \pm \mathcal{Jm} \lambda_{1,2}$ относительно невозмущенной частоты атома ω_{12} . В общем же случае релаксационные параметры перенормированы полем, однако эта перенормировка не связана с изменением самих исходных параметров релаксационного оператора γ , Γ , что может иметь место в случае еще более сильных полей, чем рассматриваемые здесь насыщающие поля. В излагаемой в данной Главы теории перенормировка параметров γ_1 , Γ_1 не может привести к подавлению релаксации даже при сколь угодно сильных полях.

Смысл параметров выражения (9.34) состоит в том, что они в соответствии со вторым соотношением в (9.35) описывают стационарную матрицу плотности, причем единичное значение первого элемента соответствует согласно п. 3.1 нормировке следа на единицу. Применяя эту матрицу плотности в соответствии с формулой $\langle \hat{A} \rangle = \langle 0 | \hat{A} \rangle$ последовательно к операторам разности населенностей $\hat{\sigma}_3$, и компонент поляризации $\hat{\sigma}_1$, $\hat{\sigma}_2$, которые являются элементами операторного базиса, описываемого кет-векторами с единственным ненулевым элементом, равным единице, получаем, что параметры имеют следующий смысл:

- n_0 — стационарная разность населенностей;
- a_0 — стационарная косинус-компонента осцилляций безразмерной поляризации на частоте ω_L ;
- b_0 — стационарная синус-компонента осцилляций безразмерной поляризации на частоте ω_L .

Несложное аналитическое выражение для матрицы перехода (9.32) можно получить в асимптотике быстрой прецессии Раби, справедливой для больших расстройек, либо для

предельно насыщающих полей, удовлетворяющих условию (9.4). Это выражение в более общем виде возникает при исследовании преобразования сильным полем параметров релаксационного оператора, выполняемого в Главы 10. В случае же слабого поля для расчета затухания неравновесной матрицы плотности $(1, n, a, b)$ можно рассчитать собственные значения и собственные векторы по теории возмущений первого порядка. Собственные значения совпадают в этом порядке с исходными, т. е.

$$\lambda_0 = 0, \quad \lambda_3 = -\gamma, \quad \lambda_{1,2} = -\Gamma \pm i\delta, \quad (9.39)$$

а собственные векторы представляются в виде

$$\begin{aligned} |k\rangle &= |k\rangle_r + (\lambda_{kr} - L_r)^{-1} L_{\Omega 0} |k\rangle_r, \\ \langle k| &= \langle k|_r + \langle k|_r L_{\Omega 0} (\lambda_{kr} - L_r)^{-1}, \end{aligned} \quad (9.40)$$

где $L_{\Omega 0}$ описывает только прецессию под действием внешнего поля, а индекс r указывает на то, что собственные векторы и собственные значения относятся к релаксационной матрице L_r , представленной в этой формуле обобщенной обратной матрицей — резольventой. При этом L_r включает также прецессию с частотой расстройки и представляет прямую сумму двух матриц

$$L_r = L_{r\parallel} \oplus L_{r\perp}, \quad L_{r\parallel} = \begin{pmatrix} 0 & -w \\ 0 & -\gamma \end{pmatrix}, \quad L_{r\perp} = \begin{pmatrix} -\Gamma & \delta \\ -\delta & -\Gamma \end{pmatrix}. \quad (9.41)$$

Учитывая этот факт, нетрудно получить собственные векторы матрицы L_r :

$$\lambda_{0r} = 0, \quad \lambda_{3r} = -\gamma, \quad \lambda_{1,2r} = -\Gamma, -\Gamma, \quad (9.42)$$

$$\langle 0|_r = \left(1, -\frac{w}{\gamma}, 0, 0 \right), \quad \langle 3|_r = (0, 1, 0, 0), \quad \langle 1, 2|_r = (0, 0, 1, 0, 0, 1). \quad (9.43)$$

$$|0\rangle_r = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |3\rangle_r = \begin{pmatrix} w/\gamma \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, 2\rangle_r = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ (1 \pm i)/\sqrt{2} \\ (1 \mp i)/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (9.44)$$

Соответственно, затухание состояния

$$\langle \hat{\rho} | = (1, n, a, b)$$

происходит по экспоненциальному закону. При этом n распадается со скоростью γ , а компоненты a, b со скоростью Γ и стремятся к равновесным значениям, определяемым возмущенным собственным вектором $\langle 0|$.

Редукция квантового случайного процесса

Как было показано в п. 8.4.3, при быстрой упругой дефазировке ДА в оптическом диапазоне в отсутствие лазерного поля реализуется процедура квантового измерения населенностей уровней. Рассмотрим теперь при тех же соотношениях релаксационных параметров квантовый случайный процесс в ДА, возбуждаемым лазерным полем постоянной

амплитуды. Из выражения (9.19) для стационарной матрицы плотности для соотношения параметров $w = \gamma, \delta \sim \Gamma, \gamma/\Gamma \rightarrow 0, \Omega_0 \sim \sqrt{\gamma\Gamma}$ получаем асимптотическое выражение в виде полностью некогерентного состояния с произвольными в общем случае значениями населенностей уровней

$$n_1 = \frac{1}{2} \frac{\Omega_0^2 \Gamma / \gamma + 2(\delta^2 + \Gamma^2)}{\Omega_0^2 \Gamma / \gamma + \delta^2 + \Gamma^2}, \quad n_2 = \frac{1}{2} \frac{\Omega_0^2 \Gamma / \gamma}{\Omega_0^2 \Gamma / \gamma + \delta^2 + \Gamma^2}$$

и нулевыми недиагональными матричными элементами ρ_{12}, ρ_{21} . Следовательно, случайный процесс в ДА в масштабе времен $(\gamma\Gamma)^{-1/2} \ll \tau \ll \gamma^{-1}$ в результате быстрой упругой дефазировки редуцируется к классическому марковскому процессу на два положения, $k = 1, 2$. При этом шум, возбуждающий эти ненулевые в присутствии лазерного поля флуктуации, описывается выражением (8.36) и обусловлен вакуумным электромагнитным полем. Он является существенно квантовым процессом, однако результат его действия, очевидно, может быть адекватно отображен эквивалентным классическим случайным процессом, как гауссовским, так и импульсным белым шумом. Характерная скорость его динамических изменений — частота скачков определяется частотой Раби Ω_0 , которая существенно меньше скорости дефазировки: $\Omega_0/\Gamma \sim \sqrt{\gamma/\Gamma}$. Характерным свойством марковского процесса является то, что в масштабе времен τ , на которых происходит процесс марковского затухания, информация о природе возбуждающего шума утрачивается, поскольку она определена на временах меньшего масштаба. Более того, даже любой существенно квантовый марковский процесс может быть в масштабе времен τ описан как результат некоторого эффективного воздействия на квантовую систему классического шума: этот подход широко применяется для компьютерного моделирования квантовых случайных процессов в терминах случайной волновой функции [14] взамен представления в терминах матрицы плотности, что радикально уменьшает число рассматриваемых переменных.

9.5 Спектр флуоресценции

Для расчета спектра флуоресценции следует исходить из формулы (9.15), в которой с учетом определения (5.12) полупрямого произведения для данного случая получаем представление корреляционной функции в виде суммы частотных компонент:

$$\mathcal{K}(\tau) = \mathbf{E}_{12} \mathbf{E}_{12}^T \sum_{k=0}^3 C_k^{\text{sign}(\tau)} \exp(-i\omega_L \tau - \lambda_k |\tau|), \quad (9.45)$$

где $C_k^{\text{sign}\tau} = C_k^\pm$ в зависимости от знака τ , представляется коэффициентами интенсивности спектральных линий

$$C_k^+ = \langle 0 | \hat{\sigma}^- | k \rangle \langle k | \hat{\sigma}^+ \rangle, \quad C_k^- = \langle 0 | | k \rangle \hat{\sigma}^+ \rangle \langle k | \hat{\sigma}^- \rangle. \quad (9.46)$$

Здесь в соответствии с определениями (5.12), (5.22) произведения типа $\hat{\sigma}^- | k \rangle$ есть произведения двух квантовых операторов, которым после выполнения операторного умножения ставятся в соответствие кет-векторы типа $|\hat{\sigma}^- | k \rangle$, представляющие результат умножения. Смысл коэффициентов C_k^+, C_k^- выявляется рассмотрением значения $\tau = 0$ в выражениях (9.8), (9.45) для корреляционной функции, что на спектральном языке

соответствует интегрированию по всем частотам. В этом случае она пропорциональна среднему значению оператора населенности верхнего уровня, $\hat{n}_2 = \hat{\sigma}^- \hat{\sigma}^+$, что соответствует суммарной мощности всех частотных компонент. Эта мощность представляется любой из сумм $\sum C_k^+ = \sum C_k^-$, которые согласно (9.46) и с учетом соотношения полноты $\sum |k\rangle \langle k| = 1$ сводятся к $\langle 0 | \hat{\sigma}^- \hat{\sigma}^+ \rangle$. Если бы частотные компоненты имели полностью разрешенные — неперекрывающиеся — линии, то эти коэффициенты обязаны были бы быть вещественными, положительными, причем $C_k^+ = C_k^-$, и тогда бы они описывали мощности соответствующих спектральных компонент. C_k^+ (C_k^-) распадаются, в соответствии с их происхождением от билинейной комбинации $\hat{\sigma}^-(t) \hat{\sigma}^+(t + \tau)$, на произведения сомножителей

$$C_k^\uparrow = \langle 0 | \hat{\sigma}^- | k \rangle, \quad C_k^\downarrow = \langle k | \hat{\sigma}^+ \rangle. \quad (9.47)$$

Первый описывает “матричный элемент” комплексно сопряженной амплитуды $\hat{\sigma}^-$ между стационарным состоянием $\langle 0 |$ и k -ым собственным состоянием атома $\langle k |$, а второй — среднюю комплексную амплитуду $\hat{\sigma}^+$ в этом состоянии. Последняя же в соответствии с (9.21) определяет комплексную восприимчивость атома в данном состоянии. Таким образом, спектр флуоресценции описывается произведениями комплексных коэффициентов, описывающих возбуждение различных собственных состояний, и соответствующих этим состояниям комплексных восприимчивостей.

Спектр флуоресценции в силу его исходного определения из физических соображений как квадрата модуля сигнала, наблюдаемого на выходе неограниченно узкополосного фильтра, после представления в форме

$$S(\omega) = \lim \frac{1}{2\pi T} \left\langle \int_0^T \hat{\sigma}^-(t_1) dt_1 \int_0^T \hat{\sigma}^+(t_2) dt_2 \right\rangle, \quad (9.48)$$

обобщающей классическое определение [15], должен быть вещественным и положительным. Раскрывая это выражение и усредняя, получаем его представление как Фурье-преобразование корреляционной функции по аргументу τ . Из вещественности спектра, соответствующую корреляционной функции (9.45), следует соотношение между коэффициентами C_k^\pm :

$$C_k^+ = (C_k^-)^* \quad \Im \lambda_k = 0, \quad C_k^+ = (C_{k^*}^-)^* \quad \Im \lambda_k \neq 0,$$

где k^* соответствует отвечающему k номеру комплексно сопряженного собственного значения $\lambda_{k^*} = \lambda_k^*$. С учетом автоматического выполнения этих необходимых соотношений спектр, соответствующий (9.45), представляется только через коэффициенты C_k^+ в виде:

$$S(\omega) = -2 \sum_k \frac{\Re \lambda_k \Re C_k^+ + (\omega - \omega_L + \Im \lambda_k) \Im C_k^+}{(\Re \lambda_k)^2 + (\omega - \omega_L + \Im \lambda_k)^2}. \quad (9.49)$$

Здесь физически размерный матричный коэффициент $\mathbf{E}_{12} \mathbf{E}_{12}^T$, описывающий векторные свойства излучения, опущен, так что спектральная плотность имеет размерность ω^{-1} .

В общем случае выражения (9.45), (9.49) для ДА описывают четырехкомпонентную структуру, соответствующих четырем собственным значениям λ_k лиувиллиана L . В знаменателе выражения (9.49) реальные части $\Re \lambda_k$ и мнимые части $\Im \lambda_k$ описывают, соответственно, ширины и частотные сдвиги лоренцевских контуров, которые отвечают вкладу первого слагаемого в числителе, пропорционального реальной части $\Re C_k^+$ коэффициентов интенсивности. Член, соответствующий $\lambda_k = 0$, должен быть, очевидно,

записан в форме соответствующей δ -функции $\delta(\omega - \omega_L)$, определяющей когерентную линию на частоте лазерного поля. Это единственная “чисто классическая” составляющая спектра ДА — если рассматривать в качестве классического аналога линейный гармонический осциллятор, возбуждаемый гармонической силой, в котором при наличии только трения в отсутствие упругой дефазировки никаких других спектральных компонент помимо отклика на частоте действующей силы не возникает. Составляющая же спектра (9.49), пропорциональная $\text{Im } C_k^+$ описывает вклад, специфический только для квантовой системы — *дисперсионную компоненту* спектра, по форме тождественную с частотной зависимостью дисперсии $\chi'(\omega)$ отклика гармонического осциллятора на внешнюю силу с частотой ω . При этом лоренцевские контуры соответствуют частотной зависимости поглощения $\chi''(\omega)$. Спектр поглощения ДА согласно (9.22) имеет вид лоренцевского контура, центрированного на частоте лазерного поля.

Рассмотрим по отдельности случаи нулевой расстройки и случаи слабого и насыщающего лазерного поля, для которых спектр имеет качественно различную структуру.

9.5.1 Случай точного резонанса

При точном резонансе, т. е. $\delta = 0$ в лиувиллиане (9.18), центральная спектральная задача марковской теории (9.35) существенно упрощается за счет возможности получения простого аналитического решения для соответствующего характеристического уравнения

$$\det(L_I - \lambda \cdot 1) = (\lambda + \Gamma)\lambda \det \begin{pmatrix} \gamma + \lambda & \Omega_0 \\ -\Omega_0 & \Gamma + \lambda \end{pmatrix} = 0,$$

которое записано с учетом расщепления (9.18) на прямую сумму диагонального элемента $-\Gamma$ и 3×3 -матрицы. Здесь в дополнение к универсальному корню $\lambda = 0$, очевидный корень $\lambda = -\Gamma$ описывает затухание одной из компонент поляризации, не спаренной полем с населенностями. Рассчитывая также и корни, соответствующие спаренным переменным, получаем полный набор собственных значений

$$\lambda_0 = 0, \lambda_3 = -\Gamma, \lambda_1 = -\frac{\gamma + \Gamma}{2} - \frac{i}{2}\Omega_\Gamma, \lambda_2 = -\frac{\gamma + \Gamma}{2} + \frac{i}{2}\Omega_\Gamma, \quad (9.50)$$

где

$$\Omega_\Gamma(\Omega_0, \Gamma, \gamma) = \begin{cases} \sqrt{4\Omega_0^2 - (\Gamma - \gamma)^2}, & 4\Omega_0^2 > (\Gamma - \gamma)^2, \\ -i\sqrt{(\Gamma - \gamma)^2 - 4\Omega_0^2}, & 4\Omega_0^2 \leq (\Gamma - \gamma)^2. \end{cases}$$

описывает эффективную частоту Раби, модифицированную затуханием. Она вещественна только для достаточной интенсивности поля, когда частота невозмущенных осцилляций Раби превышает пороговое значение:

$$\Omega_0 > \frac{1}{2}|\Gamma - \gamma|$$

и принимает мнимое значение в противоположном случае. Последний соответствует режиму чисто релаксационного движения атома, одетого полем, на фоне прецессии с частотой ω_L , и аналогично релаксационному движению классического гармонического осциллятора с затуханием, у которого частота меньше порога осцилляторного режима. Интересно отметить, что при совпадении затухания поляризации и населенностей, $\Gamma =$

γ , порог осцилляторного режима в ДА равен нулю. Физический смысл этого становится более ясным в результате сравнения динамики переменных ДА с динамикой системы классических линейных осцилляторов.

Построим систему гармонических осцилляторов с эволюционной матрицей

$$L = \begin{pmatrix} -\gamma & \Omega_0 & 0 \\ -\Omega_0 & -\Gamma & 0 \\ 0 & 0 & -\Gamma \end{pmatrix} \quad (9.51)$$

совпадающей с точностью до одной перестановки с нижней 3×3 -подматрицей лиувиллиана (9.18) и описываемой теми же самыми собственными значениями $\lambda_{1,2,3}$. Рассмотрим собственный гамильтониан системы двух связанных осцилляторов

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_1^2}{2} + \omega_L^2 \frac{\hat{q}_1^2}{2} + \frac{\hat{p}_2^2}{2} + \omega_L^2 \frac{\hat{q}_2^2}{2} + 2\Omega_0^2 \hat{q}_1 \hat{q}_2, \quad (9.52)$$

где \hat{q}_k, \hat{p}_k имеют одинаковую размерность $\propto \sqrt{\hbar}$. В представлении взаимодействия гамильтониан взаимодействия осредняется по осцилляциям на частоте ω_L и описывается усредненным последним членом, имеющим вид $\hat{\mathcal{H}}_1 = \Omega_0^2 \hat{q}_1 \hat{q}_2 + \hat{p}_1 \hat{p}_2$. Соответствующая система укороченных уравнений движения имеет вид

$$\begin{aligned} \dot{\hat{q}}_1 &= \Omega_0 \hat{p}_2, & \dot{\hat{p}}_2 &= -\Omega_0 \hat{q}_1, \\ \dot{\hat{q}}_2 &= \Omega_0 \hat{p}_1, & \dot{\hat{p}}_1 &= -\Omega_0 \hat{q}_2, \end{aligned} \quad (9.53)$$

Здесь два верхних уравнения описывают в точности те же осцилляции, что и в (9.51). Третья же переменная ДА, очевидно, может быть моделирована только как переменная третьего, линейно независимого осциллятора, поскольку 2-е и 3-е уравнения содержат осцилляции, отсутствующие в (9.51). Добавляя в соответствующие затухания и шумы, получаем стохастические уравнения для моделирующих классических переменных x_1, x_2, x_3

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -\gamma x_1 + \Omega_0 x_2 + \xi_1, \\ \dot{x}_2 &= -\Gamma x_2 - \Omega_0 x_1 + \xi_2, \\ \dot{x}_3 &= -\Gamma x_3 + \xi_3, \end{aligned} \quad (9.54)$$

моделирующих три затухающих осциллятора ДА. Первая пара описывает осцилляторы, моделирующие переменные ДА, спаренные полем, а третья описывает комплексную амплитуду неспаренной части поляризации. Переменные ξ_1, ξ_2, ξ_3 моделируют шумы ДА, не являясь, однако, реально их точным аналогом сразу по нескольким причинам. Во-первых, в классической теории при $T = 0$ (а в оптическом диапазоне частот в квантовой теории — и при обычных температурах) их интенсивность в силу формулы Найквиста равна нулю. Если же мы будем рассматривать данные линейные осцилляторы как квантовые и сохраним при $T = 0$ в квантовой формуле Найквиста вакуумные флуктуации $\hbar\omega_L/2$, предсказываемые квантовой формулой Планка, то все равно они не могут в линейной системе давать вклад в спектр флуоресценции, который для системы линейных осцилляторов, возбуждаемого гармонической силой на частоте ω_L , состоит только из когерентной линии на этой частоте. Однако, если правильно подобрать спектральную матрицу шумов ξ_1, ξ_2, ξ_3 , то можно надеяться воспроизвести некоторые общие свойства флуоресценции ДА при условии, поскольку динамика осцилляций отображена правильно.

Таким образом, осцилляции Раби физически соответствуют колебаниям, имеющим место в системе двух связанных линейных осцилляторов, включая закономерности перехода от релаксационного движения к осцилляционному, при выборе в качестве коэффициента связи частоты Раби Ω_0 . Собственные значения характеристической системы уравнений для классической задачи (9.54) при этом в точности совпадают с ненулевыми собственными значениями эволюционного супероператора ДА (9.50). В пределе $\Omega_0 \rightarrow 0$, когда движение носит чисто релаксационный характер, амплитуда одного из связанных осцилляторов соответствует разности населенностей, а сопряженная ей переменная отвечает компоненте поляризации, дополнительной к описываемой переменной x_3 . При этом соответствующие $\lambda_{1,2}$ переходят в $-\gamma$, $-\Gamma$, т. е. в затухание населенностей и поляризации. С использованием (9.54) при произвольном выборе в качестве спектральной матрицы шумов диагональной матрицы с единичными интенсивностями рассчитан частотный спектр суммарной интенсивности флуктуаций $|x_1(\omega)|^2 + |x_2(\omega)|^2 + |x_3(\omega)|^2$, показанный на рис. 9.2(а).

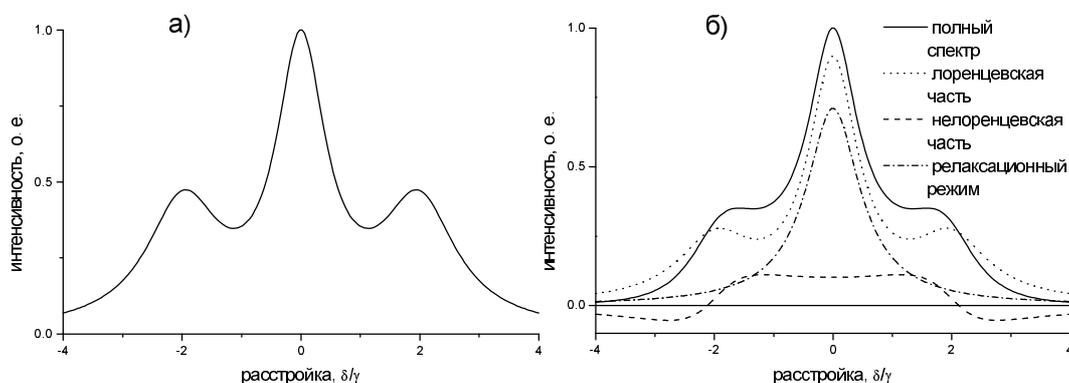


Рис. 9.2: Спектральная интенсивность флуоресценции ДА при нулевой расстройке лазерного поля в модели классических связанных осцилляторов (а) и в квантовой теории (б). Затухание поляризации соответствует чисто радиационному механизму: $\Gamma = \gamma/2$; частота Раби $\Omega_0 = 2\gamma$ соответствует осцилляторному режиму. Для квантового расчета представлены также лоренцевская и нелоренцевская составляющие и спектр для релаксационного режима при $\Omega_0 = \gamma/4$.

В квантовом случае расчет спектральных коэффициентов интенсивности по формуле (9.46) для осцилляторного режима дает следующие результаты:

$$C_0^+ = \frac{\Omega_0^2 \gamma^2}{(\Omega_0^2 + \Gamma \gamma)^2}, \quad C_3^+ = \frac{\Omega_0^2}{\Omega_0^2 + \Gamma \gamma}, \quad C_2^+ = (C_1^+)^*,$$

$$C_1^+ = \frac{\Omega_0^4 (\Gamma - \gamma + i\Omega_\Gamma)}{(\Omega_0^2 + \Gamma \gamma) [2\Omega_0^2 (2\gamma + i\Omega_\Gamma) + \gamma(\Gamma - \gamma)(\gamma - \Gamma + i\Omega_\Gamma)]}.$$

С их использованием по формуле (9.49) можно записать и явное выражение для плотности спектра спонтанной флуоресценции. Соответствующее довольно громоздкое выражение для случая чисто радиационного затухания $\Gamma = \gamma/2$ приведено в монографии [3]. Результаты расчета по формуле (9.49) приведены на рис. 9.2(б). Там не показана когерентная линия, мощность которой задается коэффициентом C_0^+ .

