НАНОСИСТЕМЫ: ФИЗИКА, ХИМИЯ, МАТЕМАТИКА, 2012, 3 (1), С. 42–50

УДК 530.145, 53.098

ОПИСАНИЕ ДИНАМИКИ НАНОСИСТЕМ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ВЛИЯНИЯ

А. А. Бирюков[1], М. А. Шлеенков[2]

Самарский государственный университет

[1]biryukov@ssu.samara.ru, [2]shleenkov@list.ru

PACS 85.35.-p, 03.65.Yz

В рамках формализма функционального интегрирования и метода функционала влияния получены выражения, описывающие эволюцию статистической матрицы плотности наносистемы в координатном и энергетическом представлениях. Найден явный вид функционала влияния квантованного электромагнитного поля на наносистему. Показана эквивалентность предложенного метода методам, развитым в рамках теории возмущений.

Ключевые слова: наносистемы в электромагнитном поле, формализм функционального интегрирования, метод функционала влияния.

1. Введение

В настоящее время активно изучаются и исследуются наносистемы, проявляющие свойства сложных многоуровневых квантовых систем. Одним из направлений этих исследований является изучение магнитно-электрических свойств и динамики состояний под действием электромагнитного излучения. Также научный и практический интерес представляют описание процессов возбуждения наносистем вплоть до их разрушения под действием электромагнитного поля. Имеются технологии возбуждения атомов и молекул мощным лазерным излучением, так что наблюдается их диссоциация. Например, в работах [1], [2] наблюдалось явление изотопически-селективной диссоциации различных многоатомных молекул ($\mathrm{BCl_3}$, $\mathrm{SiF_4}$, $\mathrm{SF_6}$) при различных характеристиках сильного лазерного поля CO_2-лазера. В работах [3],[4] исследовалась инфракрасная многофотонная диссоциация молекул трихлорсилана ($\mathrm{SiHCl_3}$) и метилтрифторсилана ($\mathrm{SiF_3CH_3}$). Использование лазерного излучения для разделения изотопов обсуждалось в работе [5]. Эта идея была реализована в работах [6],[7]. Особенности диссоциации молекул $\mathrm{UF_6}$ в поле лазера и применение этого явления для разделения изотопов урана обсуждаются в работе [8]. В этих задачах принципиальным является использование мощного лазерного поля для воздействия на исследуемую квантовую систему, поэтому описание данных явлений в рамках теории возмущений, в частности в низших ее порядках, является некорректным. Исследования показывают, что дифференциальные уравнения, описывающие данные процессы, являются существенно нелинейными. Исследования этих уравнений, построение их решений представляют большие математические трудности. В связи с этим возникает задача – поиск непертурбативных подходов для описания динамики наносистем, взаимодействующих с интенсивным электромагнитным полем.

В данной работе предлагается непертурбативный подход к квантовому описанию эволюции наносистемы, взаимодействующей с интенсивным электромагнитным полем. Поведение квантовой системы определяется статистической матрицей плотности, явный вид которой определяется в формализме функционального интегрирования, используя метод функционала влияния.

2. Эволюция системы «вещество+излучение» в представлении функционального интегрирования

Рассмотрим квантовую наносистему, взаимодействующую с электромагнитным полем. Полный гамильтониан системы имеет вид:

$$\hat{H}_{full} = \hat{H}_{syst} + \hat{H}_{field} + \hat{H}_{int},$$

где $\hat{H}_{syst}$ — оператор Гамильтона квантовой наносистемы (атомов, молекул);

$$\hat{H}_{field} = \hbar\Omega_k(\hat{a}_k^*\hat{a}_k + 1/2)$$

— гамильтониан свободного электромагнитного поля, $\hat{a}_k^*$ и $\hat{a}_k$ — операторы рождения и уничтожения, моды k электромагнитного поля;

$$H_{int} = \hbar g_k \hat{x}(\hat{a}_k^* + \hat{a}_k)$$

— гамильтониан взаимодействия исследуемой квантовой подсистемы и электромагнитного поля в дипольном приближении, где электромагнитное поле поляризовано вдоль оси x, $\hat{x}$ — оператор координаты частицы квантовой системы, константа взаимодействия g_k:

$$g_k = \frac{q}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar\Omega_k}{2\varepsilon_0 V}},$$

где q — заряд частицы квантовой системы, ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, V — объем квантования электромагнитного поля.