В асимптотике сильного поля отношение мощностей когерентной и несмещенной спонтанной компонент относятся как $C_0^+/C_3^+ = \gamma^2/\Omega_0^2$, т. е. насыщение атома приводит к подавлению когерентного отклика. В асимптотике слабого поля, наоборот, $C_1^+ + C_2^+ + C_3^+ \approx 2\Omega_0^2\Gamma_e/\Gamma^2$, т. е. вся мощность излучения в отсутствие упругой дефазировки, $\Gamma_e = \Gamma - \gamma/2 = 0$, приходится на когерентную линию, как это имеет место для классического гармонического осциллятора с затуханием в виде линейного трения, возбуждаемого гармонической силой. Упругая же дефазировка в классической модели, описываемой уравнением вида $\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_L^2(1 + \xi_e)x = \Omega_0\omega_L \cos \omega_L t$, отображается случайной модуляцией ξ_e частоты перехода, которая и дает ненулевой вклад в спектр отклика на возбуждающую силу при $\Gamma_e \neq 0$. Интересно отметить, что лоренцевские вклады в общем случае могут быть неположительны, если $\text{Re } C_k^+ < 0$, также как и их совокупный вклад. Однако, разумеется, полный спектр, включающий нелоренцевскую составляющую, всегда положителен, хотя последняя знакопеременна. При $\Omega_0 < |\Gamma - \gamma|/2$ все собственные значения, собственные векторы и коэффициенты $C_{1,2}^+$ вещественны, и нелоренцевский вклад в точности равен нулю. Хотя спектр в этой области претерпевает качественное изменение, оно замаскировано в форме линии, и для обнаружения требует соответствующей дополнительной обработки спектра. Физически важная информация содержится в скорости спадания спектра на больших частотах. В асимптотике $\omega \rightarrow \infty$ при произвольных интенсивностях поля спектр флуоресценции имеет вид

$$S(\omega) = \begin{cases} \frac{\Gamma_e \Omega_0^2}{(\Omega_0^2 + \gamma\Gamma)\omega^2}, & \Gamma_e > 0; \\ \frac{\Gamma \Omega_0^4}{(\Omega_0^2 + \gamma\Gamma)\omega^4}, & \Gamma_e = 0. \end{cases}$$

В присутствие упругой дефазировки спектр спадает как крылья лоренцевской линии, в то время как для чисто радиационного затухания закон спадания ω^{-4} , обусловленный выполнением соотношения $\sum_{k \neq 0} C_k^+ \lambda_k = 0$, отражает чисто квантовую специфику уширения. Математически она описывается в случае осцилляторного режима неположительностью вклада нелоренцевских составляющих, а в случае релаксационного режима — неположительностью коэффициентов интенсивности, которые в этом случае вещественны и дают суперпозицию лоренцевских линий, взаимно компенсирующих друг друга на крыльях спектра с точностью до величины $\sim \omega^{-4}$. Эта специфика чисто радиационного механизма релаксации ДА выходит за рамки квазиклассического приближения, описываемого гармоническим осциллятором. Последнее хотя и адекватно при слабых полях, но только для описания когерентной линии, в то время как некогерентный вклад отображает квантовую специфику ДА как в сильном, так и в слабом поле.

9.5.2 Спектр флуоресценции двухуровневого атома в слабом лазерном поле

Для расчета спектра флуоресценции в монохроматическом слабом поле применение изложенной супероператорной математической техники не является наиболее экономным способом получения результата, поскольку его можно получить непосредственно с использованием первого порядка теории возмущений для оператора временной эволюции по гамильтониану взаимодействия ДА с лазерным полем. Тем не менее, данное рассмотрение полезно для лучшего понимания того, как в супероператорном представлении

отображается динамика переменных ДА различного типа — населенностей и поляризации.

Для слабого поля в корреляционной функции (9.45) следует подставить собственные значения (9.39), мнимые части которых определяют частоты, а реальные — ширины компонент спектра. В общем случае таких компонент четыре: две на частоте ω_L — одна когерентная (не имеющая уширения) и одна уширенная, и две уширенных — одна на частоте атома $\omega_{12} = \omega_L - \delta$ и одна на частоте двухфотонного рассеяния²

$$\omega_s = \omega_L + \delta = 2\omega_L - \omega_{12}.$$

Однако, в случае слабого поля эти компоненты далеко не равноценны по интенсивности, которая определяется соответствующими коэффициентами

$$c_k^- = \langle 0 | \hat{\sigma}^- | k \rangle, \quad c_k^+ = \langle k | \hat{\sigma}^+ \rangle \quad (9.55)$$

в (9.45). Поскольку в слабом поле $|k\rangle$, $\langle k|$ примерно совпадают с собственными векторами лиувиллиана с нулевым лазерным полем, т. е. с релаксационным оператором, у которого подматрица $L_{r\perp}$ дополнена в общем случае не малыми недиагональными элементами $\pm\delta$, описывающими частотную расстройку поля, то

$$|1\rangle \approx |\hat{\sigma}^+\rangle, \quad |2\rangle \approx |\hat{\sigma}^-\rangle, \quad (9.56)$$

т. е. $\hat{\sigma}^\pm$ приближенно являются собственными векторами. Подставляя эти два собственных вектора в (9.55), мы видим, что в то время как для $k = 1$ имеем $c_k^+ \approx \langle k | \hat{\sigma}^+ \rangle \approx 1$ и интенсивность определяется коэффициентом $c_k^- \approx \langle 0 | \hat{\sigma}^- \hat{\sigma}^+ \rangle$, т. е. средней населенностью $\langle \hat{n}_2 \rangle$ возбужденного уровня, для $k = 2$ оба коэффициента в (9.55) являются малыми. В отличие от $k = 1$, для которого эти коэффициенты отвечают квантовым аналогам квадрата модуля комплексной амплитуды, $\hat{\sigma}^- \hat{\sigma}^+$, $\hat{\sigma}^+ \hat{\sigma}^-$, для $k = 2$ коэффициент c_k^+ соответствует квадрату модуля комплексной амплитуды, $(\hat{\sigma}^\pm)^2$. Это обстоятельство выделяет отклик на частоте атома, в то время как можно предположить, что отклик на частоте ω_s является асимптотически малым в слабом поле, т. е. при частотах Раби $\Omega_0 \ll \delta$. Однако, для точного решения этого вопроса необходимы соответствующие аналитические формулы, которые приводятся в п. 9.5.3. Для качественной оценки компонент отклика на частоте поля ω_L , которые соответствуют индексам $k = 0, 3$, рассмотрим соответствующие векторы $|0\rangle = |\hat{I}\rangle$ и $|3\rangle$. С учетом выражения для вектора $|3\rangle$ в формулах (9.44) и того обстоятельства, что в вакууме до температур $T \sim 10^4 K$ имеем $kT/\hbar\omega_{12} \approx 0$ и, согласно формулам (8.48) $w \approx \gamma$, получаем

$$|3\rangle \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 2|\hat{n}_2\rangle, \quad \hat{n}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

где \hat{n}_2 есть оператор населенности верхнего уровня. При подстановке в (9.55) $k = 0$ с учетом (9.43) оба обсуждавшиеся выше произведения не малы, в то время как при $k = 3$ они оба являются малыми. Таким образом, в случае слабого поля из четырех компонент отклика не малыми ожидаются только когерентный отклик на частоте поля и уширенный отклик на частоте атома, имеющий спектральную ширину Γ . Соответствующий спектр, рассчитанный численно, показан на рис. 9.3.

²При $\delta < 0$ это линия стоксова, а при $\delta > 0$ — антистоксова рассеяния.

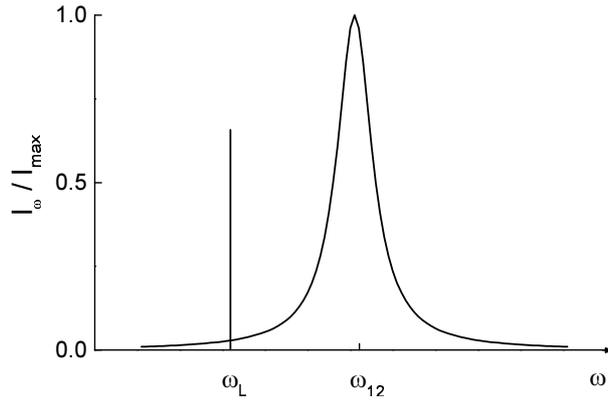


Рис. 9.3: Спектральная интенсивность флуоресценции ДА в присутствии слабого лазерного поля на частоте ω_L . Отношение скорости дефазировки к скорости радиационного распада $\Gamma/\gamma = 4$. Спектр имеет две компоненты: когерентную на лазерной частоте ω_L и уширенную на частоте атома ω_{12} .

С использованием асимптотических соотношений (9.40) можно получить и аналитическое выражение для спектральной плотности, рассчитываемой путем преобразования Фурье корреляционной функции (9.45). Более универсальным подходом, однако, оказывается использование теории возмущений в форме, основанной на рассмотрении в качестве невозмущенного движения прецессии с полной частотой Раби, учитывающей и лазерное возбуждение атома.

9.5.3 Спектральная структура Апанасевича-Моллоу

В случае насыщающего поля все четыре описываемые корреляционной функцией (9.45) компоненты поля имеют один порядок. Относительно простое аналитическое выражение для спектральной плотности излучения в этом случае можно получить для случая хорошо разрешенных компонент, когда в обобщенном лиувиллиане (9.18) компоненты вектора вращающего момента

$$\vec{\Omega} = (\Omega_0 \cos \varphi, -\Omega_0 \sin \varphi, \delta)$$

имеют величину $\Omega = (\Omega_0^2 + \delta^2)^{1/2}$, существенно превосходящую скорость затухания Γ . Тогда, рассматривая переходной супероператор в представлении взаимодействия в форме

$$S_I(t) = \exp(L_\Omega t) T \exp \left[\int_0^t \exp(-L_\Omega \tau) L_r \exp(L_\Omega \tau) d\tau \right] \quad (9.57)$$

на временах $t = \Delta$, $\Omega^{-1} \ll \Delta \ll \Gamma^{-1}$, разлагая вторую из экспонент до первого члена ряда Тейлора, выполняя интегрирование с отбрасыванием осциллирующих членов и представляя это разложение снова экспонентой с усредненным показателем, представляем выражение (9.57) в виде экспоненты с эффективным лиувиллианом

$$L_e = -w_e |\lambda_0\rangle \langle \lambda_3| - \gamma_e |\lambda_3\rangle \langle \lambda_3| - (\Gamma_e + i\Omega) |\lambda_1\rangle \langle \lambda_1| - (\Gamma_e - i\Omega) |\lambda_2\rangle \langle \lambda_2|. \quad (9.58)$$

Здесь λ_k и $|\lambda_k\rangle$ — собственные значения и собственные векторы матрицы прецессии ДА в лазерном поле, которые заданы соотношениями (3.17), (3.19), (3.20), а параметры

имеют вид

$$w_e = \langle \lambda_0 | L_r | \lambda_3 \rangle, \quad \gamma_e = \langle \lambda_3 | L_r | \lambda_3 \rangle, \quad \Gamma_e - i\Lambda_e = \langle \lambda_1 | L_r | \lambda_1 \rangle. \quad (9.59)$$

Это выражение совпадает с общим видом релаксационного оператора, описываемым выражением (8.13). Оно задает усредненный эффект релаксации в собственном базисе оператора прецессии. Выражая параметры (9.59) через их исходные значения, получаем

$$\begin{aligned} w_e &= w\delta/\Omega, & \Lambda_e &= \Lambda\delta/\Omega, \\ \gamma_e &= \gamma\delta^2/\Omega^2 + \Gamma\Omega_0^2/\Omega^2, \\ \Gamma_e &= \Gamma(\Omega^2 + \delta^2)/2\Omega^2 + \gamma\Omega_0^2/(2\Omega^2). \end{aligned} \quad (9.60)$$

Для расчета соответствующего вида спектра остается воспользоваться корреляционной функцией (9.45), подставив туда собственные векторы, после чего она приводится к следующему выражению:

$$\begin{aligned} K(\tau) = \text{const} \exp(-i\omega_L\tau) & \left\{ \frac{\Omega_0^2}{2\Omega^2} \frac{w_e^2}{\gamma_e^2} + \frac{\Omega_0^2}{2\Omega^2} \left(1 - \frac{w_e^2}{\gamma_e^2} \right) \exp(-\gamma_e\tau) + \right. \\ & + \frac{(\Omega + \delta)^2}{4\Omega^2} \left(1 - \frac{w_e}{\gamma_e} \right) \exp[-\Gamma_e\tau + i(\Omega + \Lambda_e)\tau] + \\ & \left. + \frac{(\Omega - \delta)^2}{4\Omega^2} \left(1 + \frac{w_e}{\gamma_e} \right) \exp[-\Gamma_e\tau - i(\Omega + \Lambda_e)\tau] \right\}. \end{aligned} \quad (9.61)$$

После этого остается учесть, что скорости экспоненциального затухания в этом выражении на спектральном языке описывают ширину соответствующей лоренцевской линии, а спектр есть совокупность трех лоренцевских кривых на частотах ω_L , $\omega_L \pm \Omega$ и когерентного отклика на частоте ω_L . Соответствующие результаты расчета приведены на рис. 9.4.

При этом в случае точного резонанса амплитуда когерентного отклика асимптотически обращается в ноль при $\Omega_0/\Gamma \rightarrow \infty$. Этот факт отражает роль насыщения, которое проявляется в пропорциональности отклика на внешнее воздействие величине разности населенностей уровней: в полностью насыщающем поле эта разность стремится к нулю. Для понимания качественной структуры спектра следует учитывать асимптотические соотношения для полной частоты Раби

$$\Omega \approx |\delta| + \frac{\Omega_0^2}{2\delta^2} \quad (9.62)$$

для случая больших расстроек δ и $\Omega \approx \Omega_0 + \delta^2/(2\Omega_0^2)$ для малых. Основное слагаемое в (9.62) для одной из компонент отклика $\omega_L \pm \Omega$ соответствует невозмущенной атомной частоте $\omega_{12} = \omega_L - \delta$, а добавка определяет сдвиг частоты — *квадратичный штарковский сдвиг*.

Интересно обсудить соотношение мощностей этих сателлитов, представленную в общем случае коэффициентами перед второй и третьей экспонентами в выражении (9.61). Подставляя в них выражения для релаксационных параметров (9.59), получаем

$$\begin{aligned} I_3 &= \frac{(\delta + \Omega)^2 [1 - w\Omega\delta/(\delta^2\gamma + g^2\Gamma)]}{4\Omega^2}, \\ I_4 &= \frac{(\Omega - \delta)^2 [1 + w\delta\Omega/(\delta^2\gamma + g^2\Gamma)]}{4\Omega^2}, \\ I_3 - I_4 &= \frac{\delta[2\delta^2(\gamma - w) + 2g^2(\Gamma - w/2)]}{2(\delta^2 + g^2)^{1/2}(\delta^2\gamma + g^2\Gamma)}. \end{aligned} \quad (9.63)$$

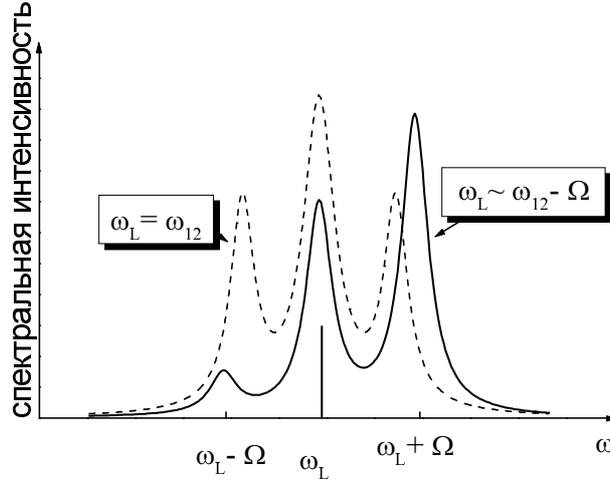


Рис. 9.4: Спектральная интенсивность флуоресценции ДА в сильном лазерном поле для двух различных значений лазерной частоты: для точного резонанса — $\omega_L = \omega_{12}$, и для ненулевой расстройки — $\omega_L \approx \omega_{12} - \Omega$. Спектр имеет четыре компоненты: одну когерентную и одну уширенную на частоте ω_L и две уширенные, расположенные для случая относительно слабого затухания на частотах $\omega_{\pm} \approx \omega_L \pm \Omega$.

Последнее соотношение показывает, что в случае чисто радиационного затухания в оптическом диапазоне, когда $w = \gamma = \Gamma/2$, интенсивности боковых сателлитов спектра совпадают при любом соотношении частот Раби Ω_0 и расстройки поля δ . Это означает, что даже очень слабое поле при сколь угодно большой расстройке возбуждает на частоте четырехфотонного рассеяния $2\omega_L - \omega_{12}$ в точности такое же излучение как и на частоте атома ω_{12} . Таким образом, в отсутствие упругой дефазировки и при достаточно большой ненулевой расстройке, превосходящей скорость распада, спектр флуоресценции не представляется ни двухкомпонентной структурой рис. 9.3, ни асимметричной структурой рис. 9.3, а имеет вид симметричной структуры рис. 9.3, подобной случаю точного резонанса. Это связано с тем, что нелинейный отклик двухуровневого атома на зеркальных компонентах спектра, как это было показано в п. 9.5.2, отвечает двум квадратичным комбинациям комплексной амплитуды, соответствующим квадрату модуля и квадрату самой амплитуды, из которых только вторая испытывает упругую дефазировку, не связанную с изменением энергии осцилляций. Более детально динамику этой дефазировки можно проследить, если вернуться от сокращенного марковского описания к стохастическому эволюционному супероператору в базисе прецессии на собственной частоте свободного атома ω_{12} :

$$S_{\xi\Omega_0}(\tau) = U_{\xi\Omega_0}^{-1}(\tau) \odot U_{\xi\Omega_0}(\tau). \quad (9.64)$$

Здесь индексы $\xi\Omega_0$ указывают на зависимость от шумовых переменных и от внешнего поля. В первом порядке теории возмущений по полю получаем

$$U_{\xi\Omega_0}(\tau) = \left[U_{\xi}(\tau) - i\frac{\Omega_0}{2} \int_0^{\tau} U_{\xi}(\tau - s) (\hat{\sigma}^+ e^{-i\delta s} + \hat{\sigma}^- e^{i\delta s}) U_{\xi}(s) ds \right], \quad (9.65)$$

где

$$U_{\xi}(t) = T \exp \left\{ -\frac{i}{2} \int_0^t \left[\hat{\xi}_e(\tau) \hat{\sigma}_3 + \hat{\xi}_f^+(\tau) \hat{\sigma}^- e^{i\omega_{12}\tau} + \hat{\xi}_f^-(\tau) \hat{\sigma}^+ e^{-i\omega_{12}\tau} \right] d\tau \right\} \quad (9.66)$$

описывает только зависимость от неупругих шумов ξ_f и упругих шумов ξ_e . Подставляя выражение (9.65) в (9.64) и рассматривая билинейные комбинации $\sim \Omega_0^2$, нетрудно видеть, что отклик на частоте атома ω_{12} соответствует комбинации $\hat{\sigma}^+ \odot \hat{\sigma}^-$, а на четырехфотонной частоте ω_s — комбинации $\hat{\sigma}^+ \odot \hat{\sigma}^+$. При этом следует учитывать марковость флуктуаций, означающую, что время корреляции τ_c много меньше существенного масштаба времен $s, \tau \sim \tau_r$, ответственного за формирование спектральных линий. Вследствие этого усреднение выполняется локально по времени и в рассматриваемых билинейных комбинациях для каждого момента времени существенны только одномоментные произведения шумовых переменных. Роль шумов ξ_f, ξ_e в преобразовании (9.66) в соответствии с анализом *Главы 8* качественно различна. Если ξ_f приводит к затуханию любых переменных атома, то ξ_e лишь дефазировывает амплитуды колебаний, не влияя на энергию. Соответственно, только комбинация $\hat{\sigma}^+ \odot \hat{\sigma}^+$ чувствительна к шумам упругой дефазировки ξ_e , поскольку в $\hat{\sigma}^+ \odot \hat{\sigma}^-$ набеги фаз $\int \hat{\xi} ds$ взаимно компенсируются.

Глава 10

Эффекты преобразования упругой релаксации ДА сильным лазерным полем

10.1 Общие соотношения для параметров релаксационного супероператора

В случае сильного поля для описания собственной временной динамики ДА с учетом лазерного воздействия является представлением его гамильтониана в форме (9.10). Ему соответствует представление собственной эволюции в форме супероператора двухчастотной прецессии (8.2.2), причем в выражениях (8.30) матрица L_0 описывает свободную прецессию с частотой лазерного поля, т. е. $\omega_1 = \omega_2 = 0$, $\omega_3 = \omega_L$, а матрица L_Ω описывает лазерно индуцированную прецессию с векторами вращающего момента $\Omega_1 = \Omega_0 \cos \varphi$, $\Omega_2 = \Omega_0 \sin \varphi$, $\omega_3 = \delta$. Двухчастотный супероператор (8.2.2) описывает собственное движение атома в присутствии поля. Применение его к исходным переменным ДА переводит последние в так называемое представление *одетых состояний*. Для обсуждения качественного смысла эффектов воздействия на ДА сильного поля в терминах гильбертова пространства естественно вернуться к произведению операторов временной эволюции, составляющих супероператор $\mathcal{S}_\Omega \mathcal{S}_L = U_\Omega^{-1} U_L^{-1} \odot U_L U_\Omega$, где U_Ω описывает унитарное преобразование, соответствующее гамильтониану прецессии (9.13), а U_L — свободную прецессию ДА с частотой ω_L . Унитарный оператор двухчастотной прецессии описывается спектральным представлением

$$U_L(t)U_\Omega(t) = \sum_{l=1}^2 \sum_{k=1}^2 \exp \left[-\frac{i}{2}(\Omega_k + \omega_l)t \right] |\omega_l\rangle \langle \omega_l | \Omega_k\rangle \langle \Omega_k|, \quad (10.1)$$

где $|\omega_l\rangle$, $|\Omega_k\rangle$ и сопряженные им бра-векторы описывают собственные векторы гамильтонианов (9.11), (9.13). Это выражение имеет вид линейной комбинации операторов перехода $|\Omega_k\rangle \rightarrow |\omega_l\rangle$, осциллирующих с четырьмя частотами $(\pm\omega_L \pm \Omega)/2$. При взаимодействии с возмущениями каждое из четырех слагаемых проявляет себя так же, как обычное состояние с той же самой боровской частотой, представленной соответствующим весом $C_{lk} = \langle \omega_l | \Omega_k\rangle$. Эти состояния называются *квазиэнергетическим*, а соответствующие частоты — их *квазиэнергиями*. Эти состояния изображаются соответству-

ющими энергиями, как это показано на рис. 10.1-(а), обобщающими обычные энергетические уровни ДА.

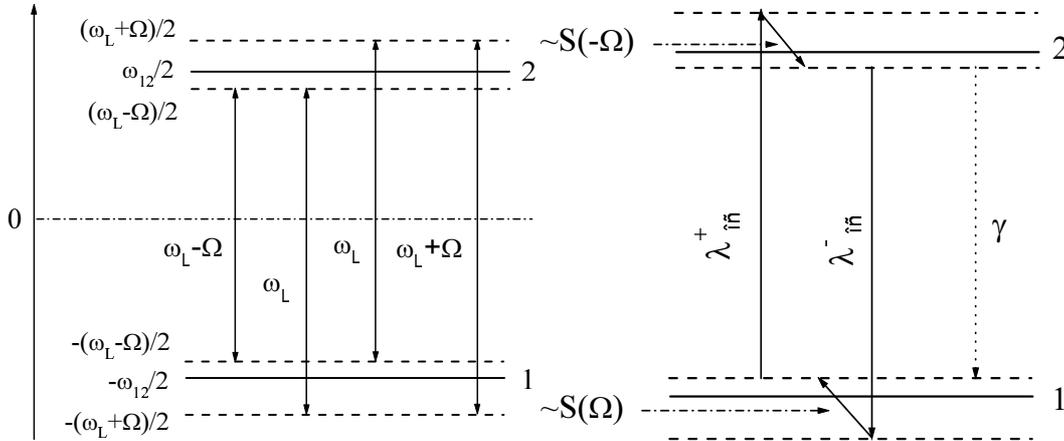


Рис. 10.1: (а) Структура квазиэнергетических уровней ДА, одетого лазерным полем. (б) Наиболее интенсивные каналы релаксации одетого ДА: лазерно индуцированные распад и накачка с участием квантов дефазированного резервуара и радиационный распад.

При нулевой интенсивности поля векторы $|\omega_k\rangle$, $|\Omega_k\rangle$ совпадают, и возможные частоты имеют только значения $\pm\omega_{12}/2$, поскольку $\Omega_k = \pm\Omega/2 \rightarrow \pm\delta/2$, $\omega_L - \delta = \omega_{12}$, $-\omega_L + \delta = -\omega_{12}$, а для других комбинаций вида $\pm\omega_L + \delta$ коэффициенты C_{lk} обращаются в ноль. Таким образом, резонансные переходы в ДА, “одетом” полем, описываются как переходы в четырехуровневой системе с энергиями ДА, расщепленными на пары квазиэнергетических состояний, отличающихся на величину кванта Раби $\hbar\Omega$.

Выражения (8.33) задают области частот шумов, существенные для взаимодействия с ДА. Они в данном случае соответствуют частотам

$$\omega = 0, 0 \pm \Omega, \pm\omega_L, \omega_L \pm \Omega, -\omega_L \pm \Omega.$$

Проявление зависимости результата воздействия шумов от внешнего поля возможно лишь в том случае, если отклонения указанных частот от соответствующих им значений

$$\omega = 0, 0 \pm |\delta|, \pm\omega_L, \omega_L \pm |\delta|, -\omega_L \pm |\delta|$$

для нулевого поля с $\Omega_0 = 0$ не малы по сравнению с соответствующими спектральными ширинами шумов. Компоненты $\hat{\xi}_{1,2}$ шума в гамильтониане (8.1), действующие на высоких частотах $\sim \omega_L$ для ДА реально описывают неупругие шумы вакуумного электромагнитного поля и приводят к радиационному распаду свободного атома в вакууме. Это очевидно из вида соответствующих им членов $\hat{\xi}_{1,2}\hat{\sigma}_{1,2}$ гамильтониана (8.1), которые содержат недиагональные матричные элементы в матрицах $\hat{\sigma}_{1,2}$. В спектре шума $\hat{\xi}_{1,2}(t)$ существенны лишь те частоты, на которых происходят собственные осцилляции атомных переменных $\hat{\sigma}_{1,2}(t)$. Соответственно, для этих шумов отличие $\omega_L \pm \Omega$ от ω_{12} может быть существенной, лишь если частота Ω сравнима с самой частотой атомного перехода ω_{12} , которая согласно п. 8.3 является шириной их спектра. Соответственно, воздействие лазерного поля на соответствующую этим шумам поперечную релаксацию несущую

ущественно¹ для полей с напряженностью меньше порядка внутриаомной напряженности поля (поскольку именно для таких полей частота Раби имеет порядок частоты атомного перехода). Основной случай, когда существенно преобразование процесса релаксации, связан с низкочастотными шумами упругой дефазировки, описываемой компонентой $\hat{\xi}_3$, которые взаимодействуют с атомной переменной $\hat{\sigma}_3(t)$, содержащей только постоянную во времени компоненту и осцилляции на полной частоте Раби. В то время как для марковской упругой дефазировки свободного атома имеет значение только спектральная плотность этих шумов на нулевой частоте, то в случае сильного поля существенны также и области частот $\pm\Omega$. При этом возможны два типа эффектов: одни связаны с конечной шириной соответствующей спектральной плотности $S_{\text{ph}}(\omega)$, а другие — с существенностью величины кванта $\hbar\Omega$ по сравнению с тепловой энергией kT , отображаемой асимметрией спектральной плотности $S_{\text{ph}}(-\omega) > S_{\text{ph}}(\omega)$. Поскольку в реальных условиях динамика свободного атома является марковской, то соответствующие спектральные ширины существенно больше скоростей затухания свободного атома, и, соответственно, проявление эффектов преобразования релаксации возможно, лишь если частота Раби существенно больше скоростей затухания, т. е. поле заведомо должно удовлетворять условию насыщения (9.4) в его усиленном варианте — условию *сильного поля*

$$\Omega_0\tau_T \gg 1.$$

На спектральном языке это означает, что перестройка релаксации происходит только в том случае, когда спектральные компоненты спектра флуоресценции полностью разрешены. Эффекты преобразования релаксации резонансным полем впервые были рассмотрены в работе Блоха [44], посвященной спиновому магнитному резонансу. В более позднее время эти эффекты широко обсуждались в приложении к оптическим переходам в атомах и их существенность в оптическом диапазоне была доказана экспериментально [45].

Из общего выражения (8.32) для параметров матрицы Q для рассматриваемого случая двухчастотной прецессии в лазерном поле с учетом естественного предположения статистической независимости шумовых компонент $\hat{\xi}_k$, получаем следующий набор параметров:

$$\begin{aligned} \lambda_3 &= \frac{\delta^2}{\Omega^2} S_{\parallel}(0) + \frac{\Omega_0^2}{2\Omega^2} [S_{\perp}(\omega_L) + S_{\perp}(-\omega_L)], \\ \lambda_1 &= \frac{\Omega_0^2}{2\Omega^2} S_{\parallel}(\Omega) + \frac{(\Omega - \delta)^2}{4\Omega^2} S_{\perp}(\omega_L) + \frac{(\Omega + \delta)^2}{4\Omega^2} S_{\perp}(-\omega_L), \\ \lambda_2 &= \frac{\Omega_0^2}{2\Omega^2} S_{\parallel}(-\Omega) + \frac{(\Omega + \delta)^2}{4\Omega^2} S_{\perp}(\omega_L) + \frac{(\Omega - \delta)^2}{4\Omega^2} S_{\perp}(-\omega_L). \end{aligned} \quad (10.2)$$

Из соотношений (8.11) для собственных значений релаксационного супероператора (8.13) с учетом того, что они при нулевом поле соответствуют невозмущенным релаксационным параметрам w , γ , Γ , Λ , получаем явные выражения

$$w_e = w \frac{\delta}{\Omega} + \left(\Gamma - \frac{\gamma}{2} \right) \frac{\Omega_0^2}{\Omega^2} \mu, \quad \Lambda_e \approx \Lambda \frac{\delta}{\Omega},$$

¹Однако, в специальных случаях, например, в случае атомов в резонаторе или в некоторой специфической среде ширина спектра неупругих шумов может иметь существенно меньшую величину, и эффекты преобразования связанных с ними процессов релаксации могут быть также существенны.

$$\gamma_e = \gamma \frac{\Omega^2 + \delta^2}{2\Omega^2} + \left(\Gamma - \frac{\gamma}{2} \right) \frac{\Omega_0^2}{\Omega^2} \chi, \quad (10.3)$$

$$\Gamma_e = \Gamma \frac{\Omega_0^2 \chi + 2\delta^2}{2\Omega^2} + \gamma \frac{\Omega_0^2}{4\Omega^2} (3 - \chi),$$

где

$$\chi = \mathcal{R}e \frac{S_{\parallel}(\Omega) + S_{\parallel}(-\Omega)}{2S_{\parallel}(0)}, \quad (10.4)$$

$$\mu = \mathcal{R}e \frac{S_{\parallel}(\Omega) - S_{\parallel}(-\Omega)}{2S_{\parallel}(0)}. \quad (10.5)$$

Эти соотношения обобщают осредненные сильным полем релаксационные параметры (9.60), не учитывающие эффекты зависимости спектральной плотности дефазирующего шума от частоты оптических нутаций. Собственным базисом для релаксационного оператора в обоих является базис, построенный из собственных векторов $|\lambda_{1,2,3}\rangle$ матрицы прецессии в лазерном поле.

10.2 Спектры флуоресценции с учетом эффектов преобразования релаксации

Спектр флуоресценции в условиях преобразования релаксации может быть рассчитан с помощью той же самой формулы (9.61), определяющей корреляционную функцию излучаемого поля и в отсутствие этого эффекта. В том выражении коэффициенты перед экспонентами описывают полную мощность соответствующей лоренцевой спектральной линии. С учетом выражений (10.3) для релаксационных параметров через спектральные плотности шумов оно описывает всю совокупность разнообразных спектральных эффектов, связанных с преобразованием релаксации внешним полем.

Эффекты преобразования релаксации проявляются через значения параметров χ , μ , описывающих эффекты. Эффекты, связанные с уменьшением параметра χ в сильных полях на временном языке описываются как следствие осреднения относительно медленных шумовых флуктуаций быстрыми осцилляциями Раби. Из выражений (10.4), (10.5) при малых частотных расстройках лазерного поля, когда $\Omega_0 \gg \delta$, очевидны следующие два эффекта. Во-первых, когда упругая дефазировка преобладает над неупругой, т. е. $\Gamma - \gamma/2 \gg \gamma$, преобразованные величины γ_e , Γ_e , определяемые в этом случае согласно (10.3), в основном, членами $\Gamma\chi$, $\Gamma\mu$, при достижении частотой Раби значений, сравнимых с шириной спектра шумов, уменьшаются. Соответственно, сужаются ширины спонтанных компонент отклика. Во-вторых, в отсутствие эффектов преобразования релаксации при нулевой расстройке спектр флуоресценции симметричен. Это следует из того, что в данном приближении следует полагать $S_{\parallel}(-\Omega) = S_{\parallel}(\Omega) = S_{\parallel}(0)$, вследствие чего $\mu = 0$ и, соответственно, при резонансе точно равен нулю параметр накачки w_e . Согласно выражению (9.61) спектр в этом случае должен быть симметричен, а интенсивность когерентной компоненты равна нулю, что и отражено в соответствующем спектре на рис. 9.3. Результат (9.61) описывает подавление когерентной составляющей сильным полем, которое следует из того обстоятельства, что когерентный отклик определяется разностью населенностей уровней, которая в сильном поле обращается в ноль.

Ненулевая величина кванта $\hbar\Omega$ приводит к ненулевой величине параметра μ . В результате спектр становится асимметричным и появляется ненулевая когерентная составляющая на частоте ω_L . Эти закономерности видны при сопоставлении спектров (a), (b) на рис. 10.2.

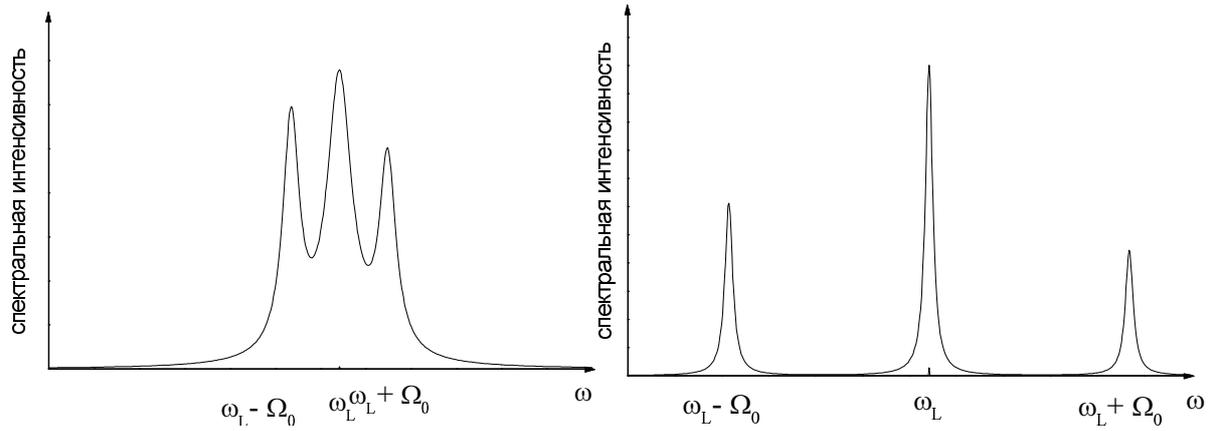


Рис. 10.2: Сужение линии флуоресценции сильным лазерным полем в условиях точного резонанса. Эффекты преобразования релаксации в случае (a) мало существенны, в случае (b) явно выражены: ширины линий меньше и асимметрия более существенна в относительном выражении. Параметры имеют следующие значения: $\Gamma_0 = 10\gamma_0$, $\tau_c = \Gamma_0^{-1}$, $kT/\hbar = 16\Gamma_0$; (a) — $\Omega_0 = \Gamma_0$, (b) — $\Omega_0 = 3\Gamma_0$. Масштаб по осям для графиков (a), (b) одинаков.

Наиболее интересно проследить с помощью соотношения (9.61) возможные предельные случаи перестройки спектральной структуры в сильном поле. Выпишем соответствующие ему выражения для мощностей спектральных компонент, которые имеют с точностью до множителя вид

$$I_0 = \frac{w^2 \Omega_0^2}{\gamma^2 2\Omega^2},$$

$$I_3 = \left(1 - \frac{w^2}{\gamma^2}\right) \frac{\Omega_0^2}{2\Omega^2}, \quad (10.6)$$

$$I_{1,2} = \left(1 \mp \frac{w}{\gamma}\right) \frac{(\Omega \pm \delta)^2}{4\Omega^2}.$$

При этом в выражении для w_e в (10.3) в качестве w следует с учетом результатов (8.48) использовать $w = \gamma$. Сумма мощностей когерентной и несмещенной уширенной составляющих равна Ω_0^2/Ω^2 , а сумма всех при малых или больших расстройках равна Ω_0^2/Ω^2 . Изменения распределения интенсивностей компонент определяются отношением w/γ .

Один из возможных предельных случаев достигается при малых расстройках, когда можно полагать $\delta = 0$. Он достигается, если упругая дефазировка настолько интенсивна, что выполнены одновременно условие *вымораживания* $\hbar\Omega/kT \gg 1$ квантов $\hbar\Omega$ и условие $(\Gamma - \gamma/2) \gg \gamma/4$. Это означает, что шум упругой дефазировки преобладает над неупругими шумами не только в окрестности нулевой частоты, но и на частотах $\sim kT/\hbar$. В этом случае получаем $\mu \approx -\chi$, $w/\gamma = -1$, и две из составляющих имеют нулевую

амплитуду:

$$I_0 \approx I_1 \approx \frac{1}{2}, \quad I_2 \approx I_3 \approx 0. \quad (10.7)$$

Таким образом, излучаемая мощность делится поровну между когерентной компонентой и левым сателлитом. Это случай показан на рис. 10.3-а.

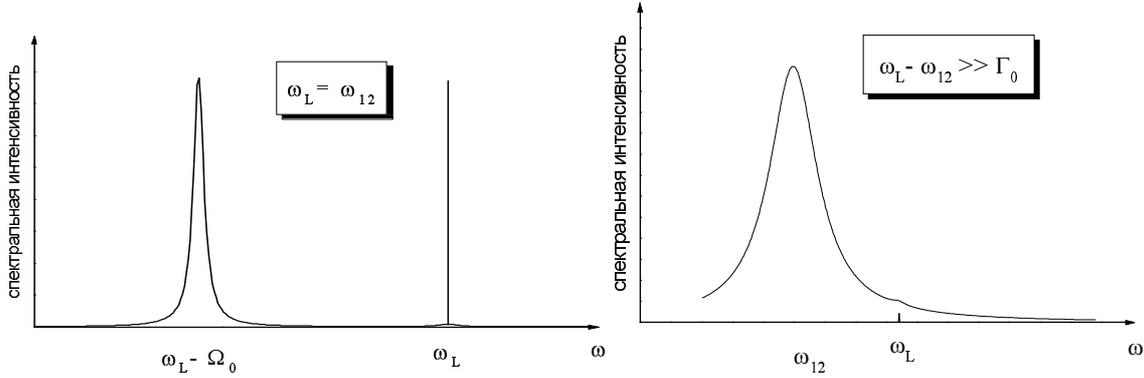


Рис. 10.3: Предельные случаи спектров флуоресценции при преобразовании релаксации сильным лазерным полем. Значения параметров: (а) — резонансный случай — $\Gamma_0 = 50\gamma_0$, $\tau_c = 0.5$, $10^{-2}\Gamma_0^{-1}$, $kT/\hbar = 0.2$, $\Omega_0 = 20\Gamma_0$, $\delta = 0$; (б) — нерезонансный случай — $\Gamma_0 = 150\gamma_0$, $\tau_c = 0.6$, Γ_0^{-1} , $kT/\hbar = 0.3\Gamma_0$, $\Omega_0 = 1.3\Gamma_0$, $\delta = 3.3\Gamma_0$. Масштабы по осям для графиков (а), (б) различны.

Другой предельный случай имеет место также в условиях вымораживания для больших расстроек $|\delta| \gg \Omega_0$, т. е. при возбуждении, далеком от резонанса. Тем не менее, ненулевой отклик возможен, если интенсивность упругой дефазировки настолько велика, что обеспечивает ненулевое значение некогерентного отклика на частоте атома. Это выполняется при положительных расстройках $\delta > 0$, если выполнены условия

$$\left(\Gamma - \frac{\gamma}{2}\right) |\mu| \gg \gamma \frac{\delta^2}{\Omega_0^2}, \quad \mu = -\chi. \quad (10.8)$$

Здесь мощность некогерентной составляющей пропорциональна фактору $\Gamma - \gamma/2$, в то время как когерентной — фактору γ , определяемому, в свою очередь, величиной d_{12}^2 . Неравенство в (10.8) может достигаться только за счет не обнуляющейся при больших расстройках спектральной интенсивности на отрицательной частоте. Тогда опять же $w/\gamma = -1$ при $\delta > 0$, т. е. при $\omega_L > \omega_{12}$, получаем $I_1 = 1$, в то время как мощность когерентной компоненты I_0 равна нулю из-за малого при больших расстройках значения коэффициента $\Omega_0^2/2\Omega^2$ в формуле (9.61). Этот случай показан на рис. 10.3-б). При отрицательных расстройках флуоресценция отсутствует вообще, точнее, является малой в рассматриваемой асимптотике больших расстроек.

Отметим, что в приведенных предельных соотношениях взаимодействие с резервуаром, соответствующим упругой дефазировке, выморожено, и спектральная плотность описывает только вакуумную компоненту, т. е. просто константу взаимодействия с резервуаром на частоте Ω . Соответственно, все процессы излучения сводятся к излучению либо на частоте атома, имеющего место в резонансном случае (а), либо на комбинированной частоте, связанной с передачей в резервуар кванта на частоте Ω , что возможно

также и в отсутствие резонанса в случае (b). В нерезонансном случае когерентный отклик имеет малую величину, в то время как при достаточно интенсивном взаимодействии с упругим резервуаром мощность рассеянного излучения имеет величину, совпадающую с полной мощностью флуоресценции при резонансе. При отрицательных расстройках такое рассеяние невозможно. Наличие в спектре рассеянного излучения на рис. 10.3-(b) ненулевой интенсивности на частотах $\omega > \omega_L$ является спецификой марковского приближения, в котором динамика затухания описывается экспоненциальным распадом, предполагаемым справедливым на сколь угодно малых временах. Это приводит к неограниченно широкому хвосту спектра флуоресценции, описываемого лоренцевым контуром. Однако, мощность, попадающая в “запрещенную” область, имеет параметр малости $\Gamma_t/\Omega \leq \tau_c/\tau_r$, который заведомо мал в условиях справедливости марковского приближения.

10.3 Инверсия двухуровневого атома монохроматическим полем

Изложенная в Главы 8 и п. 10.1 теория, хотя и сформулирована замкнутым образом в терминах релаксации чисто двухуровневой системы, в действительности учитывает и процессы, которые в неусредненном описании существенно выходят за рамки исходного ДА. Это возможно потому, что при расчете релаксационного супероператора учитываются все существенные процессы в многоуровневой составной системе ДА+резервуар. Появление в теории двух параметров w, γ , описывающих релаксацию неосциллирующих переменных ДА, учитывает возможность эффектов “накачки” наряду с обычным затуханием к нижнему энергетическому уровню. При описании же динамики ДА в монохроматическом поле только с учетом затухания возможность создания инверсной населенности отсутствует, поскольку индуцированные полем вероятности перехода вверх и вниз одинаковы, а вероятность спонтанного распада преобладает над вероятностью спонтанного перехода вверх (за счет тепловых флуктуаций поля). В описанной же полной теории дело обстоит принципиально иначе, поскольку в расчетах взаимодействие атомных нутаций с резервуаром учитывается на квантовом уровне. Частным случаем такого взаимодействия являются столкновения ДА с атомами буферного газа. Существенной спецификой буферного газа является то, что он создает только механизм упругой дефазировки и не влияет, в отличие от атомов того же самого газа, на неупругую дефазировку благодаря тому что электронные переходы буферного газа нерезонансны исследуемому переходу ДА. Такие столкновения при действии сильного лазерного поля называются *оптическими*.

Расчет стационарной разности населенностей выполняется с помощью соотношения

$$n_2 - n_1 = \langle \text{Tr } \hat{\rho} \mathcal{S}_r(t) \mathcal{S}_\Omega(t) \mathcal{S}_0(t) \hat{\sigma}_3 \rangle_t,$$

включающего усреднение по осцилляциям Раби. Учитывая совпадение собственных векторов для \mathcal{S}_r , \mathcal{S}_Ω и выделяя только собственные векторы, отвечающие в спектральных разложениях для матриц лиувиллианов L_r , L_Ω нулевым собственным значениям, с учетом соотношений (8.12) получаем

$$n_2 - n_1 = \langle 0 | 3 \rangle \langle 3 | \hat{\sigma}_3 \rangle. \quad (10.9)$$

Здесь $\langle 0|$, $|3\rangle$, $\langle 3|$ описывают собственные векторы релаксационного оператора, связанные соотношениями (8.12) с собственными векторами матрицы прецессии. Подставляя их явные выражения с использованием (3.19), получаем

$$n_2 - n_1 = -\frac{\delta}{\Omega} \frac{w}{\gamma}. \quad (10.10)$$

Выражая это соотношение через спектральные плотности дефазировочного шума, для населенности верхнего уровня получаем

$$n_2 = 0.5 \frac{\gamma + 4[(1 + \delta/\Omega)S_{\parallel}(-\Omega) + (1 - \delta/\Omega)S_{\parallel}(\Omega)]}{(1 + 2\delta^2/\Omega_0^2)\gamma + 4[S_{\parallel}(-\Omega) + S_{\parallel}(\Omega)]}. \quad (10.11)$$

В условиях преобладания упругой дефазировки над радиационным затуханием при малых расстройках отсюда следует оценка

$$n_2 = 0.5 + \frac{\delta}{2\Omega} \tanh\left(\frac{\hbar\Omega}{2kT}\right). \quad (10.12)$$

Ограниченность области справедливости этой формулы связана со спаданием спектральной плотности $S_{\parallel}(\pm\Omega)$ при возрастании Ω .

Рассмотрим дефазировку за счет столкновений ДА с атомами буферного газа. При этом ограничимся рассмотрением столкновений в приближении диффузионного процесса, что соответствует учету только столкновений с большим прицельным радиусом, которые сбивают фазу на малую величину. Эти расчеты строго неприменимы к ближним столкновениям, которые должны рассматриваться в терминах импульсного марковского процесса. Тем не менее, сам факт инвертирующего воздействия сильного поля качественно сохраняется и для этой компоненты столкновительного уширения, поэтому данный анализ вполне приемлем для приближенных оценок новых эффектов. Для спектра дефазировочного шума можно использовать аппроксимацию, следующую из ударной теории [46]

$$S_{\parallel}(|\omega|) = S_F(1 + 0.0064x^4) \exp(-x), \quad x = |\omega|/\delta_F$$

с параметрами S_F , δ_F , которые стандартным образом выражаются через концентрацию атомов буферного газа, их тепловые скорости и радиус Вайскопфа, получаемые из экспериментальных данных. Радиус Вайскопфа определяется как значение прицельного радиуса траектории буферного атома, для которой сбой фазы за соударение равен π . Соударения с прицельными радиусами такого порядка и меньше должны описываться как импульсный процесс, возбуждающий в ДА ступенчатый марковский процесс. Дальние столкновения с малым сбоем фазы приводят к диффузионному процессу.

Соответствующие расчетные кривые зависимости населенности верхнего уровня от частотной расстройки для перехода $5^2S_{1/2}-5^2P_{1/2}$ в рубидии представлены на рис. 10.4 для температуры $T = 500\text{K}$ для нескольких интенсивностей лазерного поля и значений давления p буферного газа — ксенона.

Приведенные расчеты показывают, что для ДА в газовой фазе ожидаемые величины инверсии незначительны. Значительно большие инверсии возможны для примесных атомов или молекул в низкотемпературных матрицах [47]. Тем не менее, этот эффект проявляется в индуцированном излучении, возбуждаемом сильным лазерным полем на частоте атомного перехода как следствие инверсии, приводящей к замене поглощения

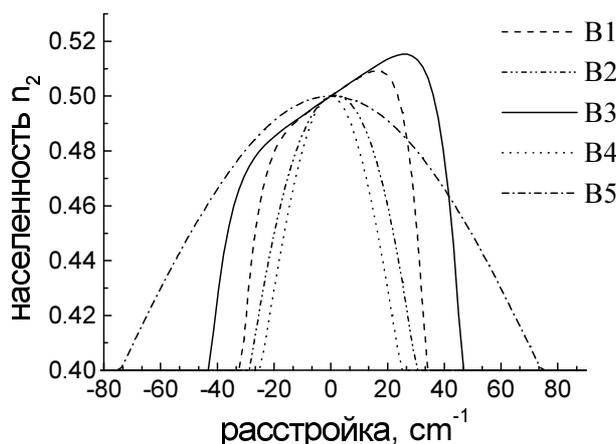


Рис. 10.4: Расчетные кривые населенности верхнего уровня для рубидия при различных давлениях p буферного газа и интенсивностях I лазерного поля: $p = 1$ ат, $I = 0.1$ МВт/см² (1); $p = 1$ ат, $I = 10$ МВт/см² (2); $p = 10$ ат, $I = 0.1$ МВт/см² (3); $p = 10$ ат, $I = 10$ МВт/см² (4); $p = 10$ ат, $I = 100$ МВт/см² (5).

спонтанного излучения на усиление. Этот факт был подтвержден экспериментами в смеси паров рубидия и аргона [48].

Для наглядного объяснения физического смысла описанных процессов следует обратиться к формуле (10.11) для стационарной населенности верхнего уровня. Величины $S_{\parallel}(\pm\Omega)$ описывают скорости переходов между соседними квазиуровнями за счет оптических столкновений, в которых атомом поглощается или испускается квант энергии поступательного движения, которое есть резервуар, обуславливающий “упругую дефазировку”. Эта дефазировка, однако, является действительно упругой только в случае малых значений кванта $\hbar\Omega$, когда вероятности его поглощения и испускания одинаковы, т. е. в отсутствие квантового вымораживания резервуара: $\hbar\Omega \ll kT$. Второе слагаемое в числителе формулы (10.11) описывает скорость λ^+ индуцированной оптическими столкновениями накачки на верхнюю пару квазиуровней. Сомножители перед величинами S описывают степень вовлеченности соответствующего квазиуровня. Больше вовлечен тот, который лежит на квазиэнергетической схеме рис. 10.1-(b) ближе к реальному уровню. Второе же слагаемое в знаменателе, как легко видеть, может быть представлено как сумма выражения в квадратных скобках в числителе и такого же выражения с заменой $\delta \rightarrow -\delta$. Последнее описывает индуцированные оптическими столкновениями распад на нижнюю пару уровней со скоростью λ^- . При положительных расстройках δ согласно формуле (10.11) в накачке преобладает составляющая с $S_{\parallel}(-\Omega)$, которая и показана на схеме рис. 10.1-(b). Ей соответствует процесс с испусканием кванта в резервуар, т. е. при оптическом столкновении передача энергии осцилляций Раби в поступательное движение сталкивающихся атомов. В то же время наиболее вовлеченный в оптически индуцированное затухание квазиуровень, как это видно из рис. 10.1-(b), распадается через процесс с поглощением кванта из резервуара. Таким образом, очевидно, что при положительных расстройках при оптических столкновениях лазерно индуцированная скорость накачки несколько превосходит скорость лазерно индуцированного распада. Изложенная теория дает метод определения необходимых условий для преобладания соответствующей скорости создания инверсии $\lambda^+ - \lambda^-$ над скоростью спонтан-

ного распада.

Глава 11

Некоторые приложения к N -уровневому атому

Использование компьютерных методов выполнения аналитических расчетов, в частности, использование пакета *Mathematica*, позволяет получить аналитические формулы для описания существенно более сложных резонансных откликов атомов, чем рассмотренные в Главах 8–10 резонансы в двухуровневых системах. В этом случае использование супероператорной техники расчетов особенно эффективно. В частности, в силу большой размерности задач даже простое выписывание матриц, описывающих эволюционные супероператоры становится технически сложной задачей. Однако, при использовании символического представления супероператоров, благодаря их физически прозрачной форме записи, они могут быть сначала записаны с абсолютной надежностью в символической форме, после чего их матричные элементы могут быть аналитически рассчитаны на компьютере с последующим использованием для решения рассматриваемых прикладных задач.

11.1 Расчет лиувиллиана N -уровневого атома с использованием символического представления

Лиувиллиан N -уровневого атома в лазерном поле в приближении вращающегося поля, также как и в двухуровневом случае (см. п. 9.1) имеет общее представление в виде суммы вкладов

$$\mathcal{L}_t = \mathcal{L}_r + \mathcal{L}_e + \mathcal{L}_\delta + \mathcal{L}_i. \quad (11.1)$$

Здесь \mathcal{L}_r — супероператор радиационного затухания, \mathcal{L}_e — супероператор упругой дефазировки, \mathcal{L}_i — супероператор взаимодействия с лазерным полем и $-\mathcal{L}_\delta$ — супероператор лазерной расстройки, дополняющий выбранный супероператор невозмущенной эволюции до супероператора свободной динамики атома в нулевом лазерном поле. Последний включает соответствующие расстройки всех действующих лазерных полей с учетом того, что свободная прецессия с частотами этих полей включена в супероператор невозмущенной динамики.

Радиационное затухание представляется стандартным лиувиллианом, скомбинированным из супероператора перехода населенностей, представленного проектором $\hat{P}_{lk} \odot$

\hat{P}_{kl} , и супероператора затухания поляризации, представленного антикоммутирующим оператором $[\hat{P}_{kk}, \odot]_+$:

$$\mathcal{L}_r = \sum_{kl} \gamma_{kl} \left(\hat{P}_{lk} \odot \hat{P}_{kl} - \frac{1}{2} [\hat{P}_{kk}, \odot]_+ \right), \quad (11.2)$$

где двумерный массив γ_{kl} для $k > l$ описывает скорости спонтанного распада и скорости накачки для $k < l$. Упругая дефазировка представлена супероператором \mathcal{L}_e , выраженным в терминах квадратов коммутаторов и определяемым конкретной моделью дефазировки. Целесообразно выделить два различных типа дефазировки. В первом случае рассматривается только внутренняя дефазировка в системе двух электронных состояний k и $l > k$ и, в соответствии с микроскопической природой упругой дефазировки, обусловленной слабыми столкновениями [49] как случайной модуляции частоты перехода, описывается соответствующим случайным супероператором частотного сдвига $-(i/2)\xi(t)[\hat{P}_{kk} - \hat{P}_{ll}, \odot]$, где $\xi(t)$ — флуктуационное смещение частоты перехода. Результирующий усредненный релаксационный супероператор имеет вид

$$\mathcal{L} = -(\Gamma_{\text{in}}^{kl}/4) [\hat{n}_{kl}, \odot]^2,$$

где $\hat{n}_{kl} = \hat{P}_{ll} - \hat{P}_{kk}$ — оператор инверсии населенностей kl -подсистемы и Γ_{in}^{kl} — соответствующая скорость дефазировки. Этот тип чистой дефазировки связан не только с дефазировкой самого kl -перехода, но и вносит вклад в дефазировку всех переходов, смежных с рассматриваемым. Тем не менее, удобно выделить дефазировку только выделенного kl -перехода, используя разложение

$$[\hat{n}_{kl}, \odot]^2 = 4(\hat{P}_{kk} \odot \hat{P}_{ll} + \hat{P}_{ll} \odot \hat{P}_{kk}) + [\hat{I}_{kl}, \odot]^2,$$

где $\hat{I}_{kl} = \hat{P}_{ll} + \hat{P}_{kk}$ — оператор суммарной населенности kl -подсистемы. Соответствующий вклад первого члена

$$\mathcal{L}_{\text{in}}^{kl} = -\Gamma_{\text{in}}^{kl} (\hat{P}_{kk} \odot \hat{P}_{ll} + \hat{P}_{ll} \odot \hat{P}_{kk}) \quad (11.3)$$

описывает чисто внутреннюю дефазировку без влияния на смежные переходы. Если использовать все независимые параметры Γ_{in}^{kl} , то возможно представить дефазировку всех переходов, используя только соотношение (11.3). Однако, в целях простоты отображения физической природы дефазировки, удобно ввести другой вклад, связанный с одинаковой дефазировкой через оба k -й и l -й уровень любого другого уровня в отсутствие воздействия на сам kl -переход, то-есть “внешнюю” дефазировку:

$$\mathcal{L}_{\text{ex}}^{kl} = -\Gamma_{\text{ex}}^{kl} [\hat{I}_{kl}, \odot]^2, \quad (11.4)$$

где Γ_{ex}^{kl} — соответствующая скорость дефазировки. Соответственно, полный супероператор упругой дефазировки описывается суммой

$$\mathcal{L}_e = \sum_{k < l} (\mathcal{L}_{\text{in}}^{kl} + \mathcal{L}_{\text{ex}}^{kl}). \quad (11.5)$$

Супероператор лазерной расстройки зависит от типа рассматриваемого резонанса и обычно может быть представлен в форме антисимметрического супероператора, представленного в виде коммутатора с операторами населенностей

$$\mathcal{L}_\delta = i \sum_k \delta_k (\hat{P}_{kk} \odot - \odot \hat{P}_{kk}), \quad (11.6)$$

где δ_k — массив частотных расстройек. Взаимодействие с лазерным полем может быть представлено в форме антисимметрического коммутатора с операторами поляризации

$$\mathcal{L}_i = -\frac{i}{2} \sum_{k < l} \Omega_{kl} [(\hat{P}_{kl} + \hat{P}_{lk}), \odot], \quad (11.7)$$

где Ω_{kl} — двумерный массив частот Раби kl -переходов.

После введения символического представления полного эволюционного супероператора (11.1) и его составляющих (11.2), (11.5), (11.6), (11.7) может быть рассчитана $N^2 \times N^2$ -матричные представления $L_t, L_r, L_e, L_\delta, L_i$ могут быть рассчитаны с использованием формулы

$$L_{mn} = (\hat{e}_m, \mathcal{L} \hat{e}_n), \quad (11.8)$$

где $\{\hat{e}_k\}$ — ортонормированный базис. Последний удобно выразить через операторы \hat{P}_{kl} -переходов, представленные $N \times N$ -матрицами с единственным ненулевым kl -элементом $P_{kl}(k, l) = 1$. Удобно предположить, что нумерация уровней выбрана в соответствии с возрастанием их энергий $E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_N$. Соответствующий базис строится следующим образом:

$$\hat{e}_{j(k,l)} = \begin{cases} \hat{P}_{kk}, & k = l; \\ \frac{\hat{P}_{kl} + \hat{P}_{lk}}{\sqrt{2}}, & k < l; \\ -i \frac{\hat{P}_{kl} - \hat{P}_{lk}}{\sqrt{2}}, & k > l, \end{cases} \quad (11.9)$$

где $j(k, l)$ — нумерующий индекс, то-есть взаимно-однозначное отображение двумерного множества чисел $kl: k, l = 1, N$ в одномерный индекс $j = 1, N^2$. Он, в частности, может быть конкретизирован нижеследующим, универсальным для любых N образом:

$$j = \begin{cases} k, & k = l; \\ (2k - 1)N - (k + 1)^2 + k + 2l, & k < l; \\ (2l - 1)N - (l + 1)^2 + l + 2k + 1, & k > l, \end{cases}$$

что для $N = 2, 3, 4$ соответствует следующим $(j(k, l))$ -матрицам:

$$j_2 = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}, \quad j_3 = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 6 \\ 5 & 2 & 8 \\ 7 & 9 & 3 \end{pmatrix}, \quad j_4 = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 7 & 9 \\ 6 & 2 & 11 & 13 \\ 8 & 12 & 3 & 15 \\ 10 & 14 & 16 & 4 \end{pmatrix}. \quad (11.10)$$

Базис (11.9) ортонормирован в отношении скалярного произведения (2.4), $(\hat{e}_m, \hat{e}_n) = \delta_{mn}$ для всех $m, n = 1, N^2$.

Изложенная техника эффективна для аналитических расчетов, связанных как с решением проблемы стационарного состояния, так и с решением полной спектральной задачи для эволюционного супероператора \mathcal{L}_t [51, 52].

11.2 Резонансные свойства Λ -систем

Энергетическая схема Λ -резонанса [50] показана на рис. 11.1. Его название связано со спецификой конфигурации резонансных уровней, где один верхний связан с каждым

из двух нижних, которые обычно являются подуровнями сверхтонкой структуры одного состояния, переход между которыми дипольно запрещен и соответствующее время дефазировки является очень малым. Другими словами, Λ -резонанс является рамановским (двухфотонным) резонансом на переходе между нижними подуровнями с рамановской расстройкой резонанса $\delta_R = \omega'_L - \omega_L - \omega_{12}$. Благодаря очень малому времени дефазировки этот резонанс является предельно острым — до 10 Гц. Основной физический механизм, характерный для данного резонанса состоит в том, что из двух нижних уровней поле взаимодействует лишь с одной линейной комбинацией — так называемым *связанным* (“coupled”) состоянием, которое опустошается за счет возбуждения полем на верхний уровень, в результате чего подавляющая часть населенностей в процессе радиационного распада возбужденного состояния сосредотачивается в *несвязанном* (“uncoupled”) состоянии, не взаимодействующим с полем и соответствующем ортогональной к связанному состоянию линейной комбинации нижних уровней. Этот эффект называется *когерентным пленением населенностей* (КПН — “СРТ”).

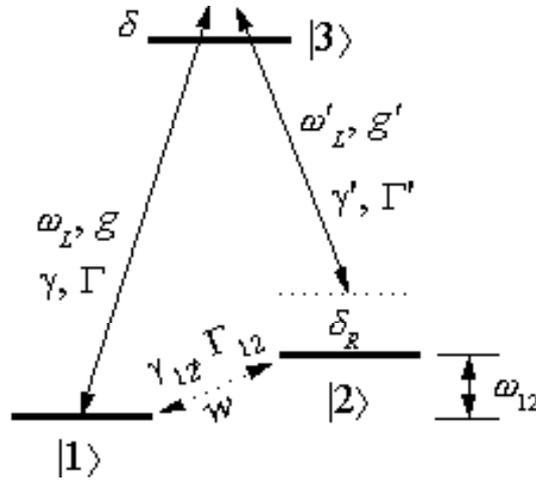


Рис. 11.1: Λ -резонанс в трехуровневой системе и его существенные параметры: γ, γ' — скорости радиационного распада возбужденного состояния на уровни 1, 2; Γ, Γ' — скорости дефазировки переходов 1–3 и 2–3; ω_L, ω'_L — частоты лазерных полей; g, g' — соответствующие частоты Раби; δ, δ_R — расстройка резонанса на переходе 1–3 и рамановская расстройка; γ_{12}, w — скорости распада и накачки уровня 1 через уровень 2; Γ_{12} — скорость чистой дефазировки перехода 1–2.

Анализ Λ -резонанса в случае достаточно большого расщепления нижних подуровней $\omega_{12} \gg \Gamma, \Gamma', g, g'$ может выполняться аналогично ДА с использованием приближения вращающихся волн. В качестве гамильтониана невозмущенной динамики при этом используется

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -\hbar(\omega_L \hat{P}_{11} + \omega'_L \hat{P}_{22}),$$

что приводит к прецессии переходов 13, 23 с частотами ω_L, ω'_L и перехода 12 с частотой $\omega'_L - \omega_L$. При этом гамильтониан взаимодействия с лазерным полем

$$\hat{\mathcal{H}}_i = 2 \operatorname{Re} \left[\mathbf{d}_{13} \hat{P}_{13}(t) + \mathbf{d}_{23} \hat{P}_{23}(t) \right] [\mathbf{E}_L(t) + \mathbf{E}'_L(t)]$$

может быть осреднен по осцилляциям поля и их комбинациям, что приводит его к виду

$$\hat{\mathcal{H}}_i = \hbar \operatorname{Re} (g \hat{P}_{13} + g' \hat{P}_{23}). \quad (11.11)$$

Отличие невозмущенного гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$ от собственного гамильтониана атома в отсутствие поля и релаксационных процессов учитывается гамильтонианом расстройек

$$\hat{\mathcal{H}}_\delta = \hbar (\delta_R \hat{P}_{22} - \delta \hat{P}_{33}). \quad (11.12)$$

С учетом соответствующих выражениям (11.11), (11.12) рассмотренных в п. 11.1 символических представлений для лиувиллианов \mathcal{L}_i , \mathcal{L}_δ и матричного представления (11.8) полного лиувиллиана (11.1) в базисе (11.9) получаем

$L_t =$

$$\begin{pmatrix} -w & \gamma_{12} & \gamma & 0 & 0 & 0 & \frac{g}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ w & -\gamma_{12} & \gamma' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{g'}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & -\gamma - \gamma' & 0 & 0 & 0 & -\frac{g}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{g'}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 & -\Gamma_{12} & \delta_R & 0 & \frac{g'}{2} & 0 & \frac{g}{2} \\ 0 & 0 & 0 & -\delta_R & -\Gamma_{12} & -\frac{g'}{2} & 0 & \frac{g}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{g'}{2} & -\Gamma & -\delta & 0 & 0 \\ -\frac{g}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{g}{\sqrt{2}} & -\frac{g'}{2} & 0 & \delta & -\Gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{g}{2} & 0 & 0 & -\Gamma' & -\delta - \delta_R \\ 0 & -\frac{g'}{\sqrt{2}} & \frac{g'}{\sqrt{2}} & -\frac{g}{2} & 0 & 0 & 0 & \delta + \delta_R & -\Gamma' \end{pmatrix}. \quad (11.13)$$

В данном выражении дефазировки переходов определяются скоростями распада образующих их уровней и вкладом чистой дефазировки:

$$\Gamma = \frac{w + \gamma + \gamma'}{2} + \Gamma_e, \quad \Gamma' = \frac{\gamma_{12} + \gamma + \gamma'}{2} + \Gamma'_e, \quad \Gamma_{12} = \frac{w + \gamma_{12}}{2} + \Gamma_{12}^e.$$

В реальном эксперименте отсутствие столкновений с атомами буферного газа, т. е. в случае использования кювет с чистыми парами активных атомов, величинами Γ_e , Γ'_e можно пренебречь. В отличие от дипольных переходов на переходе 12 основную роль играет чистая дефазировка $\Gamma_{12}^e \gg \gamma_{12}, w$, которая в отсутствие буферного газа моделирует конечность времени нахождения атомов в области их взаимодействия с полем (смысл использования буферного газа состоит в увеличении этого времени). Вклад самых малых параметров γ_{12}, w в дефазировку дипольных переходов тем более не существен.

Основные свойства эффекта КПН определяются величиной поглощения приложенного поля, которое на основе двухуровневой формулы (9.31) для случая Λ -резонанса описывается модифицированным выражением

$$W_L = \hbar \mathcal{Jm} (\omega_L g \langle \hat{\sigma}_{13}^+ \rangle + \omega'_L g' \langle \hat{\sigma}_{23}^+ \rangle) \approx \hbar (\omega_L \gamma + \omega'_L \gamma') n_3, \quad (11.14)$$

где $\langle \hat{\sigma}_{13}^+ \rangle$, $\langle \hat{\sigma}_{23}^+ \rangle$ описывают положительно-частотные операторы комплексных амплитуд переходов 13 и 23, соответственно. Для расчета стационарных средних значений $\langle \hat{\sigma}_{13}^+ \rangle$,

$\langle \hat{\sigma}_{23}^+ \rangle$ или n_3 требуется рассчитать соответствующее векторное представление $\langle 0|$ стационарной матрицы плотности $\hat{\rho}_{st}$, разрешив уравнение $\langle 0| L_t$. При этом в рассматриваемом базисе с $\hat{e}_1 = \hat{P}_{11}$, $\hat{e}_2 = \hat{P}_{22}$, $\hat{e}_3 = \hat{P}_{33}$ Первые три элемента вектора $\langle 0|$ описывают населенности и должны быть соответственно нормированы, так что бра-вектор стационарной матрицы плотности $\langle 0|$ следует использовать в нормированной форме

$$\langle 0| \rightarrow \frac{\langle 0|}{\langle 0|_1 + \langle 0|_2 + \langle 0|_3},$$

что автоматически обеспечивает правильный знак рассчитываемых величин. Средние значения населенностей при этом совпадают с соответствующими компонентами:

$$\langle n_k \rangle = \langle 0|_k, \quad k = 1, 3,$$

а комплексные амплитуды переходов выражаются через соответствующие компоненты с $k > 3$:

$$\langle \hat{\sigma}_{13}^+ \rangle = \frac{\langle 0|_6 + i \langle 0|_7}{\sqrt{2}}, \quad \langle \hat{\sigma}_{23}^+ \rangle = \frac{\langle 0|_8 + i \langle 0|_9}{\sqrt{2}}, \quad \langle \hat{\sigma}_{12}^+ \rangle = \frac{\langle 0|_4 + i \langle 0|_5}{\sqrt{2}}.$$

Приведенные соотношения позволяют выразить поглощение в аналитическом виде, удобным как для численных расчетов, так и для качественного анализа. Это удастся фактически для самого общего случая. Приведем соответствующее выражение для населенности n_3 возбужденного уровня, в котором в описанном наборе параметров лиувиллиана отброшены лишь времена распада γ_{12} , w основного состояния, которые во всех реальных системах являются пренебрежимо малыми и не влияют на поглощение:

$$n_3 = \frac{A\delta_R^2 + B}{C\delta_R^4 + 2C\delta\delta_R^3 + (D + E\delta^2)\delta_R^2 + F\delta\delta_R + G\delta^2 + H}, \quad (11.15)$$

где

$$\begin{aligned} A &= 8\Gamma\Gamma'g^2g'^2, \\ B &= 2\Gamma_{12}g^2g'^2(\Gamma g^2 + \Gamma'g'^2 + 4\Gamma_{12}\Gamma\Gamma'), \\ C &= 16g^2\Gamma\Gamma', \\ D &= -8\Gamma'\Gamma g^4 + 16\Gamma\Gamma'(\Gamma'\Gamma g^2 + \Gamma\Gamma g'^2) + 16\Gamma_{12}^2\Gamma'\Gamma g^2 \\ &\quad + 4(\Gamma_{12}\Gamma' - \Gamma(\Gamma + \Gamma' - 6\Gamma'))g^2g'^2, \\ E &= 16(\Gamma'\Gamma g^2 + \Gamma\Gamma'g'^2), \\ F &= 4[2\Gamma'\Gamma g^4 - 2\Gamma\Gamma'g'^4 - 8\Gamma_{12}^2\Gamma'\Gamma g^2 \\ &\quad + g^2g'^2((\Gamma + \Gamma')(\Gamma - \Gamma') - \Gamma_{12}(\Gamma + 3\Gamma'))], \\ G &= 8\Gamma_{12}(2\Gamma_{12}(\Gamma'\Gamma g^2 + \Gamma\Gamma'g'^2) + (\Gamma + \Gamma')g^2g'^2), \\ H &= (\Gamma g^2 + \Gamma'g'^2 + 4\Gamma_{12}\Gamma\Gamma') \\ &\quad \times (\Gamma'g^4 + \Gamma g'^4 + 4\Gamma_{12}(\Gamma'\Gamma'g^2 + \Gamma\Gamma g'^2) + (\Gamma + \Gamma' + 6\Gamma_{12})g^2g'^2). \end{aligned}$$

Узкий по сравнению с шириной однофотонного резонанса провал в зависимости населенности возбужденного состояния от рамановской расстройки в окрестности ее нулевого значения соответствует КПН. Для реальных значений Γ_{12} в современных экспериментах он может быть на много порядков уже изображенного на рис. 11.2.

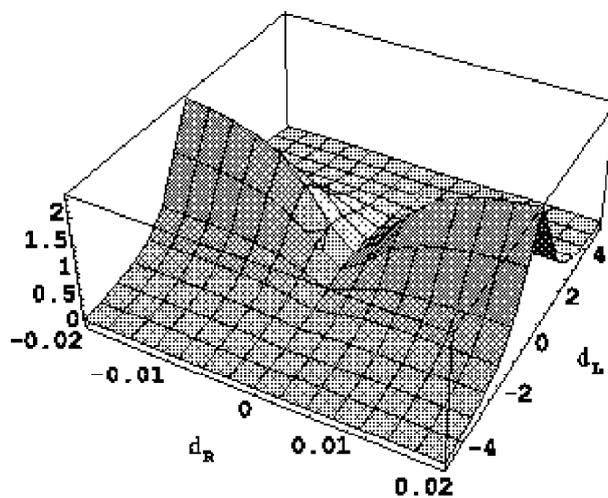


Рис. 11.2: Зависимость населенности возбужденного состояния от однофотонной расстройки $\delta_L = \omega_L - \omega_{13}$ и рамановской расстройки $\delta_R = \omega'_L - \omega_L - \omega_{12}$ для симметричной Λ -системы со скоростями радиационного распада $\gamma_{31} = \gamma_{32} = 1$, частотами Раби $g = g' = 0.1$, нулевыми скоростями чистой дефазировки дипольных переходов Γ_e, Γ'_e и скоростями распада γ_{12}, w основного состояния, для значения скорости дефазировки основного состояния $\Gamma_{12} = 0.001$. График построен с использованием пакета *Mathematica 3.0*.

Глава 12

Квантовые флуктуации в квазиклассических системах

12.1 Квазиклассический расчет обобщенного лиувиллиана

Для квазиклассических систем расчет обобщенного лиувиллиана существенно упрощается за счет возможности ограничения в представлении Вигнера (3.45) квантовой скобки Пуассона конечным числом членов разложения по $C \sim \hbar$. Анализируя с этой точки зрения формулу (6.14) для релаксационного супероператора, соответствующего каноническому гамильтониану взаимодействия (6.13), нетрудно видеть, что старшее по \hbar приближение соответствует просто замене всех квантовых скобок Пуассона классическими и пренебрежению квантовой спецификой умножения при расчете внешнего антикоммутатора $[\cdot, \cdot]_+$ (последнее справедливо благодаря симметризации этого умножения, из-за чего возникающие в первом порядке по \hbar в соответствии с правилом умножения (3.44) члены с $\pm i\hbar/2$ сокращаются). Это дает

$$\mathcal{L}_r = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \int_t^{t+\Delta} d\tau_2 \int_t^{\tau_2} d\tau_1 \times \quad (12.1)$$
$$\times \left[K_{\mu\nu}(\tau_1, \tau_2) \{F_\mu(\tau_1), \{F_\nu(\tau_2), \odot\}\} - \frac{i}{\hbar} C_{\mu\nu}(\tau_1, \tau_2) F_\mu(\tau_1) \{F_\nu(\tau_2), \odot\} \right],$$

где $F_\lambda(\tau) = F_\lambda(X, \tau)$ описывают в представлении Вигнера переменные ОС $\hat{F}(\tau)$ без учета взаимодействия с резервуаром. Первое слагаемое описывает температурно зависимые квантовые флуктуации, приводящее к диффузии, в то время как второе слагаемое описывает классическое затухание. Действительно, для термодинамически равновесного шума ξ в соответствии с формулой Планка корреляционная матрица $K_{\mu\nu}$ имеет порядок kT при высоких температурах а при низких температурах пропорциональна \hbar , поскольку определяется только вакуумной энергией. Коммутатор же $C_{\mu\nu}$ пропорционален \hbar и не зависит от температуры. Поэтому при $T \rightarrow 0$, $\hbar \rightarrow 0$ в этом супероператоре сохраняется только второй член, который описывает, следовательно, только классическое затухание и эффекты типа классического смещения частоты осциллятора, поскольку никаких флуктуаций в этом пределе нет.

Для линейных ОС, как нетрудно видеть, супероператор (12.1) для случая взаимодей-

ствия с резервуаром через обобщенные координаты $\hat{F} = \hat{X}$ имеет вид

$$\mathcal{L}_r = \sum \left(D_{\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial X_\mu \partial X_\nu} - G_{\mu\nu} X_\mu \frac{\partial}{\partial X_\nu} \right). \quad (12.2)$$

Здесь $D_{\mu\nu}$ — матрица диффузии, $G_{\mu\nu}$ — матрица, описывающая затухание и частотные смещения.

Таким образом, в квазиклассической ОС в рамках старшего приближения по \hbar диффузионный процесс содержит наряду с классическим затуханием и квантовую диффузию. Квантовая диффузия, несмотря на относительную малость, может, тем не менее, быть очень существенной в условиях, когда динамика рассматриваемой ОС очень критична к ее наличию. Это имеет место, например, для динамики электронов в ускорителях [54], где геометрическая область устойчивости движения также мала по отношению к геометрическому размеру системы.

12.2 Стохастические квантовые уравнения

Для квазиклассических ОС эффективно описание динамики с помощью стохастических уравнений для временных производных физических переменных, в которых наряду с релаксацией сохранены шумы, порождающие флуктуации в ОС. Такого типа уравнения в приложениях называются уравнениями Ланжевена, а основанный на их использовании подход к анализу ОС называется ланжевенским. Они могут быть выведены в общем виде с использованием обобщенного лиувиллиана. При этом также следует исходить из представления взаимодействия в такой форме, чтобы исключить быстрые динамические осцилляции. Для этого следует представлять переменные ОС медленно меняющимися операторами $\hat{A}(t)$, через которые в представлении Гейзенберга в составной системе переменные ОС имеют вид

$$\hat{A}(t) = U_0^{-1}(t) \hat{A}(t) U_0(t), \quad (12.3)$$

где $U_0(t)$ описывает движение ОС в отсутствие резервуара. В этом случае зависимость $\hat{A}(t)$ аналогична медленно меняющейся амплитуде классического осциллятора, причем она учитывает и возмущение резервуара. Эта зависимость задается стохастическим преобразованием

$$\mathcal{S}_\xi = T \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t [\hat{\mathcal{H}}_\xi(\tau), \odot] d\tau \right\},$$

в котором шум резервуара описывается в представлении взаимодействия гейзенберговскими операторами $\hat{\xi}(t)$ невозмущенного резервуара.

Рассмотрим усредненный по времени оператор

$$\left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle_\Delta = \frac{1}{\Delta} [\hat{A}(t + \Delta) - \hat{A}(t)] \equiv \frac{1}{\Delta} \int_t^{t+\Delta} \frac{d\hat{A}}{d\tau} d\tau.$$

Он может быть выражен через неусредненное флуктуирующее преобразование перехода \mathcal{S}_ξ в виде

$$\left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle_\Delta = \frac{1}{\Delta} [\mathcal{S}_\xi(t, t + \Delta) - 1] \hat{A}. \quad (12.4)$$

Выделяя здесь в правой части усредненное по ξ преобразование и флуктуационное отклонение от нее, для $\tau_c \ll \Delta \ll \tau_r$, получаем *уравнение Ланжевена*, сглаженное по физически малым временным интервалам Δ :

$$\left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle_{\Delta} = \mathcal{L}_r \hat{A} + \langle \hat{\eta}(t) \rangle_{\Delta}, \quad (12.5)$$

где квантовые случайные силы $\langle \hat{\eta}(t) \rangle_{\Delta}$ имеют вид

$$\langle \hat{\eta}(t) \rangle_{\Delta} = \frac{1}{\Delta} [\mathcal{S}_{\xi}(t, t + \Delta) - \langle \mathcal{S}_{\xi}(t, t + \Delta) \rangle_{\xi}] \hat{A}. \quad (12.6)$$

В условиях релаксации диффузионного типа после замены $\mathcal{S}_{\xi}(t, t + \Delta)$ на коммутатор с гамильтонианом $\hat{\mathcal{H}}_{\xi}$ получаем выражение для шума при $\Delta \rightarrow 0$

$$\hat{\eta}(t) = \frac{i}{\hbar \Delta} \int_t^{t+\Delta} [\hat{\mathcal{H}}_{\xi}(\tau), \hat{A}(t)] d\tau. \quad (12.7)$$

Далее возможно использование одной из двух моделей — физического или математического белого шума. В первом случае в качестве шума $\xi(t)$ рассматривается непосредственно процесс, входящий в гамильтониан взаимодействия. Его время корреляции хотя и мало, но конечно. В этом случае можно рассмотреть в (12.7) предел $\Delta \rightarrow 0$ без модификации $\xi(t)$ и получить в качестве *ланжевенского* шума модель физического белого шума

$$\hat{\eta}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}_{\xi}(t), \hat{A}(t)]. \quad (12.8)$$

Он имеет конечное малое время корреляции, которое, однако, в силу малости не входит непосредственно в конечные результаты, определяемые спектральной плотностью на нулевой частоте (здесь предполагается, что все высокочастотные осцилляции уже учтены в гамильтониане $\hat{\mathcal{H}}_{\xi}(t)$ благодаря использованию представления взаимодействия). Для перехода же к модели математического белого шума в качестве $\hat{\eta}(t)$ следует использовать эквивалентный шум с той же локальной спектральной плотностью, но с нулевым временем корреляции.

Учитывая, что в пределе $\Delta \rightarrow 0$ флуктуация этого шума стремится к бесконечности, получаем, что адекватным его предельным представлением является белый шум $\hat{\zeta}$ с сингулярной корреляционной функцией

$$\begin{aligned} \hat{K}(t, t + \tau) &= \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} [\mathcal{S}_{\xi}(t, t + \Delta) - \langle \mathcal{S}_{\xi}(t, t + \Delta) \rangle_{\xi}] \hat{A} \\ &= [\mathcal{S}_{\xi}(t, t + \Delta) - \langle \mathcal{S}_{\xi}(t, t + \Delta) \rangle_{\xi}] [\hat{A}(t) \otimes \hat{A}(t)] \delta(\tau). \end{aligned} \quad (12.9)$$

С использованием конкретного вида гамильтониана взаимодействия можно выразить (12.9) через белый шум, описывающий непосредственно шум резервуара. В частности, для гамильтониана вида (6.13) в условиях релаксации диффузионного типа, после замены $\mathcal{S}_{\xi}(t, t + \Delta)$ на коммутатор с гамильтонианом (6.13) можно с использованием структурных коэффициентов выразить шум (12.6) в виде линейной комбинации произведения белого шума и базисных операторов. В этом случае в физическом белом шуме, определяемом выражением

$$\left. \frac{d\hat{A}}{dt} \right|_{\xi} = \frac{i}{\hbar} \sum \hat{\xi}_{\nu} [\hat{F}_{\nu}, \hat{A}],$$

при желании нетрудно ввести взамен него соответствующий математический белый шум путем замены физических шумов $\hat{\xi}_\nu$ на эквивалентные им математические белые шумы. В реальных же расчетах необходимость в такой замене отсутствует, поскольку предельный переход $\tau_c \rightarrow 0$ может быть выполнен на стадии выполнения расчетов с физическим белым шумом.

Таким образом, после выполнения предельного перехода $\Delta \rightarrow 0$ уравнение (12.5) переходит в уравнение Ланжевена для мгновенных значений физических величин

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \mathcal{L}_r \hat{A} + \hat{\eta}(t), \quad (12.10)$$

в котором в правой части может использоваться как математический, так и физический белый шум, вычисляемый для диффузионных процессов как квантовая скобка Пуассона с гамильтонианом взаимодействия с резервуаром. В квазиклассических ОС после перехода к представлению Вигнера оно может исследоваться как обычное уравнение для классической системы, в котором шум имеет квантовое происхождение, но описывается как классический с корреляционной функцией, равной симметризованному квантовому коррелятору. Ланжевенский подход нашел широкое применение при анализе самых различных квантовых ОС, в частности, в теории лазера [25] и в теории ДА [55] (см. Приложение В). Здесь рассматривается его применение к анализу квантовой раскачки колебаний электронов в ускорителях, где, благодаря квазиклассичности ОС, этот подход особенно эффективен.

12.3 Квантовые флуктуации электронов в ускорителях

Для электронов в ускорителях принципиальная роль квантовых шумов состоит в возбуждении квантовых флуктуаций, приводящих к конечной амплитуде колебаний относительно равновесной траектории. Это обстоятельство требует точного учета, поскольку вследствие очень большого геометрического масштаба траектории эти флуктуационные отклонения могут быть не малы по сравнению с областью устойчивости. Хотя данная проблема относится к области квантовой теории релятивистского электрона, она является существенно квазиклассической вследствие большой величины релятивистской массы γm , $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ при больших значениях энергии ускоренного электрона. Поэтому в данном случае вместо рассмотрения релятивистского электронно-позитронного поля [56] достаточно исходить из одноэлектронного приближения и использовать ланжевенский подход при квазиклассическом описании электронной динамики. Более того, эта задача является линейной.

На рис. 12.1 показаны равновесная траектория и осцилляции искаженной траектории. Существует несколько степеней свободы этих осцилляций, что несколько осложняет теорию. Здесь мы обсудим только наиболее простой тип колебаний — вертикальные (вдоль оси Z) бетатронные колебания, которые отличаются тем, что они описываются независимо от остальных типов колебаний. Амплитуды осцилляций предполагаются малыми, т. е. колебания должны описываться линейным уравнением. Это уравнение имеет вид

$$\gamma m \frac{d^2 z}{dt^2} = -\gamma m \omega_z^2 z - \gamma m \Gamma \frac{dz}{dt} + F_z(t), \quad (12.11)$$

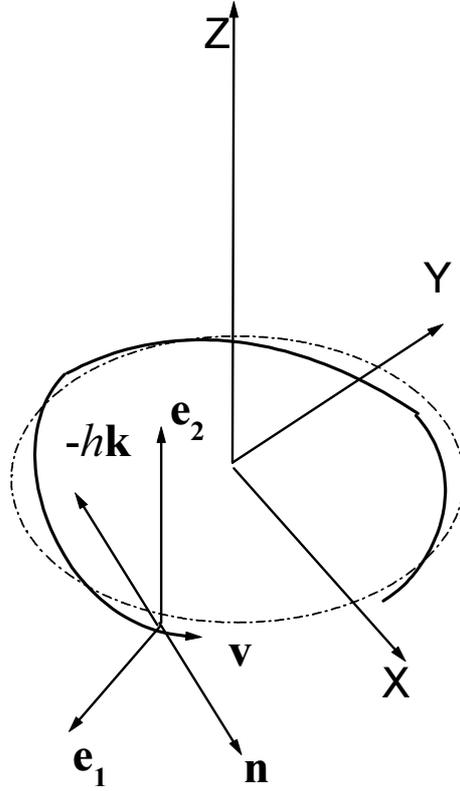


Рис. 12.1: Равновесная траектория, бетатронные осцилляции и формирование импульса отдачи излучения ультррелятивистского электрона в ускорителе. Импульс отдачи $-\hbar\mathbf{k}$ имеет ненулевую составляющую по оси z .

где ω_z — частота рассматриваемых колебаний, Γ — затухание и $F_z(t)$ — z -компонента ланжевеновской силы, обусловленной процессом излучения электрона на орбите. Для стационарной дисперсии флуктуаций, используя преобразование Фурье, получаем

$$\sigma_z^2 = \frac{N_{zz}}{2\omega_z^2 m^2 \gamma^2 \Gamma}, \quad (12.12)$$

где N_{zz} — спектральная плотность флуктуаций силы $F_z(t)$ на частоте ω_z . С учетом п. 12.2 флуктуации $F_z(t)$ описываются симметризованной корреляционной функцией соответствующей квантовой силы, представленной в квантовом уравнении Гейзенберга.

Сила $F_z(t)$ описывается z -проекцией квантовой электромагнитной силы Лоренца, обусловленной вакуумным электромагнитным полем:

$$\hat{\mathbf{F}}_0(t) = -e\hat{\mathbf{E}}_0 - \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}_0]. \quad (12.13)$$

Здесь \mathbf{E}_0 , \mathbf{H}_0 — напряженности электрического и магнитного полей, которые могут быть рассчитаны с использованием разложения по плоским волнам типа разложения (8.37). Чтобы понять характер этой силы, рассмотрим выражение (12.13) для векторов \mathbf{E}_0 , \mathbf{H}_0 одной плоской волны с волновым вектором $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$ и векторным потенциалом вида $\mathbf{A}_\lambda(\mathbf{r}, t) = A_\lambda(\mathbf{k})\mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k}) \exp(-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r})$, $\omega = ck$, соответствующим поляризации $\mathbf{e}_\lambda(\mathbf{k})$:

$$\mathbf{F}_\lambda(\mathbf{k}) = -iek \left[\left(1 - \frac{\mathbf{nv}}{c}\right) \mathbf{e}_\lambda + \frac{\mathbf{ve}_\lambda}{c} \mathbf{n} \right] A_\lambda(\mathbf{k}) \exp[-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}_e(t)], \quad (12.14)$$

где $\mathbf{r}_e(t)$ — траектория электрона. Для ультрарелятивистской частицы угол θ между направлением излучаемого поля, с которым взаимодействует электрон, и скоростью электрона \mathbf{v} имеет порядок γ^{-1} . Соответственно, в (12.14) первый член в квадратных скобках пропорционален $1 - \cos\theta \sim \gamma^{-2}$, в то время как второй имеет порядок γ^{-1} . Это является следствием компенсации представленных в (12.14) электрической и магнитной компонент поперечной составляющей силы Лоренца. В нерелятивистском случае поперечная составляющая является преобладающей и определяется, в основном, электрической компонентой. В ультрарелятивистском же случае основной является продольная составляющая, которая является продольной компонентой магнитной силы Лоренца. Она направлена против волнового вектора и в вакуумной силе (12.13) описывает импульс отдачи фотона $-\hbar\mathbf{k}$. Она пропорциональна скорости электрона и осциллирует с частотой ее колебаний, поэтому расчет ее спектральной плотности на частоте рассматриваемых колебаний сводится просто к расчету интегральной по всем частотам мощности флуктуаций импульса отдачи $-\hbar\mathbf{k}$. С учетом этих соображений результат расчета искомой матрицы N спектральной плотности вакуумной силы Лоренца (12.13) выражается через среднеквадратичную величину импульса отдачи:

$$N = \iiint \hbar\mathbf{k}\hbar\mathbf{k}^T \frac{I(\mathbf{k})}{\hbar\omega} d^3\mathbf{k}, \quad (12.15)$$

где $I(\mathbf{k})$ описывает плотность мощности излучения, а $I(\mathbf{k})/\hbar\omega$ — распределение вероятности излучения квантов в \mathbf{k} -пространстве.

Используя zz -компоненту матрицы (12.15) и выражение (12.12) с учетом известных результатов теории излучения для распределения энергии излучения и радиационного затухания [57] получаем окончательное выражение для флуктуаций:

$$\sigma_z^2 = \frac{13\sqrt{3}}{48} \frac{\hbar}{m\omega_z\sqrt{n}}, \quad (12.16)$$

где n обозначает отношение квадрата частоты вертикальных бетатронных колебаний к квадрату частоты обращения на орбите, которая определяет интенсивность излучения. Величина σ_z^2 существенно превосходит уровень квантовых флуктуаций вакуумного состояния рассматриваемого гармонического осциллятора

$$\sigma_0^2 = \frac{\hbar}{2\gamma m\omega_z}, \quad (12.17)$$

зависящий, в отличие от σ_z^2 , от релятивистской массы. В выражении же (12.16) для σ_z^2 релятивистский фактор γ отсутствует, поскольку возрастание релятивистской массы при росте энергии электрона компенсируется возрастанием мощности излучения, возбуждающего колебания. Бетатронные колебания сильно возбуждаются в процессе излучения и, как следует из сравнения флуктуаций (12.12), (12.17), соответствующее среднее число квантов бетатронных колебаний имеет порядок γ . Для энергий порядка 1 Гэв $\gamma \sim 10^3$. Этому высокому уровню возбуждения соответствует, тем не менее, относительно низкое значение температуры $T \sim 1$ К. Это обусловлено малым значением энергии кванта для частот бетатронных колебаний, поскольку они лежат в радиодиапазоне.

Таким образом, из проведенного анализа следует, что физическая картина раскачки электронных колебаний импульсами отдачи излучаемых фотонов в рамках адекватной асимптотики строго следует из построенных в п. 12.2 квазиклассических уравнений Ланжевена.

Глава 13

Квантово-полевые открытые системы: релаксация и флуктуации фононных возбуждений

13.1 Специфика квантово-полевых ОС

Физические примеры ОС, изученные в *Главах 7–10*, относительно просты в том отношении, что для них в самой исходной структуре гамильтониана заложено естественное разделение на ОС и резервуар. Это не всегда так, и примером является любое поле, в котором роль ОС играет то возбуждение, скажем, собственная волна, которое возникает в специфических условиях, соответствующих рассматриваемой специальной задаче. Поэтому для применения изложенных выше общих методов теории ОС необходимо предварительно в общем виде обсудить проблему выделения рассматриваемой ОС в форме, описанной в п. 4.1 *Главы 4*. Мы здесь сделаем это не в абстрактных обозначениях, а на примере фононной системы твердого тела. В действительности, излагаемая идеология является очень общей и, очевидно, может быть распространена на любые поля, включая те, которые описывают фундаментальные взаимодействия элементарных частиц в физическом вакууме [58]. Общая схема введения ОС в таких системах имеет следующий вид:

$$\begin{array}{ccccccc} \text{свободное} & & \text{выделенное} & & \text{другие} & & \text{расчет} \\ \text{поле} & \Rightarrow & \text{возбуждение} & \Rightarrow & \text{возбуждения} & \Rightarrow & \text{взаимодействия} \end{array}$$

Сначала рассматривается линейный гамильтониан *свободного поля* в базисе, собственном для представляющих интерес возбуждений. Этот гамильтониан представляется в виде суммы одного или нескольких выделенных возбуждений, описывающих собственно ОС, и остальных, описывающих резервуар. Далее рассматривается нелинейная часть полевого гамильтониана, которая описывает взаимодействие между (квази)частицами свободного поля и соответствует рассматривавшемуся ранее гамильтониану $\hat{\mathcal{H}}_{\xi}$ взаимодействия ОС с шумами, и рассчитываются соответствующие релаксационно-флуктуационные характеристики. В качестве резервуара может выступать как само исходное поле, так и другие поля, так что приведенный в п. 4.1 список примеров ОС может быть неограниченно расширен за счет ОС такого типа.

13.2 Роль линейных и нелинейных процессов в фононной системе

Модель фононной системы строится на основе представления об ансамбле из n_σ сортов частиц — атомов кристалла — с потенциалом взаимодействия, имеющим минимум для периодической конфигурации частиц и квадратичным по малым отклонениям от положения равновесия [59, 60]. Квадратичная (гармоническая) часть гамильтониана описывает поле свободных фононов, представление о которых естественно возникает после замены исходных координат и импульсов частиц на набор нормальных координат и сопряженных импульсов. В этом представлении гамильтониан имеет вид суммы энергий невзаимодействующих гармонических осцилляторов — собственных колебаний. Кванты этих колебаний и есть фононы, описываемые аналогично фотонам электромагнитного поля операторами порождения и уничтожения $\hat{b}_s^+(\mathbf{k})$, $\hat{b}_s(\mathbf{k})$ фононов s -ой колебательной моды с волновым вектором \mathbf{k} . Гамильтониан свободных фононов имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_s \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_s(\mathbf{k}) \hat{b}_s^+(\mathbf{k}) \hat{b}_s(\mathbf{k}). \quad (13.1)$$

Здесь $\omega_s(\mathbf{k})$ описывают частоты фононных мод; волновые векторы принимают дискретные значения, лежащие в первой зоне Бриллюена обратной решетки, которой достаточно для Фурье-представления функций, заданных на исходной периодической решетке. При этом число N точек \mathbf{k} равно числу элементарных ячеек в объеме кристалла V : $N = V/\Omega$, где Ω — объем ячейки.

Равновесные координаты атомов задаются составным индексом $\mu = (\mathbf{m}, \sigma)$, где \mathbf{m} — трехкомпонентный индекс ячейки, а σ — номер сорта атома:

$$\mathbf{r}_\mu = m_x \mathbf{a}_x + m_y \mathbf{a}_y + m_z \mathbf{a}_z + \mathbf{a}_\sigma, \quad (13.2)$$

где $\mathbf{a}_{x,y,z}$ — базисные векторы решетки, \mathbf{a}_σ — координаты атомов в ячейке с $m_x = m_y = m_z = 0$. Операторы смещений $\Delta \hat{\mathbf{r}}_\mu$ координат атомов относительно их равновесных значений \mathbf{r}_μ описываются выражением

$$\Delta \hat{\mathbf{r}}_\mu = \sum_s \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{g}_\sigma^s(\mathbf{k}) \left[\hat{b}_s(\mathbf{k}, t) + \hat{b}_s^+(-\mathbf{k}, t) \right] \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_\mu), \quad (13.3)$$

$$\hat{b}_s(\mathbf{k}, t) = \hat{b}_s(\mathbf{k}) \exp[-i\omega_s(\mathbf{k})t].$$

Здесь

$$\mathbf{g}_\sigma^s(\mathbf{k}) = \left[\frac{\hbar \Omega}{8\pi^3 m_\sigma \omega_s(\mathbf{k})} \right]^{1/2} \mathbf{e}_\sigma^s, \quad (13.4)$$

где \mathbf{e}_σ^s описывают векторы поляризации колебаний s -ой моды для σ -го атома, m_σ — масса σ -го атома.

Свободное поле фононов, описываемое гамильтонианом (13.1), как это следует из представлений квантовой динамики, рассмотренных в Главы 3 (п.п. 3.2, 3.3), с точки зрения динамики является классическим объектом, проявляющим квантовые свойства лишь в специфике пространства квантовых состояний: в наличии вакуумных флуктуаций — как следствие соотношения неопределенностей, и в ненулевой энергии кванта при энергообмене с другими степенями свободы. Классичность динамики наиболее наглядна

для состояний фононного поля, описываемых когерентными состояниями Ψ_C , для которых

$$\hat{b}_s(\mathbf{k})\Psi_C = b_s(\mathbf{k})\Psi_C \quad (13.5)$$

для любых s, \mathbf{k} . Здесь $b_s(\mathbf{k})$ описывают классические комплексные амплитуды фононов, которым в соответствии с выражением (13.3) отвечают классические собственные волны

$$b_s(\mathbf{r}, t) = b_s(\mathbf{k}) \exp[-i\omega_s(\mathbf{k})t + i\mathbf{k}\mathbf{r}_\mu]. \quad (13.6)$$

Качественный смысл состояния когерентного состояния Ψ_C состоит в том, что оно является аналогом вакуумного состояния Ψ_0 с тем отличием, что оно эквивалентным образом описывает замену операторов уничтожения на смещенные операторы $\hat{b}_s(\mathbf{k}) + b_s(\mathbf{k})$, т. е. операторы поля имеют классическую добавку к вакуумным флуктуациям. Любая линейная комбинация собственных возбуждений вида (13.6), соответствующая одной и той же частоте $\omega = \omega_s(\mathbf{k})$, имеет неизменное во времени пространственное распределение:

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, t) = \exp(-i\omega t) \sum_{s, \mathbf{k}} \mathbf{g}_\sigma^s(\mathbf{k}) b_s(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_\mu),$$

т. е. \mathbf{G} является стационарным возбуждением. Несмотря на то, что возбуждения b_s , \mathbf{G} являются многофононными и описывающие их волновые функции в представлении Шредингера содержат осцилляции с n -фононными частотами $n\omega_s(\mathbf{k})$, для когерентных состояний это не проявляется, так как операторы $\hat{b}_s(\mathbf{k})$ содержат только матричные элементы, соответствующие переходам $n\omega_s(\mathbf{k}) \rightarrow (n-1)\omega_s(\mathbf{k})$ и осциллирующие с однофононной частотой $\omega_s(\mathbf{k})$. Для свободного фононного поля нет никакого отличия между временными характеристиками, следующими из классической теории, и соответствующими им квантовыми результатами. При этом во взаимодействиях свободного фононного поля с другими частицами роль фононов в спектрах проявляется в появлении комбинационных линий с добавлением или вычитанием невозмущенных частот фононов по тем же законам, которые справедливы и для классических систем. Отличие от классических систем при этом связано лишь с возможностью неклассичности равновесного теплового распределения при низких температурах, когда нарушается соотношение $\hbar\omega_s(\mathbf{k})/kT \ll 1$.

Альтернативным описанному квазиклассическому представлению фононной системы является представление в чисто квантовых терминах волновой функции. В этом случае рассматриваемые базисные n -фононные возбуждения имеют чисто квантовый характер, и рассмотренные выше когерентные возбуждения представляются их суперпозициями. С использованием вакуумной волновой функции фононного поля Ψ_0 волновые функции n -фононных состояний представляются в виде

$$\Psi_n = \sum_{s_1, \mathbf{k}_1, \dots, s_n, \mathbf{k}_n} \psi(s_1, \mathbf{k}_1, \dots, s_n, \mathbf{k}_n) \hat{b}_{s_n}(\mathbf{k}_n) \dots \hat{b}_{s_1}(\mathbf{k}_1) \Psi_0. \quad (13.7)$$

Здесь $\psi(s_1, \mathbf{k}_1, \dots, s_n, \mathbf{k}_n)$ описывает волновую функцию n -фононной системы. Набор этих функций задает состояние в терминах *представления Фока* [61], в котором сначала фиксируется число квантов, а затем указывается распределение этих квантов по используемым координатам. Фиксация же вначале координат s, \mathbf{k} и затем рассмотрение n -фононных состояний с фиксированными s, \mathbf{k} называется *представлением чисел заполнения*. Использование квантового описания целесообразно в том случае, если в

рассматриваемых процессах возбуждаются существенно квантовые состояния. Формулировка же временной динамики в квантовых терминах не дает никаких преимуществ и может даже привести к неадекватному ассоциированию физического существа рассматриваемого процесса с квантовым характером фононных колебаний.

В рамках описанной линейной системы нет возможности адекватного объяснения такого определяющего свойства фононной системы как диффузионное распространение тепла. Любые возбуждения распространяются в ней со скоростями соответствующих волн, т. е. скорости распространения имеют порядок скорости звука, что явно противоречит наблюдаемым свойствам теплообмена. Тепловые процессы правильно описываются только с учетом нелинейной части гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_{\text{NL}}$, который описывает взаимодействие между свободными фононами. С учетом этого в теории фононного поля возникает понятие *фононной ОС*, образованной некоторой выбранной одномерной системой, соответствующей фононам с координатами s , \mathbf{k} в импульсном представлении, и остальными степенями свободы в качестве резервуара. Релаксационные процессы описываются гамильтонианом $\hat{\mathcal{H}}_{\text{NL}}$. С использованием техники, развитой в *Главах 4, 6, 12*, можно рассчитать релаксационный супероператор \mathcal{L}_T и смоделировать соответствующие ланжевеновские шумы, возникающие за счет других фононов. Подобная техника расчетов шумового взаимодействия частиц с фононами широко применяется при изучении процессов в кристаллических средах [33].

Учет порождаемой нелинейностью релаксации в системе свободных фононов качественно меняет природу распространения возбуждений. Даже если начальное возбуждение являлось когерентным, т. е. было близким к собственному, то с течением времени оно затухает, т. е. время жизни и время пробега фонона конечны. Исходный фонон рассеивается в широкий спектр фононов, превращаясь в некогерентное, т. е. в тепловое возбуждение.¹ Если же начальное возбуждение носит некогерентный характер и локализовано в пространстве, то оно распространяется по закону диффузии, поскольку каждый из пространственно локализованных фононов превращается в некогерентный набор новых с расширяющейся за счет их распространения областью локализации. Конкретные расчеты теплопроводности довольно сложны из-за объективной сложности рассматриваемой системы [60], однако они не выходят за рамки изложенной теории релаксации ОС.

13.3 Квазиклассичность затухания и теплосопrotivления

Покажем, как даже без вычислений можно сделать качественные выводы о процессе теплообмена с использованием старшего квазиклассического приближения для релаксационного супероператора (12.1). В данном случае входящие в него корреляционная и коммутационная матрица описывают шум $\hat{\xi}$, возникающий в гамильтониане фонон-фононного взаимодействия $\hat{\mathcal{H}}_{\text{NL}}$. В случае кубического члена оно имеет структуру $\hat{\xi}(\hat{b} + \hat{b}^+)$, где \hat{b} , \hat{b}^+ относятся к выделенному фонону, а $\hat{\xi} \sim \hat{b}\hat{b}^+$ описывает шум, квадратичный

¹При этом возможны качественно отличные типы рассеяния возбуждений в зависимости от того, преобладают процессы рассеяния с сохранением фононного импульса или так называемые “процессы переброса”: обычные свойства распространения тепла имеют место в последнем случае. Подробнее см. [59, 60] и цитированную в [60] литературу.

по операторам порождения-уничтожения других фононов. Затухание в (12.1) определяется коммутатором $C = \langle [\hat{\xi}(\tau_1), \hat{\xi}(\tau_2)] \rangle$. Выполнив перестановки в комбинациях вида $\hat{b}_1 \hat{b}_2 \hat{b}_3 \hat{b}_4$ с учетом коммутационных соотношений

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_l^+] = \delta_{kl}, \quad [\hat{b}_k, \hat{b}_l] = [\hat{b}_k^+, \hat{b}_l^+] = 0,$$

получаем для C качественное соотношение

$$\sim \hbar^2 (\langle n \rangle + 1). \quad (13.8)$$

Из полученного выражения для C видно, что затухание в (12.1) при высоких температурах, когда $\langle n \rangle \sim kT/\hbar\omega$, не содержит постоянной Планка и линейно зависит от температуры. Соответственно, затухание пропорционально T , а длина пробега имеет обратную температурную зависимость $l \sim 1/T$ (ср. [60], стр. 196). Это затухание квазиклассично, и в его расчете можно было при желании полностью исключить появление постоянной Планка. Действительно, величина C/\hbar описывает скобку Пуассона резервуара (см. п. 6.3). При этом в квазиклассической асимптотике $C/\hbar \sim \hbar \langle n \rangle \sim kT/\omega$ есть квазиклассическое приближение для усредненной скобки Пуассона случайной силы, квадратичной по атомным отклонениям, которая пропорциональна среднеквадратичным флуктуациям координат и импульсов. При уменьшении квазиклассических флуктуаций квазиклассический вклад рассматриваемого канала затухания стремится к нулю, и остается только вакуумный квантовый вклад, не исчезающий и при нулевой температуре.

Расчет теплосопrotivления связан дополнительно с учетом в кинетике релаксационных процессов величины энергетических вкладов различных колебаний, которые определяют фононную теплоемкость. При высоких температурах теплоемкость также рассчитывается по классической теории, так что теория теплоемкости может быть полностью изложена как классическая и в рамках теории релаксации ОС.

13.4 Спектроскопические проявления фононного ангармонизма

Помимо *однофононных возбуждений*, линейных по операторам $\hat{b}_s(\mathbf{k})$, $\hat{b}_s^+(\mathbf{k})$ переменных фононного поля, представляют интерес и нелинейные характеристики фононной системы. При этом, в отличие от точечных систем, в данном случае возможны комбинации операторов, относящихся к различным модам. Важным примером являются двухфононные возбуждения

$$\hat{B}_2(s_1, s_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \hat{b}_{s_1}(\mathbf{k}_1) \hat{b}_{s_2}(\mathbf{k}_2). \quad (13.9)$$

Они существенны, в частности, при рассмотрении комбинационных откликов твердого тела на лазерное воздействие. В общем случае такие возбуждения имеют сплошной спектр, если возбужденный набор волновых векторов \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 не подчинен какому-либо специальному условию для обеспечения узкополосности возбуждения.

Двухфононные возбуждения не могут быть наблюдаемы в кристаллах с точно гармоническим потенциалом в линейном отклике на лазерное ИК-возбуждение. Действительно, при формировании линейного отклика поле взаимодействует с линейными по $\hat{b}_s(\mathbf{k})$, $\hat{b}_s^+(\mathbf{k})$ переменными. При наличии двухфононных возбуждений эти переменные испытывают возмущение, описываемое слагаемыми третьего порядка по \hat{b}_s , \hat{b}_s^+ , т. е. содержат лишь третьи гармоники, но не содержат вторых. Принципиальная роль кубического

члена $\hat{\mathcal{H}}_3$ в ангармоническом фононном потенциале $\hat{\mathcal{H}}_{\text{NL}}$ состоит в модификации уравнений движения с дополнением их коммутаторами типа $[(\hat{b}^+)^3, \hat{b}] \sim (\hat{b}^+)^2$. Эти членам соответствуют осцилляции на вторых гармониках, которые и соответствуют двухфононным возбуждениям. Таким образом, если имеются двухфононные возбуждения, благодаря ангармонизму третьего порядка они проявляются в однофононном рассеянии лазерного поля. Практически, однако, в случае сплошного спектра наблюдение этих возбуждений затруднительно. Этот спектр ярко выражен лишь в том случае, когда спектр двухфононных возбуждений содержит узкую линию.

Качественные рассуждения и количественный анализ показывает, что такие кристаллы должны существовать [62]. Механизм образования таких возбуждений имеет довольно простой качественный смысл. Это образование связанных в пары однофононных возбуждений, связываемых через ангармоническое взаимодействие, описываемое вкладом в гамильтониан 4 порядка, сохраняющим число фононов:

$$\hat{\mathcal{H}}_4 \sim \sum \hat{B}_2^+(s'_1, s'_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2) V_4 \hat{B}_2(s_1, s_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2). \quad (13.10)$$

Здесь V_4 описывает соответствующую матрицу перехода из одного двухфононного состояния в другое, помеченное штрихованными аргументами. Эта матрица представляет оператор энергии взаимодействия в представлении вторичного квантования. Чтобы нагляднее представить, как это взаимодействие может привести к появлению связанных состояний с дискретной энергией связи, удобнее использовать смешанное координатно-импульсное представление: движение центра фононных пар описывать суммарным импульсом $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$, а относительное движение описывать в координатном представлении разностной координатой \mathbf{r} , учитывая, что после такого перехода разностному импульсу $(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/2$ соответствует производная $-i\partial/\partial\mathbf{r}$.

Собственная энергия пары фононов есть

$$\hat{\mathcal{H}}_p = \hbar [\omega_{s_1}(\mathbf{k}_1) + \omega_{s_2}(\mathbf{k}_2)].$$

С учетом указанной выше замены получаем оператор кинетической энергии внутреннего движения

$$\hat{\mathcal{H}}_p = \hbar [\omega_{s_1}(\mathbf{k}/2 - i\partial/\partial\mathbf{r}) + \omega_{s_2}(\mathbf{k}/2 + i\partial/\partial\mathbf{r})]. \quad (13.11)$$

Этот оператор становится полностью аналогичным оператору кинетической энергии относительного движения двух материальных точек, если ограничиться параболическим приближением зависимости $\omega_s(\mathbf{k})$ при $s_1 = s_2 = s$. Он отличается лишь видом обобщенной массы $\hbar/4\omega_s''(\mathbf{k})$, входящей в член $-\hbar^2/2m \partial^2/\partial\mathbf{r}^2$. Если параболическая аппроксимация справедлива в достаточно широкой области дисперсионной кривой и нелинейное взаимодействие V_4 описывает притяжение, то очевидно, что суммарный гамильтониан

$$\hat{\mathcal{H}}_B = \hat{\mathcal{H}}_p + V_4 \quad (13.12)$$

может иметь при фиксированном \mathbf{k} дискретный энергетический уровень, описывающей связанное фононное состояние — *бифонон*, описываемый собственной функцией

$$\Psi_B(s_1, s_2, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0),$$

где суммарный импульс \mathbf{k}_0 произволен (его определенность для собственного состояния связана с пространственной однородностью взаимодействия, т. е. инвариантностью гамильтониана относительно сдвига). Область локализации квадрата модуля описанной функции в импульсном и координатном представлении показана на рис. 13.1.

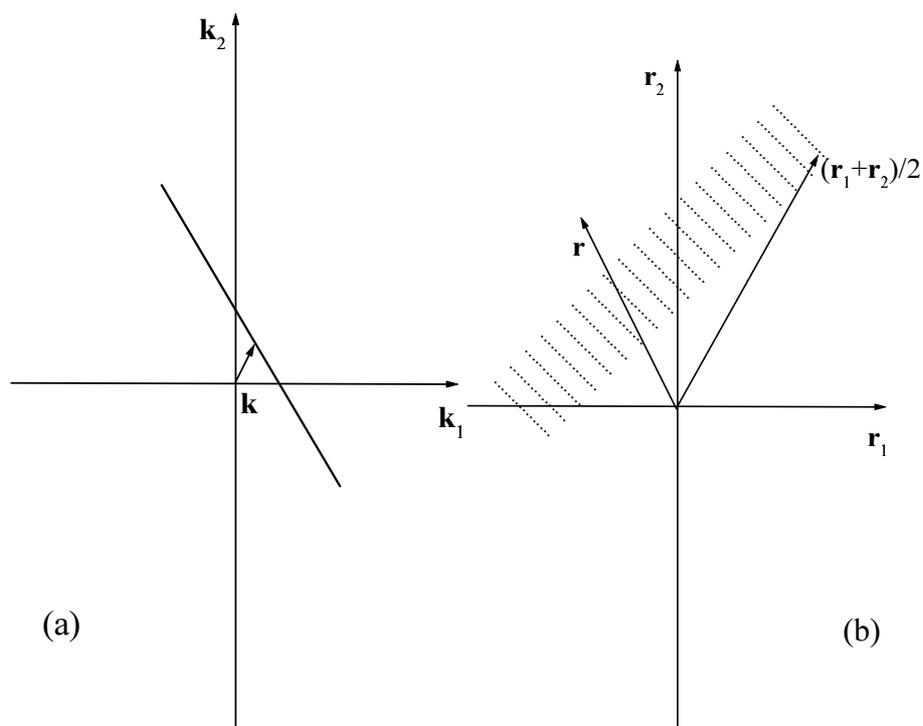


Рис. 13.1: Локализация квадрата модуля собственной волновой функции бифона: (а) — в импульсном представлении; (б) — в координатном представлении. Полная неопределенность по средней координате фононов указывает на то, что возбуждение имеет вид бегущей волны, описывающей движение центра бифона.

Существование дискретного уровня у гамильтониана (13.12) возможно только для оптических фононов, у которых дисперсионная кривая имеет максимум в окрестности $\mathbf{k} = 0$ и описанное параболическое приближение адекватно. При этом зависимость энергии бифона от величины суммарного импульса в достаточно широком диапазоне приводит лишь к относительно слабому уширению уровня. Зависимость от времени соответствующей собственной функции бифона имеет вид

$$\Psi(s_1, s_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, t) = \exp(-i\omega_B t) \Psi_B(s_1, s_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \quad (13.13)$$

где ω_B — частота бифона, включающая наряду с энергией связи сумму собственных энергий при нулевых импульсах и вклад суммарного импульса $\hbar(\omega''_{s_1} + \omega''_{s_2})\mathbf{k}^2/8$. Зависимость частоты бифона от суммарного импульса приводит к уширению бифонного резонанса, аналогичному неоднородному уширению атомов.

Появление в спектрах лазерных откликов линий, соответствующих бифонным резонансам, наблюдалось как в спонтанном рассеянии [62], так и в активной спектроскопии [63]. Бифонные состояния образуют естественно выделенную ОС, для описания которой может быть использован как феноменологический, так и микроскопический подход. Аналогичная ситуация возникает и при рассмотрении других квазичастиц в твердом теле: электронно-дырочных пар в полупроводнике [33], куперовских пар в сверхпроводнике [64] и т. д. Во всех этих приложениях целесообразно использование изложенных методов описания ОС.

Глава 14

Статистическое и динамическое описание процесса квантового измерения

При изложении квантовой теории важную роль играет описание процедуры измерения квантовой величины [7, 11], в результате которого некоторая физическая переменная измерительной системы приобретает значение, в точности равное значению измеряемой квантовой величины, а состояние квантовой системы преобразуется в одну из собственных функций измеряемой переменной с вероятностью, определяемой начальным состоянием. Это преобразование квантового состояния иногда называется постулатом “квантовой редукции” или “коллапса” волновой функции, которому посвящена обширная литература. При обсуждении данного вопроса так же удобно использовать супероператорную технику. Ниже дается определение переходного супероператора составной системы, образованной измеряемой квантовой системой и квазиклассическим измерительным устройством, применительно к классу процедур, включающих как стандартные “неразрушающие” измерения, вводимые постулатом “квантовой редукции” так и “разрушающие” измерения, приводящие после их завершения к искажению состояния не только величин, некоммутирующих с измеряемой, но и самой измеряемой величины. Данное определение дает статистическое описание квантового измерения в терминах теории открытых систем. Затем показывается, как введенное определение неразрушающего измерения возникает из полностью динамического описания процесса измерения, конкретизирующего открытую систему, неявно задаваемую ее переходным супероператором.

14.1 Система объект–прибор и переходной супероператор квантового измерения

Специфика данной квантовой системы состоит в том, что по смыслу самого постулата квантового измерения прибор должен быть “классическим”, т. е. находиться в таком состоянии, в котором квантовый его характер может игнорироваться. По крайней мере, это относится к “индикаторной” переменной измерительной системы, значения которой отождествляются со значениями измеряемой квантовой величины. С учетом этого вместо классического распределения вероятностей $\mathcal{P}(\lambda)$, описывающего состояния индикатора

торной переменной прибора в отсутствие взаимодействия, и матрицы плотности $\hat{\rho}$, описывающей распределение вероятностей изолированной квантовой системы, состояние описывается гибридной матрицей плотности $\hat{R}(\lambda)$, являющейся при фиксированном λ матрицей плотности по квантовым переменным и дающей положительный набор вероятностей $\mathcal{P}(n, \lambda) = \psi_n^+ \hat{R}(\lambda) \psi_n$ для любого ортогонального набора ψ_n . Последнее распределение описывает смешанный набор квантовой и классической переменных $\{\hat{A}, \lambda\}$, где $\hat{A} = \sum \lambda_k \psi_k \psi_k^+$. Супероператор перехода смешанного набора данного типа в состояние, в котором λ точно совпадает с некоторой заданной квантовой переменной в момент времени $t = 0$, а состояние по этой переменной в процессе перехода неизменно, имеет вид:

$$S(\lambda_t, \lambda) = \sum_{\mu} \delta(\lambda_t - \mu) (\hat{P}_{\mu} \odot \hat{P}_{\mu}) = \hat{P}_{\lambda_t} \odot \hat{P}_{\lambda_t}, \quad (14.1)$$

где P_{μ} — собственный набор ортопроекторов измеряемой квантовой переменной с собственными значениями μ , переменные λ соответствуют начальным значениям приборного индикатора, λ_t — конечным. Соответствующее конечное состояние

$$\hat{R}(\lambda_t) = \sum_{\lambda} \hat{P}_{\lambda_t} \hat{R}_0(\lambda) \hat{P}_{\lambda_t}. \quad (14.2)$$

Для $\hat{R}_0(\lambda) = \hat{\rho}_0 \mathcal{P}_0(\lambda)$ с учетом независимости (14.1) от λ получаем

$$\hat{R}(\lambda_t) = \hat{P}_{\lambda_t} \hat{\rho}_0 \hat{P}_{\lambda_t}. \quad (14.3)$$

Это соотношение выражает факт измеренности начальных значений переменных $\hat{A} = \sum \mu \hat{P}_{\mu}$ значениями λ_t . В частности, если $\hat{\rho}_0 = P_{\mu}$, то получаем $\hat{R}(\lambda_t) = \delta_{\lambda_t \mu} \hat{P}_{\mu}$, т. е. показание прибора совпадает с точно заданным начальным значением переменной \hat{A} объекта.

Для более общего обсуждения свойств описанной процедуры измерения следует рассмотреть совместное распределение вероятностей для моментов до и после измерения, рассматривая процедуру усреднения хронологически упорядоченных многомоментных величин [20]. Оно имеет вид

$$\mathcal{R}_{\lambda_t \lambda; k' k, ll'} = \mathcal{S}_{\lambda_t \lambda; k' k, ll'} [\rho_{kl} \mathcal{P}(\lambda)], \quad (14.4)$$

где пара λ_t, λ описывает классические переменные, пара двухиндексных переменных соответствует квантовому состоянию до измерения и после, а $\rho_{kl} \mathcal{P}(\lambda)$ описывает начальное квантово-классическое состояние системы. Рассчитывая средние типа $\langle \delta(\lambda_t - \hat{A}(0)) \rangle$, $\langle \delta(\lambda_t - \hat{A}(t)) \rangle$, $\langle T \delta(\hat{A}(t) - \hat{A}(0)) \rangle$, характеризующие соответствующие точности, можно с этих общих позиций проиллюстрировать смысл утверждения о неизменности измеряемой переменной и отсутствия погрешности измерения. Так,

$$\langle \delta(\lambda_t - \hat{A}(0)) \rangle = \sum_{\lambda_t \lambda} \sum_{k' k, ll'} \delta(\lambda_t - \lambda_k) \delta_{kl} \delta_{k' l'} \mathcal{S}_{\lambda_t \lambda; k' k, ll'} \rho_{kl} \mathcal{P}(\lambda).$$

Учитывая согласно определению (14.1) независимость результата преобразования S с матричными элементами

$$\mathcal{S}_{\lambda_t \lambda; k' k, ll'} = \delta_{kk(\lambda_t)} \delta_{kl} \delta_{k' l'} \delta_{kl'} \quad (14.5)$$

от начального $\mathcal{P}(\lambda)$, получаем точность, равную 1, которой соответствует отсутствие погрешности. Такой же результат получается и для двух других оценок.

Поскольку состояние $\hat{\rho}_0 = \hat{P}_\mu$ с точно определенным значением $\lambda = \mu$ измеряемой переменной неизменно, рассмотренное измерение можно определить как “неразрушающее”. Представляет интерес рассмотреть и более общий класс измерений вида

$$S(\lambda_t, \lambda) = \hat{\Pi}_{\lambda_t} \odot \hat{\Pi}_{\lambda_t}, \quad (14.6)$$

где по сравнению с (14.1) проекторы имеют более общий вид

$$\hat{\Pi}_\lambda = \varphi_\lambda \psi_\lambda^+. \quad (14.7)$$

В этом случае некоторая величина $\hat{B} = \sum \lambda \varphi_\lambda \varphi_\lambda^+$ после измерения копирует величину $\hat{A} = \sum \lambda \psi_\lambda \psi_\lambda^+$ в ее состоянии до измерения в унитарно преобразованном пространстве состояний. Результирующее состояние имеет вид

$$\hat{R}(\lambda_t) = (\psi_{\lambda_t}^+ \hat{\rho} \psi_{\lambda_t}) \varphi_{\lambda_t} \varphi_{\lambda_t}^+. \quad (14.8)$$

Для чистого состояния $\hat{\rho}_0 = \psi_\lambda \psi_\lambda^+$ получаем состояние $\hat{R}(\lambda_t) = \delta_{\lambda_t \lambda} \varphi_\lambda \varphi_\lambda^+$ с точно измеренным начальным значением переменной \hat{A} , переведенной в процессе измерения в переменную \hat{B} .

Подобного типа преобразования начального состояния возникают, например, при рассмотрении лазерного возбуждения одного из состояний ψ_λ дипольно-неактивного перехода в некоторое дипольно-активное состояние и последующей регистрации излучаемого фотона как индикатора начального состояния ψ_λ . Можно выделить два специальных частных случая преобразования (14.7): а) переменные \hat{A} , \hat{B} действуют в ортогональных подпространствах прямой суммы подпространств $H \oplus H$; б) переменные \hat{A} , \hat{B} действуют в общем пространстве так, что волновые функции из собственного для \hat{A} набора ψ_λ неортогональны волновым функциями из собственного для \hat{B} набора φ_λ . В первом случае новые состояния системы ортогональны начальным, и пара \hat{A} , \hat{B} образует коммутативный набор переменных, подчиняющийся классической логике событий, благодаря чему соотношения между результатами измерения и начальным состоянием измеряемой величины имеют классический характер. Во втором случае \hat{A} , \hat{B} некоммутативны, и в процессе измерения появляются специфические квантовые соотношения между результатами измерения и начальным состоянием измеряемой величины, т. к. фактически измеряется модифицированная произвольным унитарным преобразованием копия измеряемой величины. Матричные элементы соответствующего переходного распределения вероятностей имеют вид

$$S_{\lambda_t \lambda; k'k, ll'} = \delta_{kk(\lambda_t)} \delta_{kl} C_{kk'} C_{kl'}^*, \quad (14.9)$$

где C_{kl} — коэффициенты разложения $\varphi_k = \sum_l C_{kl} \psi_l$, представляемые скалярными произведениями $C_{kl} = \psi_l^+ \varphi_k$. Их несингулярный в общем случае вид описывает квантовые корреляции.

14.2 Динамическая модель неразрушающего квантового измерения

В ряде руководств преобразование, выполняемое квантовым измерительным устройством, рассматривается как один из необходимых постулатов квантовой теории. Тем

не менее, исходя только из уравнения Шредингера и рассчитывая вероятности соответствующих квантовых событий по правилам квантовой механики, можно проследить, как супероператорное преобразование квантовой редукции (14.6) возникает в результате динамической эволюции в замкнутой системе {квантовый объект + индикаторная ОС + резервуар}.

Для установления связи между переменной $\hat{A} = \sum \lambda_k \hat{P}_k$ в измерительной системе минимально необходимо иметь *индикаторную* динамическую переменную $\hat{\lambda} = \Lambda(\hat{X})$, зависящую от индикаторных динамических переменных (\hat{X}) некоторой ОС, полный набор переменных которой, включающий переменные резервуара, имеет вид $\hat{\mathcal{X}} = \{\hat{X}, \hat{\Xi}\}$, где шумы $\hat{\Xi}$ не взаимодействуют ни с \hat{A} , ни с другими переменными измеряемой квантовой системы. Наиболее общий вид “неразрушающего”, т. е. коммутирующего с оператором измеряемой переменной \hat{A} , гамильтониана измерительного взаимодействия представляется выражением

$$\hat{H}_I = \sum_{\lambda} \delta(\hat{A} - \lambda) \mathcal{H}_{\lambda}(\hat{X}), \quad (14.10)$$

где δ имеет смысл дискретной функции Кронекера, $\mathcal{H}_{\lambda}(\hat{X})$ — гамильтониан, отвечающий состоянию $\hat{\rho}_{\lambda} = \delta(\hat{A} - \lambda)$ измеряемой системы. Изменение состояния измеряемой системы в результате такого взаимодействия не влияет на переменную \hat{A} , однако вследствие наличия некоммутирующих с \hat{A} переменных те состояния, в которых \hat{A} не имеет определенного значения, претерпевают существенные изменения.

Рассмотрим в терминах замкнутой квантовомеханической системы динамику волновой функции начального состояния, которую следует взять в виде мультипликативного состояния

$$\Psi_0 = c_0(\lambda) \cdot \psi_0(q, \xi), \quad (14.11)$$

где $c_0(\lambda)$ описывает волновую функцию измеряемой системы в собственном представлении для оператора \hat{A} , а $\psi_0(q, \xi)$ — измеряющей системы, где q задает обобщенные координаты ОС, а ξ — резервуара. Оператор временной эволюции с учетом взаимодействия с резервуаром имеет вид

$$U(t) = (U_{\lambda}(t) \delta(\lambda - \lambda')), \quad (14.12)$$

где λ, λ' — матричные индексы измеряемой системы, а

$$U_{\lambda}(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[\mathcal{H}_{\lambda}(\hat{X}) + \mathcal{H}_R(\hat{X}, \hat{\Xi}) \right] t \right\} \quad (14.13)$$

описывают операторы временной эволюции в пространстве всех переменных измерительной системы с учетом действия шумов для фиксированного значения переменной \hat{A} ; \mathcal{H}_R описывает гамильтониан резервуара и его взаимодействие с индикаторной ОС. Соответственно, временная зависимость волновой функции имеет вид

$$\Psi(t) = c_0(\lambda) \cdot \psi_{\lambda}(t), \quad \psi_{\lambda}(t) = U_{\lambda}(t) \psi(q, \xi). \quad (14.14)$$

Чистое состояние (14.14) в системе {квантовый объект + измерительная ОС + резервуар} описывает квантовые статистические связи между объектом и всеми переменными измерительной системы, из которых основной интерес представляют только значения индикаторной переменной λ . Исходя из очевидных требований, предъявляемых к

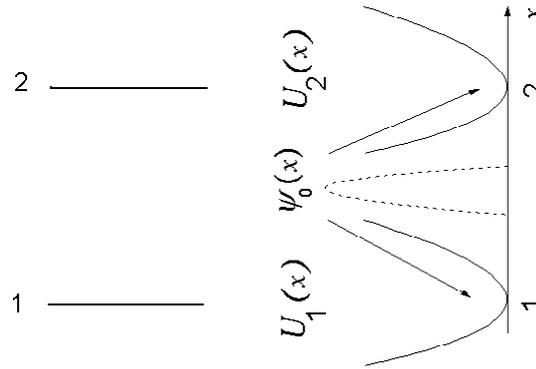


Рис. 14.1: Механизм измерения двухуровневой квантовой системы измерительной системой с потенциалом, определяемым состоянием измеряемой системы.

свойствам измерительной системы, мы можем конкретизировать общие свойства унитарных операторов $U_\lambda(t)$, даже не вникая в детали ее устройства. Динамика, соответствующая гамильтонианам $\mathcal{H}_\lambda(\hat{X})$, при каждом λ должна приводить к тому, чтобы соответствующая динамическая переменная $\Lambda(\hat{X})$ принимала значение λ в пределах некоторой асимптотически малой погрешности ε . Очевидная модель, обеспечивающая это условие, описывается осциллятором с релаксацией к равновесному состоянию со значением $\Lambda(\hat{X}) = \lambda$ с точностью до флуктуаций динамических переменных \hat{X} (см. Рис. 14.1). Этот осциллятор в общем виде имеет, разумеется, квантовую природу, однако, ничто не препятствует ему иметь пренебрежимо малые квантовые флуктуации. Более того, в дополнение к его вакуумным флуктуациям у него могут присутствовать и дополнительные шумы типа тепловых флуктуаций, которые могут приводить к полной несущественности квантового характера флуктуаций. Принципиально квантовый характер переменная $\Lambda(\hat{X})$ имеет только по переменным измеряемого квантового объекта, приобретая зависимость от них в процессе взаимодействия.

Теперь можно проанализировать, чему же после истечения времени релаксации физически соответствует квантовое состояние (14.14) с учетом того, что наблюдатель смотрит только на прибор, т. е. следит только за значением $\Lambda(\hat{X})$, огрубляя ее значение в пределах некоторой малой величины ε . Наличие большого числа дополнительных степеней свободы означает в общем случае существование равновесных флуктуаций вокруг наблюдаемого состояния. Вероятностные распределения в подсистеме {индикатор + объект} описываются соответствующей матрицей плотности

$$\hat{\rho}(t) = c_0(\lambda)c_0^*(\lambda')\hat{\rho}_{\lambda\lambda'}(t), \quad \hat{\rho}_{\lambda\lambda'}(t) = \int \psi_\lambda(t)\psi_{\lambda'}^*(t) dq d\xi. \quad (14.15)$$

Поскольку волновая функция $\psi_\lambda(t)$ в результате релаксационного перехода локализована в окрестности области $\Lambda(q, p) = \lambda$, то недиагональные матричные элементы обращаются в ноль, и матрица плотности приобретает вид

$$\hat{\rho}(t) = |c_0(\lambda)|^2 \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (14.16)$$

что соответствует формуле (14.3), выражающей преобразование квантовой редукции.

Представляет интерес рассмотреть количественные требования к параметрам измерительной системы, что нетрудно сделать для случая линейных осцилляторов, описыва-

емых динамическими уравнениями

$$m \frac{d^2 \hat{x}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\hat{x}}{dt} + m\omega^2(\hat{x} - x_\lambda) = \hat{\eta}(t), \quad (14.17)$$

где m — масса, γ — скорость затухания, ω — частота, x_λ — равновесная координата для потенциала, зависящего от состояния квантовой переменной λ , $\hat{\eta}(t)$ — равновесный квантовый тепловой шум, соответствующий некоторой температуре T . Данное уравнение выражает с помощью параметра затухания γ результат взаимодействия с резервуаром и описывает в терминах ОС соответствующее уравнение Шредингера или его решение (14.14) для волновой функции полного пространства состояний измерительной системы. Решение уравнения (14.17) с заданным операторным начальным условием $m d\hat{x}/dt = \hat{p}$, $\hat{x} = \hat{q}$ для смещенного вакуумного начального состояния с некоторым $\langle \hat{q} \rangle = q_0$, $\langle \hat{p} \rangle = p_0$ может быть описано в терминах некогерентной суперпозиции вакуумных волновых функций

$$\psi_{vac}(q, \kappa, \nu) = \left(\frac{m}{\pi \hbar \omega} \right)^{1/4} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \nu q - \frac{(q - \kappa)^2}{2\hbar \omega / m} \right],$$

смешанных с некоторой плотностью вероятностей $w(\kappa, \nu, t)$ распределения средних координат и импульсов κ, ν , соответствующей уравнению и начальным условиям. В рассматриваемых условиях результирующее состояние является гауссовским и описывается средними значениями и среднеквадратичными отклонениями

$$\begin{aligned} q_\lambda(t) &= x_\lambda + (q_0 - x_\lambda) e^{-\gamma t}, & p_\lambda(t) &= p_0 e^{-\gamma t}, \\ \sigma_{q\lambda}^2(t) &= \sigma_T^2 + (\sigma_0^2 - \sigma_T^2) e^{-2\gamma t}, & \sigma_{p\lambda}^2(t) &= m^2 \omega^2 [\sigma_T^2 + (\sigma_0^2 - \sigma_T^2) e^{-2\gamma t}], \end{aligned}$$

где $\sigma_0^2 = \hbar \omega / 2m$ — среднеквадратичная неопределенность координаты в вакуумном состоянии, $\sigma_T^2 = \sigma_0^2 \text{cth}(\hbar \omega / 2kT) \rightarrow (kT / m\omega^2) [1 - \mathcal{O}(\hbar \omega / 2kT)]$ — аналогичная неопределенность при температурном равновесии. При $t \gg 1/\gamma$ получаем

$$q_\lambda(t) = x_\lambda, \quad p_\lambda(t) = 0, \quad \sigma_{q\lambda}^2(t) = \sigma_T^2, \quad \sigma_{p\lambda}^2(t) = m^2 \omega^2 \sigma_T^2. \quad (14.18)$$

Для каждого λ равновесная смесь вакуумных волновых функций, соответствующая чистому состоянию $\psi_\lambda(t)$ расширенной системы, описывается вероятностной плотностью

$$w_\lambda(q, p) = \frac{\exp \left[-\frac{(q - x_\lambda)^2}{\sigma_{q\lambda}^2 - \sigma_0^2} - \frac{p^2}{\sigma_{p\lambda}^2 - m^2 \omega^2 \sigma_0^2} \right]}{2\pi \sqrt{(\sigma_{q\lambda}^2 - \sigma_0^2)(\sigma_{p\lambda}^2 - m^2 \omega^2 \sigma_0^2)}}, \quad (14.19)$$

где $\sigma_{q\lambda}^2 \geq \sigma_0^2$, $\sigma_{p\lambda}^2 \geq m^2 \omega^2 \sigma_0^2$ в соответствии с соотношением неопределенностей, поскольку σ_0^2 , $m^2 \omega^2 \sigma_0^2$ соответствуют минимальным неопределенностям координата и импульса для рассматриваемого класса несжатых (т. е. с равноправно представленными импульсами p и координатами q) состояний.

С целью интерпретации смешанного состояния, соответствующего волновой функции (14.14) следует рассмотреть среднее значение произвольной переменной \hat{B} системы {квантовый объект + индикатор}

$$\langle \hat{B} \rangle = \sum_{\lambda\lambda'} c_\lambda^* \psi_{\lambda'}^*(t) \hat{B}_{\lambda'\lambda} \psi_\lambda(t) c_\lambda,$$

которое выражается через матрицу плотности (14.15). С помощью плотности (14.19) в этом выражении можно интерпретировать $\psi_\lambda(t)$ как смешанное состояние

$$\langle \hat{B} \rangle = \sum_{\mu} \int dk d\nu w_{\mu}(\kappa, \nu) \sum_{\lambda\lambda'} c_{\lambda'}^* \psi_{vac}^*(q, \kappa, \nu) \delta_{\lambda\lambda'} \hat{B}_{\lambda'\lambda} \psi_{vac}(q, \kappa, \nu) c_{\lambda},$$

где $\psi_{vac}(q, \kappa, \nu)$ определена лишь в пространстве индикаторной переменной \hat{x} . Для каждого λ плотность $w_{\lambda}(\kappa, \nu)$ локализована с учетом (14.18) в окрестности точки $\kappa = x_{\lambda}$, $\nu = 0$ с точностью до температурных флуктуаций, описываемых распределением (14.19). Это представление при условии $\sigma_T \ll |x_{\lambda'} - x_{\lambda}|$ дальнейшим интегрированием по κ, ν внутри областей $|x_{\lambda'} - x_{\lambda}| \gg \Delta_{\lambda} \gg \sigma_T$ приводится к следующему эквивалентному виду:

$$\langle \hat{B} \rangle = \sum_{\mu} |c_{\mu}|^2 \sum_{\lambda} \delta_{\lambda\mu} \psi_{vac}^*(q, x_{\lambda}, 0) \hat{B}_{\lambda\lambda} \delta_{\lambda'\mu} \psi_{vac}(q, x_{\lambda}, 0), \quad (14.20)$$

где $|c_{\mu}|^2$ описывает распределение вероятностей представленной некогерентной смеси волновых функций

$$\psi_{\mu}(\lambda, q) = \delta_{\lambda\mu} \psi_{vac}(q, x_{\lambda}, 0). \quad (14.21)$$

В этих состояниях центр локализации x_{λ} координатной волновой функции определяется значением измеряемой переменной λ , которая для каждого значения индекса μ некогерентной смеси имеет значение $\lambda = \mu$. В рассмотренной схеме измерения, таким образом, возникает смешанное состояние, составленное только из волновых функций с точно определенными значениями λ переменной \hat{A} , хотя в общем случае результирующая диагональная матрица плотности может быть реализована и другими способами. Важным частным примером качественно другого представления является представление диагональной матрицы плотности $\rho_{\lambda\lambda'} = |c_{\lambda}|^2 \delta_{\lambda\lambda'}$ некогерентной суперпозицией когерентных состояний $\psi(\lambda) = c_{\lambda} \exp(i\varphi_{\lambda})$ со случайными независимыми равномерно распределенными фазами φ_{λ} .

В рамках описанной осцилляторной модели нетрудно указать физические оценки для параметров измерительной системы. Для того, чтобы тепловой резервуар реализовывал описанный релаксационный процесс, необходимо условие $\omega \gg \gamma \sim 1/\tau$, где τ — желаемое время измерения, ограничивающее снизу частоту колебаний. В терминах этого ограничения вакуумная неопределенность координаты есть $\sigma_0 \sim (\hbar\tau/m)^{1/2}$. Что же касается σ_T , то выбор этого параметра содержит произвол, и его появление может быть мотивировано желанием иметь дело только с неквантовыми флуктуациями. В последнем случае справедлива оценка $\sigma_T \sim (kT/m)^{1/2}\tau$. Разрешающая способность по координате определяется снизу оценками σ_0 или σ_T , но надежность измерения переменной λ повышается с увеличением характерного расстояния $\Delta \gg \sigma_T, \sigma_0$ между равновесными точками x_{λ} . Платой за это является повышение энергии состояний, возникающих в процессе измерения, причем соответствующий масштаб энергий дается величиной

$$E_{\Delta} \sim m \left(\frac{\Delta}{\tau} \right)^2.$$

Эта величина может быть очень большой, если требуется выполнять измерение за очень малое время с использованием макроскопических индикаторов: при $\tau \sim 10^{-15}$, $m \sim 1$, $\Delta \sim 1$ получаем $E_{\Delta} \sim 10^{23}$.

Приложение А

Возможное обобщение квантовых физических величин

В п. 1.2 *Главы 1* при обсуждении логики квантовых событий (стр. 13) указывалось, что для того, чтобы система рассматриваемых событий была классической, достаточно, чтобы каждый элемент, находящийся в линейной оболочке некоторого набора других элементов, совпадал с одним из них или принадлежал ему. Тем самым, ортогональности набора векторов, описывающих систему классических событий, не требуется. Поэтому из требования классичности логики событий, связанной с квантовой физической величиной, не следует, что набор собственных векторов соответствующего ей оператора обязан быть ортогонален. Необходимо лишь, чтобы он не был переполнен. Соответствующий класс матриц в конечномерном гильбертовом пространстве носит название матриц простой структуры [31]. Они приводятся к диагональному виду преобразованием подобия $\hat{f} \rightarrow V^{-1}\hat{f}V$ ($V^{-1} \neq V^+$) и соответствующий им базис собственных векторов отличается этим преобразованием от ортогонального.

В качестве двумерного примера таких матриц можно привести матрицы вида

$$\hat{f} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & (\lambda_2 - \lambda_1)\text{tg}\theta \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

где (λ_1, λ_2) — собственные значения, а θ — угол отклонения от ортогональности одного из базисных векторов. Эта матрица обобщает класс диагональных 2×2 -матриц на матрицы, приводимые к диагональному виду в базисе собственных векторов, один из которых отклонен от соответствующего ему вектора ортогонального базиса на угол θ . Она имеет две системы собственных векторов — правую и левую, которые ортогональны друг другу. Они изображены на рис. А.1.

Ее спектральное представление имеет следующий вид:

$$\hat{f} = \lambda_1 \hat{P}_1 + \lambda_2 \hat{P}_2, \quad (\text{A.2})$$

где $\hat{P}_k = |e_k\rangle\langle h_k|$ — обобщенные проекторы, которые идемпотентны и ортогональны, т. е. $\hat{P}_k \hat{P}_l = \delta_{kl} \hat{P}_k$; образуют полный набор, т. е. $\sum \hat{P}_k = \hat{I}$; но не эрмитовы, т. е. $\hat{P}_k^+ \neq \hat{P}_k$. В рассматриваемом случае они имеют вид

$$\hat{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & -\text{tg}\theta \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 & \text{tg}\theta \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

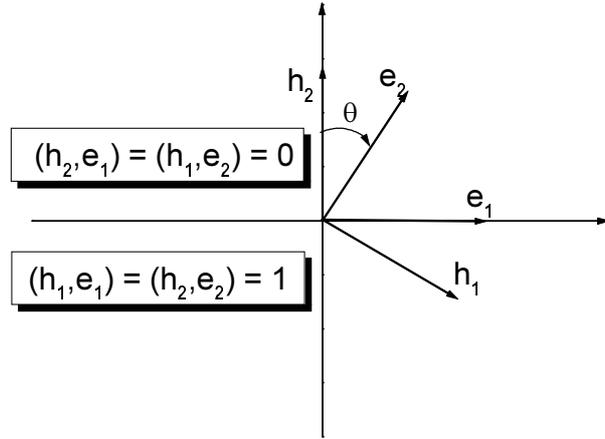


Рис. А.1: Биортогональная система неортогональных базисных векторов для примера двумерного оператора простой структуры: $|e_k\rangle$ — правые собственные векторы, $\langle h_k|$ — левые.

Диагонализирующие матрицы подобия V, V^{-1} составлены из правых и левых собственных векторов и имеют вид:

$$V = \begin{pmatrix} 1 & \sin \theta \\ 0 & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad V^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -\operatorname{tg} \theta \\ 0 & \operatorname{sec} \theta \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Операторам типа (А.1) соответствуют две классические системы событий, которые, однако, несовместны в совокупности. Совместность правой и левой систем событий, связанных с одной и той же физической величиной выделяет класс эрмитовых или, в более общем случае, нормальных операторов, использованных в качестве традиционного способа описания квантовых физических величин. Физический смысл указанного возможного обобщения пока неясен. Рассмотренного типа операторам могут быть поставлены в соответствие два самосопряженных оператора:

$$\hat{f}_+ = \lambda_1 |e_1\rangle \langle e_1| + \lambda_2 |h_2\rangle \langle h_2|, \quad \hat{f}_- = \lambda_1 |h_1\rangle \langle h_1| + \lambda_2 |e_2\rangle \langle e_2|. \quad (\text{A.5})$$

Если базисы e_k, h_k биортонормированы, то, как минимум, два из приведенных здесь четырех ортопроекторов $\hat{P}_k^{(e)} = |e_k\rangle \langle e_k|$, $\hat{P}_k^{(h)} = |h_k\rangle \langle h_k|$ не нормированы, что затрудняет их интерпретацию как индикаторов и придание физического смысла операторам (А.5).

Приложение В

Ланжевеновский шум в ДА

Рассмотрим стохастическую динамику базисных операторов ДА $\hat{s}_k(t)$, $\hat{s}_k(0) = \hat{\sigma}_k$ для самого общего вида гамильтониана взаимодействия с резервуаром, определенного формулой (8.1) для стационарного шума ξ с нулевым средним значением. Тогда для соответствующих ланжевеновских шумов диффузионного марковского процесса получаем

$$\hat{\eta}_k = \frac{i}{2} \sum_{\nu} \hat{\xi}_{\nu}^{\Delta} [\hat{s}_{\nu}, \odot] \hat{s}_k, \quad (\text{B.1})$$

где

$$\hat{\xi}_{\nu}^{\Delta} = \frac{1}{\Delta} \sum_{\mu} \int_0^{\Delta} \hat{\xi}_{\mu}(\tau) S_{\mu\nu}^0(\tau) d\tau \quad (\text{B.2})$$

при $\Delta \gg \tau_c$. Здесь $S_{\mu\nu}^0(\tau)$ описывает собственную динамику ДА. Представляя в выражении (B.1) коммутаторы через структурные коэффициенты, получаем шумы в виде

$$\hat{\eta}_k = \sum_{\nu n} \varepsilon_{k\nu n} \hat{\xi}_{\nu}^{\Delta} \hat{s}_n. \quad (\text{B.3})$$

С учетом (B.2) шумы $\hat{\xi}_{\nu}^{\Delta}$ имеют корреляционную матрицу

$$N_{\mu\nu} = \frac{1}{\Delta} \sum_{\lambda\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} \langle S_{\mu\lambda}^0(t - \tau/2) \mathcal{K}_{\lambda\kappa}(\tau) S_{\kappa\nu}^0(t + \tau/2) \rangle_{t \in \Delta} d\tau, \quad (\text{B.4})$$

где

$$\mathcal{K}_{\lambda\kappa}(\tau) = \langle \hat{\xi}_{\lambda}(0) \hat{\xi}_{\kappa}(\tau) \rangle.$$

Это выражение качественно отличается от аналогичного ему выражения (8.4) для матрицы Q при расчете релаксационного супероператора тем, что в нем отсутствует ограничение $\tau > 0$, отражающее хронологическую упорядоченность выражения для супероператора. Поэтому оно выражается только через симметризованную корреляционную функцию $K(\tau)$ шумов $\hat{\xi}_k(t)$. В частности, для случая одночастотной прецессии, подставляя в выражение (B.4) спектральное представление (8.26), после усреднения по времени получаем

$$N = \frac{1}{\Delta} \sum_k \langle \nu_k | \int_{-\infty}^{\infty} K(\tau) \exp(-i\nu_k \tau) d\tau | \nu_k \rangle | \nu_k \rangle \langle \nu_k |. \quad (\text{B.5})$$

Вклад коммутатора здесь выпадает вследствие антисимметрии соответствующего ему вклада относительно замены $\nu_k \rightarrow -\nu_k$, и он существенен только при расчете релаксационного супероператора. Наличие Δ в знаменателе соотношения (В.5) указывает, что в пределе $\Delta \rightarrow 0$ шум (В.2) эквивалентен белому шуму со спектральной плотностью $N\Delta$.

Литература

- [1] С. А. Ахманов, Р. В. Хохлов, *Проблемы нелинейной оптики*, “Наука”, Москва, 1964.
- [2] B. W. Shore, *The theory of coherent atomic excitation*, Wiley, New York, 1990.
- [3] L. Mandel and E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics*, Cambridge Univ. Press, 1995.
- [4] C. P. Williams, S. H. Clearwater, *Explorations in Quantum Computing*, Springer, 1998.
- [5] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*. “Наука”, Москва, 1974.
- [6] А. А. Соколов, И. М. Тернов, *Квантовая механика и атомная физика*. “Промсвещение”, Москва, 1970.
- [7] Д. И. Блохинцев, *Основы квантовой механики*. “Наука”, Москва, 1983.
- [8] А. С. Давыдов, *Квантовая механика*. “Наука”, Москва, 1973.
- [9] Ж.-П. Вижье, “Панельная дискуссия,” *Эйнштейновский сборник*, стр. 230–269, “Наука”, Москва, 1970.
- [10] О. Мороз, *Жажда истины*. “Знание”, Москва, 1984.
- [11] А. Садбери, *Квантовая механика и физика элементарных частиц*, Мир, Москва, 1989.
- [12] *Справочник по теории вероятностей и математической статистике*, под редакцией В. С. Королюка. “Наукова думка”, Киев, 1978.
- [13] Ю. Л. Климонтович, *Статистическая физика*. “Наука”, Москва, 1982.
- [14] J. Dalibard, Y. Castin, K. Mølmer, *Phys. Rev. Lett.*, V. 68, (3), p. 580 (1993).
- [15] Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике*. “Наука”, Москва, 1970.
- [16] K. Wódkiewicz, J. H. Eberly, *Phys. Rev. A*, Vol. 32, pp. 992–1001 (1985).
- [17] В. М. Файн, *Фотоны и нелинейные среды*, “Сов. радио”. Москва, 1972.
- [18] Л. Аллен, Дж. Эберли, *Оптический резонанс и двухуровневые атомы*. “Мир”, Москва, 1978.

- [19] Н. И. Ахиезер, И. М. Глазман, *Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве*. “Наука”, Москва, 1966.
- [20] Б. А. Гришанин, *Квантовая электродинамика для радиофизиков*. Изд-во Моск. Ун-та, Москва, 1981.
- [21] E. P. Wigner, *Phys. Rev.*, V. 40, p. 749, 1932.
- [22] J. E. Moyal, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, V. 45, p. 99, 1948.
- [23] Р. Глаубер, *Оптическая когерентность и статистика фотонов*, в сборнике: *Квантовая оптика и квантовая радиофизика*. “Мир”, Москва, 1966.
- [24] Б. А. Гришанин, *ТМФ*, т. 48 (3), стр. 396 (1981).
- [25] М. Лэкс, *Флуктуации и когерентные явления*, “Мир”, Москва, 1974.
- [26] E. V. Davies, *Quantum Theory of Open Systems*. Academic Pres, London, 1976.
- [27] А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, “Наука”, Москва, 1969.
- [28] Ж. Диксмье, *C*-алгебры и их представления*, “Наука”, Москва, 1974.
- [29] A. Kossakowski, *Rep. Math. Phys.*, Vol. 3, p. 247 (1973); *Bull. Acad. Polon. Sci. Math.*, Vol. 21, p. 21 (1973).
- [30] H. Primas, U. Müller-Herold, in: S. A. Rice, *For Ilia Prigogin*. Wiley, New York, 1978.
- [31] К. А. Абгарян, *Матричные и асимптотические методы в теории линейных систем*, “Наука”, Москва, 1973.
- [32] И. Пригожин, *От существующего к возникающему*. “Наука”, Москва, 1985.
- [33] Б. А. Гришанин, В. М. Петникова, В. В. Шувалов, *Нестационарная четырехфотонная спектроскопия полупроводников*. В: *Итоги науки и техники: современные проблемы лазерной физики*, т. 2, ВИНТИ, Москва, 1990.
- [34] Дж. Клаудер, Э. Сударшан, *Основы квантовой оптики*. “Мир”, Москва, 1970.
- [35] П. А. Апанасевич, *Основы теории взаимодействия света с веществом*. “Наука и техника”, Минск, 1977.
- [36] Б. А. Гришанин, *ЖЭТФ*, т. 58 (2), стр. 262–266 (1983); Б. А. Гришанин, В. Л. Рыжков, В. Н. Задков, *Вестн. Моск. Ун-та, сер. 3, Физ. астрон.*, т. 35 (3), стр. 23–28 (1994).
- [37] Ю. Л. Климонтович, *Статистическая теория открытых систем*. “Янус”, Москва, 1995.
- [38] С. Чандрасекар, *Стохастические проблемы в физике и астрономии*. “Иностранная литература”, Москва, 1947.

- [39] Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, *Атом в сильном световом поле*. “Атомиздат”, Москва, 1978.
- [40] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*. “Наука”, Москва, 1973.
- [41] С. А. Ахманов, Ю. Е. Дьяков, А. С. Чиркин, *Введение в статистическую радиофизику*. “Наука”, Москва, 1981.
- [42] У. Люиселл, *Излучение и шумы в квантовой электронике*, “Наука”, Москва, 1981.
- [43] У. Фано, Дж. Купер *Спектральные распределения сил осцилляторов в атомах*, “Наука”, Москва, 1972.
- [44] F. Bloch, Phys. Rev., Vol. 102, p. 104 (1956).
- [45] А. М. Бонч-Бруевич, Г. А. Вартамян, В. В. Храмов, ЖЭТФ, т. 78, стр. 538 (1970); J. L. Carlsten, A. Szöke, M. J. Raymer, Phys. Rev., Vol. A15, p. 1029 (1977).
- [46] И. И. Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*. “Наука”, Москва, 1963.
- [47] Б. А. Гришанин, Вестн. Моск. Ун-та, сер. 3, Физ. астрон., т. 26 (6), стр. 50–54 (1994).
- [48] Т. С. Бимагамбетов, Б. А. Гришанин, В. И. Одинцов, Препр. физ. фак. МГУ № 20/1987, Москва, 1987.
- [49] W. Harper, Rev. Mod. Phys., Vol. 44, pp. 169–249 (1972).
- [50] E. Arimondo, “Coherent population trapping in laser spectroscopy”, Progress in Optics, Vol. 35, pp. 257–354 (1996).
- [51] Б. А. Гришанин, В. Н. Задков, Д. Мешед, ЖЭТФ, т. 113, стр. 144–167 (1998).
- [52] I. V. Bargatin, B. A. Grishanin, V. N. Zadkov, SPIE Proc., Vol. , pp. , (1998).
- [53] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, “Наука”, Москва, 1982, стр. 456, ф-ла (96.4).
- [54] А. А. Коломенский, А. Н. Лебедев, *Теория циклических ускорителей*. “Физматгиз”, Москва, 1962.
- [55] J. R. Senitzky, Phys. Rev. Vol. 119, p. 670 (1960); Vol. 124, p. 642 (1961).
- [56] А. А. Соколов, И. М. Тернов, *Релятивистский электрон*. “Наука”, Москва, 1975.
- [57] В. Н. Байер, В. М. Катков, В. С. Фадин, *Излучение релятивистских электронов*. “Атомиздат”, Москва, 1973.
- [58] А. И. Ахиезер, М. П. Рекало, *Элементарные частицы*, “Наука”, Москва, 1986.
- [59] А. С. Давыдов, *Теория твердого тела*. “Наука”, Москва, 1976.

- [60] Дж. Рейсленд, *Физика фононов*. “Мир”, Москва, 1975.
- [61] Ф. А. Березин, *Метод вторичного квантования*. “Наука”, Москва, 1965.
- [62] Н. Cohen, J. Ruvalds, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 23, p. 1386–1381 (1969).
- [63] J. M. Gale, F. Vallee, C. Flytzanis, In: *Second International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy*. Springer-Verlag, Bayreuth FRG, 1969.
- [64] В. А. Grishanin, V. A. Lobastov, V. M. Petnikova, and V. V. Shuvalov, *Laser Physics*, V. 3, No. 1, p. 121 (1993).

Предметный указатель

- Алгебра логики, 10
Алгебра событий, 10
Алгебраический операторный базис, 23
Антиэрмитов супероператор, 21
Антисимметричный супероператор, 22
Бифонон, 156
Биортонормированный базис, 26
Борновская интерпретация волновой функции, 11
Частота Раби, 101
Частота Раби полная, 32
Частотное смещение, 88
Дефазировка неупругая, 82
Дефазировка упругая, 82
Дираковский формализм для операторов, 25
Дисперсионная компонента спектра, 115
Эрмитов супероператор, 21
Эрмитово сопряженный супероператор, 20
Физическая величина, 9
Физический белый шум, 63
Флуктуация комплексной амплитуды, 107
Фонон свободный, 152
Фононная мода, 152
Гильбертово пространство, 9
Хронологическое упорядочение, 20
Индикатор классического события, 12
Индикатор квантового события, 12, 13
Инверсная населенность, 88
Классическое вероятностное пространство, 13
Коэффициенты интенсивности, 114
Когерентные состояния, 40
Когерентное пленение населенностей, 138
Коммутационная матрица, 35
Комплексная восприимчивость, 106
Критерий марковости, 62
Квадратичный штарковский сдвиг, 122
Квант Раби, 126
Квантовая логика, 11
Квантовая скобка Пуассона, 14
Квантовый случайный процесс, 8
Квантовое множество элементарных событий, 11
Квантовое уравнение Лиувилля, 14
Квантовое вероятностное пространство, 13
Квазиэнергия, 125
Левое супероператорное преобразование, 21
Линейный операторный базис, 22
Лиувиллиан, 19
Логика событий, 10
Математический белый шум, 63
Матричное представление супероператора, 22
Множество элементарных событий, 10
ОС фононная, 154
Одетые состояния, 125
Одетый двухуровневый атом, 126
Операторы уничтожения и порождения квантов, 39
Параметр накачки, 88
Подход Ланжевена, 144
Поле насыщающее, 102
Поле сильное, 127
Поле слабое, 102
Положительные/отрицательные частоты, 39
Представление Фока, 153
Представление Вигнера, 35
Представление чисел заполнения, 153
Представление квазиспина, 31
Приближение вращающихся волн, 104
Представление Шредингера, 15
Представление взаимодействия, 15
Представлением Гейзенберга, 15
Равновесное чистое состояние, 108
Сдвиг лэмбовский, 92
Символическое представление, 17
Система открытая, 8
Система замкнутая, 7
Скалярное произведение операторов, 18
Скорость радиационного распада, 92
Случайный процесс, 14
Смещенный вакуум, 40
Соотношение неопределенностей, 38
Состояния n -фононные, 153

- Состояния квазиэнергетические, 125
Спектральное представление физической величины, 12
Степень когерентности, 107
Столкновения оптические, 131
Структурные коэффициенты, 32
Супероператор, 16
Супероператор глобально понижающий, 25
Супероператор понижающий, 24
Свободное поле, 151
Шум ланжевеновский, 145
Транспонирование супероператоров, 21
Упорядочение нормальное, 103
Уравнение Ланжевена, 145
Уравнение Лиувилля, 14
Уравнения Ланжевена, 144
Уширение полевое, 106
Вектор Блоха, 24, 31
Вектор поляризации фонона, 152
Векторное представление, 25
Вигнеровская плотность, 37
Возбуждение двухфононное, 155
Возбуждение однофононное, 155
Вращательный момент ДА, 32
Время пробега фонона, 154
Время жизни фонона, 154
Взаимодействие фонон-фононное, 154
Закон дистрибутивности, 10
Затухание классическое, 143
Затухание продольное и поперечное, 88
матрица плотности, 13
- Состояние чистое, 9
Состояние смешанное, 9
Структурные коэффициенты, 27

Список иллюстраций

1.1	Взаимодействие двухуровневого атома (ДА), возбуждаемого излучением лазера, с электромагнитным полем вакуума, воспринимающим излучение двухуровневого перехода и оказывающим на него реакционное воздействие.	9
1.2	(a) — Иллюстрация закона дистрибутивности классической алгебры логики с помощью кругов Аристотеля. Комбинирование подмножеств в соответствии с обеими частями приведенного равенства дает один и тот же результат. (b) — Недистрибутивность в квантовой логике. Для изображенных элементарных событий имеет место приведенное неравенство.	12
1.3	Иерархия математических объектов, используемых в классической (a) и квантовой (b) теории. \mathcal{L} символизирует операторы — в квантовом случае супероператоры — преобразований физических величин или распределений вероятностей, f и \hat{f} — физические величины, \mathcal{P} и $\hat{\rho}$ — классические распределения вероятностей и квантовые матрицы плотности.	18
2.1	Хронологически упорядоченное расположение операторов в символически представленных супероператорных выражениях, преобразующих матрицы плотности (верхняя схема) и физические величины (нижняя схема).	22
3.1	Изображение множества чистых квантовых состояний на трехмерной сфере Пуанкаре. Точки 1 и 0 отвечают состояниям $ 2\rangle$ и $ 1\rangle$ с соответствующими значениями $n_2 = 1$ и $n_2 = 0$. Стрелкой показан процесс спонтанного распада в ДА.	32
4.1	Конус положительных операторов в векторном представлении для трехмерного базиса. Основанию усеченного конуса $f_0 = 1$ соответствуют матрицы плотности, удовлетворяющие условию нормировки.	48
6.1	Условие марковости динамики. Динамика является марковской, когда скорость затухания γ существенно меньше эффективной ширины $\delta\omega$ спектра $S(i\omega)$ флуктуаций обобщенной силы ξ .	63
6.2	Импульсный характер гамильтониана взаимодействия, порождающего в ОС ступенчатый марковский процесс.	67
8.1	Энергетическая схема ДА и его взаимодействие с различными компонентами шума ξ . Шумы $\hat{\xi}_{1,2}$ приводят к переходам между уровнями; шум $\hat{\xi}_3$ модулирует частоту перехода.	82
8.2	Область интегрирования корреляционной функции в соотношении (7.5) в терминах переменных τ_1 , τ_2 и s , τ .	87
8.3	Спектральная плотность вакуумного шума, действующего на ДА.	90

- 8.4 Проявление немарковости в зависимости от времени отношения затухания $\mathcal{S}_m(t)$, предсказанного марковским расчетом, к затуханию $\mathcal{S}(t)$, предсказываемому точной формулой, для случая экспоненциальной корреляционной функции шума $K(\tau)$ при различных значениях времени релаксации τ_r 98
- 9.1 Зависимость а) степени когерентности и б) дисперсии флуктуаций комплексной амплитуды от интенсивности лазерного поля и полной скорости дефазировки. Тепловая накачка на верхний уровень равна нулю. Частота Раби и скорость дефазировки выражены в единицах скорости распада γ . 108
- 9.2 Спектральная интенсивность флуоресценции ДА при нулевой расстройке лазерного поля в модели классических связанных осцилляторов (а) и в квантовой теории (б). Затухание поляризации соответствует чисто радиационному механизму: $\Gamma = \gamma/2$; частота Раби $\Omega_0 = 2\gamma$ соответствует осцилляторному режиму. Для квантового расчета представлены также лоренцевская и нелоренцевская составляющие и спектр для релаксационного режима при $\Omega_0 = \gamma/4$ 117
- 9.3 Спектральная интенсивность флуоресценции ДА в присутствии слабого лазерного поля на частоте ω_L . Отношение скорости дефазировки к скорости радиационного распада $\Gamma/\gamma = 4$. Спектр имеет две компоненты: когерентную на лазерной частоте ω_L и уширенную на частоте атома ω_{12} . . . 120
- 9.4 Спектральная интенсивность флуоресценции ДА в сильном лазерном поле для двух различных значений лазерной частоты: для точного резонанса — $\omega_L = \omega_{12}$, и для ненулевой расстройки — $\omega_L \approx \omega_{12} - \Omega$. Спектр имеет четыре компоненты: одну когерентную и одну уширенную на частоте ω_L и две уширенные, расположенные для случая относительно слабого затухания на частотах $\omega_{\pm} \approx \omega_L \pm \Omega$ 122
- 10.1 (а) Структура квазиэнергетических уровней ДА, одетого лазерным полем. (б) Наиболее интенсивные каналы релаксации одетого ДА: лазерно индуцированные распад и накачка с участием квантов дефазирующего резервуара и радиационный распад. 126
- 10.2 Сужение линии флуоресценции сильным лазерным полем в условиях точного резонанса. Эффекты преобразования релаксации в случае (а) мало существенны, в случае (б) явно выражены: ширины линий меньше и асимметрия более существенна в относительном выражении. Параметры имеют следующие значения: $\Gamma_0 = 10\gamma_0$, $\tau_c = \Gamma_0^{-1}$, $kT/\hbar = 16\Gamma_0$; (а) — $\Omega_0 = \Gamma_0$, (б) — $\Omega_0 = 3\Gamma_0$. Масштаб по осям для графиков (а), (б) одинаков. 129
- 10.3 Предельные случаи спектров флуоресценции при преобразовании релаксации сильным лазерным полем. Значения параметров: (а) — резонансный случай — $\Gamma_0 = 50\gamma_0$, $\tau_c = 0.5$, $10^{-2}\Gamma_0^{-1}$, $kT/\hbar = 0.2$, $\Omega_0 = 20\Gamma_0$, $\delta = 0$; (б) — нерезонансный случай — $\Gamma_0 = 150\gamma_0$, $\tau_c = 0.6$, Γ_0^{-1} , $kT/\hbar = 0.3\Gamma_0$, $\Omega_0 = 1.3\Gamma_0$, $\delta = 3.3\Gamma_0$. Масштабы по осям для графиков (а), (б) различны. 130

- 10.4 Расчетные кривые населенности верхнего уровня для рубидия при различных давлениях p буферного газа и интенсивностях I лазерного поля: $p = 1$ ат, $I = 0.1$ МВт/см² (1); $p = 1$ ат, $I = 10$ МВт/см² (2); $p = 10$ ат, $I = 0.1$ МВт/см² (3); $p = 10$ ат, $I = 10$ МВт/см² (4); $p = 10$ ат, $I = 100$ МВт/см² (5). 133
- 11.1 Λ -резонанс в трехуровневой системе и его существенные параметры: γ, γ' — скорости радиационного распада возбужденного состояния на уровни 1, 2; Γ, Γ' — скорости дефазировки переходов 1–3 и 2–3; ω_L, ω'_L — частоты лазерных полей; g, g' — соответствующие частоты Раби; δ, δ_R — расстройка резонанса на переходе 1–3 и рамановская расстройка; γ_{12}, w , — скорости распада и накачки уровня 1 через уровень 2; Γ_{12} — скорость чистой дефазировки перехода 1–2. 138
- 11.2 Зависимость населенности возбужденного состояния от однофотонной расстройки $\delta_L = \omega_L - \omega_{13}$ и рамановской расстройки $\delta_R = \omega'_L - \omega_L - \omega_{12}$ для симметричной Λ -системы со скоростями радиационного распада $\gamma_{31} = \gamma_{32} = 1$, частотами Раби $g = g' = 0.1$, нулевыми скоростями чистой дефазировки дипольных переходов Γ_e, Γ'_e и скоростями распада γ_{12}, w основного состояния, для значения скорости дефазировки основного состояния $\Gamma_{12} = 0.001$. График построен с использованием пакета *Mathematica 3.0*. 141
- 12.1 Равновесная траектория, бетатронные осцилляции и формирование импульса отдачи излучения ультрарелятивистского электрона в ускорителе. Импульс отдачи $-\hbar\mathbf{k}$ имеет ненулевую составляющую по оси z 147
- 13.1 Локализация квадрата модуля собственной волновой функции бифонона: (a) — в импульсном представлении; (b) — в координатном представлении. Полная неопределенность по средней координате фононов указывает на то, что возбуждение имеет вид бегущей волны, описывающей движение центра бифонона. 155
- 14.1 Механизм измерения двухуровневой квантовой системы измерительной системой с потенциалом, определяемым состоянием измеряемой системы. 161
- A.1 Биортогональная система неортогональных базисных векторов для примера двумерного оператора простой структуры: $|e_k\rangle$ — правые собственные векторы, $\langle h_k|$ — левые. 166