Будем описывать динамику системы «вещество+излучение» с помощью статистического оператора $\hat{\rho}_{full}(t)$, эволюция которого во времени определяется уравнением:

$$\hat{\rho}_{full}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}_{full}(0)\hat{U}^+(t), \tag{1}$$

где $\hat{\rho}_{full}(0)$ — статистический оператор системы «вещество+излучение» в начальный момент времени, а оператор эволюции $\hat{U}(t)$ имеет вид:

$$\hat{U}(t) = \hat{T}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \hat{H}_{full}(\tau)d\tau\right]. \tag{2}$$

Представим операторное уравнение (1) для статистического оператора в базисе векторов $|x,\alpha\rangle$:

$$|x,\alpha\rangle = |x\rangle \otimes |\alpha\rangle\,,$$

где вектора $|x\rangle$ и $|\alpha\rangle$ определяются уравнениями [13]:

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle\,, \qquad \int |x\rangle\,\langle x|\,dx = 1, \quad \langle x \mid y\rangle = \delta(x-y), \tag{3}$$

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle\,, \qquad \int \frac{d^2\alpha_k}{\pi}\,|\alpha_k\rangle\,\langle\alpha_k| = 1, \quad \langle\alpha'_k \mid \alpha_k\rangle = \exp\left[-\frac{|\alpha'_k|^2 + |\alpha_k|^2}{2} + \alpha'^*_k\alpha_k\right]. \tag{4}$$

Уравнение (1), представленное в базисе векторов $|x,\alpha\rangle$, принимает вид

$$\rho_{full}\left(x_f,\alpha_f^*,x_f',\alpha_f';t\right)=\int dx_{in}dx_{in}'\frac{d^2\alpha_{in}}{\pi}\frac{d^2\alpha_{in}'}{\pi}\times$$
$$\times\,U\left(x_f,\alpha_f^*,t|x_{in},\alpha_{in}\right)\rho_{full}\left(x_{in},\alpha_{in}^*,x_{in}',\alpha_{in}';0\right)U^*\left(x_f',\alpha_f',t|x_{in}',\alpha_{in}'^*\right), \quad (5)$$

где

$$\rho_{full}\left(x_{in},\alpha_{in}^*,x_{in}',\alpha_{in}';0\right)=\langle x_{in},\alpha_{in}|\,\hat\rho_{full}(0)\,|x_{in}',\alpha_{in}'\rangle,$$
$$\rho_{full}\left(x_f,\alpha_f^*,x_f',\alpha_f';t\right)=\langle x_f,\alpha_f|\,\hat\rho_{full}(t)\,|x_f',\alpha_f'\rangle$$

— статистические матрицы плотности соответственно в начальный момент времени $t=0$ и в некий момент времени t;

$$U\left(x_f,\alpha_f^*,t|x_{in},\alpha_{in}\right)=\langle x_f,\alpha_f|\,\hat T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t\hat H_{full}(\tau)d\tau\right]|x_{in},\alpha_{in}\rangle$$

— ядро оператора эволюции.

В выбранном базисе квантовую систему описываем в координатном представлении, электромагнитное поле — в голоморфном представлении [9]. Описание квантованного электромагнитного поля в представлении когерентных состояний (4) обусловлено тем, что в этом представлении в пределе больших амплитуд его свойства аналогичны свойствам классической электромагнитной волны.

Уравнение для статистической матрицы плотности (5) представим в формализме функционального интегрирования. Ядро оператора эволюции (2) в представлении функционального интегрирования принимает вид [10], [14]:

$$U\left(x_f,\alpha_f^*,t|x_{in},\alpha_{in}\right)=\int\mathcal{D}\alpha(t')Dp(t')Dx(t')\exp\left\{\frac12\left(\alpha^*(t)\alpha(t)+\alpha^*(0)\alpha(0)\right)\right\}\times$$
$$\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t\Big[p(t')\dot x(t')-\frac{\hbar}{2i}\left(\alpha^*(t')\dot\alpha(t')-\dot\alpha^*(t')\alpha(t')\right)-\right.$$
$$\left.-\,H_{syst}\left(p(t'),x(t')\right)-\mathcal{H}_{field}\left(\alpha^*(t'),\alpha(t')\right)-\mathcal{H}_{int}\left(x(t'),\alpha^*(t'),\alpha(t')\right)\Big]dt'\right\}. \quad (6)$$

Используя (6), уравнение для матрицы плотности системы «поле+излучение» (5) представим в виде:

$$\rho_{full}\left(x_f,\alpha_f^*,x_f',\alpha_f';t\right)=\int\mathcal{D}\alpha(t')\mathcal{D}\alpha'(t')Dp(t')Dp'(t')\,Dx(t')Dx'(t')\,\frac{d^2\alpha_{in}}{\pi}dx_{in}\frac{d^2\alpha_{in}'}{\pi}dx_{in}'\times$$
$$\times\exp\left\{\frac12\left(\alpha^*(t)\alpha(t)+\alpha^*(0)\alpha(0)\right)\right\}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t\Big[p(t')\,\dot x(t')-\frac{\hbar}{2i}\left(\alpha^*(t')\,\dot\alpha(t')-\dot\alpha^*(t')\,\alpha(t')\right)-\right.$$
$$\left.-\mathcal{H}_{syst}\left(p(t'),x(t')\right)-\mathcal{H}_{field}\left(\alpha^*(t'),\alpha(t')\right)-\mathcal{H}_{int}\left(x(t'),\alpha^*(t'),\alpha(t')\right)\Big]dt'\right\}\times$$
$$\times\,\rho\left(x_{in},\alpha_{in},x_{in}',\alpha_{in}',t=0\right)\exp\left\{\frac12\left(\alpha'^*(t)\alpha'(t)+\alpha'^*(0)\alpha'(0)\right)\right\}\times$$
$$\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t\Big[p'(t')\,\dot x'(t')-\frac{\hbar}{2i}\left(\alpha'^*(t')\,\dot\alpha'(t')-\dot\alpha'^*(t')\,\alpha'(t')\right)-\right.$$
$$\left.-\mathcal{H}_{syst}\left(p'(t'),x'(t')\right)-\mathcal{H}_{field}\left(\alpha'^*(t'),\alpha'(t')\right)-\mathcal{H}_{int}\left(x'(t'),\alpha'^*(t'),\alpha'(t')\right)\Big]dt'\right\}. \quad (7)$$

Таким образом, мы получили замкнутое выражение, описывающее эволюции системы «поле+излучение». Это выражение представляет собой функциональный интеграл (который может быть представлен бесконечномерным интегралом) по промежуточным состояниям системы «вещество+излучение» с фиксированными начальными и конечными условиями. Вычисление данных интегралов требует специальных математических средств.

3. Описание динамики квантовой системы, взаимодействующей с электромагнитным полем методом функционала влияния

В ряде задач нас интересует лишь динамика исследуемой квантовой системы (атома, молекулы или другой наносистемы) в электромагнитном поле. Рассмотрим модель, когда электромагнитное поле имеет столь большую интенсивность, что обратным влиянием исследуемой квантовой системы на него можно пренебречь, то есть изменение состояния электромагнитного поля в процессе эволюции системы «вещество+излучение» можно не учитывать. В этом случае можно провести редукцию статистической матрицы плотности полной системы (7) к статистической матрице плотности квантовой системы:

$$\rho_{syst}\left(x_f, x'_f; t\right) = \int\limits_{\alpha_f=\alpha'_f} \rho_{full}\left(x_f, \alpha^*_f, x'_f, \alpha_{f'}; t\right) \frac{d^2\alpha_f}{\pi}. \tag{8}$$

В ряде случаев допустимо, что в начальный момент времени подсистемы «вещество» и «излучение» не взаимодействовали между собой. В этом случае возможна факторизация начальной матрицы плотности:

$$\rho_{full}\left(x_{in}, \alpha^*_{in}, x'_{in}, \alpha'_{in}, t=0\right) = \rho_{syst}\left(x_{in}, x'_{in}, t=0\right) \cdot \rho_{field}\left(\alpha^*_{in}, \alpha'_{in}, t=0\right). \tag{9}$$

Подставляя (7) в (8), а также используя условия (9), запишем статистическую матрицы плотности исследуемой квантовой подсистемы $\rho_{syst}\left(x_f, x'_f; t\right)$ в некий момент t в виде:

$$\begin{split}\rho_{syst}\left(x_f, x'_f; t\right) = \\ \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t \Big[p(t')\dot{x}(t') - H_{sist}(p(t'), x(t')) - p'(t')\dot{x}'(t') + H_{sist}(p'(t'), x'(t'))\Big]dt'\right\} \times \\ \times F[x(t'), x'(t')]\rho_{syst}(x_{in}, x'_{in}; t=0)Dp(t')Dx(t')Dp'(t')Dx'(t')dx_{in}dx'_{in},\end{split} \tag{10}$$

где

$$\begin{split}F[x, x'] = \int\limits_{\alpha_f=\alpha'_f} \int \mathcal{D}\alpha(t')\mathcal{D}\alpha'(t')\frac{d^2\alpha_{in}}{\pi}\frac{d^2\alpha'_{in}}{\pi}\frac{d^2\alpha_f}{\pi}\rho_{field}\left(\alpha_{in}, \alpha'_{in}; t=0\right) \times \\ \times \exp\left\{\frac{1}{2}\left(\alpha^*(t)\alpha(t) + \alpha^*(0)\alpha(0) + \alpha'^*(t)\alpha'(t) + \alpha'^*(0)\alpha'(0)\right)\right\} \times \\ \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t \Big[\frac{\hbar}{2i}(\alpha^*(t')\dot{\alpha}(t') - \dot{\alpha}^*(t')\alpha(t') - \alpha'^*(t')\dot{\alpha}'(t') + \dot{\alpha}'^*(t')\alpha'(t')) - \mathcal{H}_{field}\left(\alpha^*(t'), \alpha(t')\right) - \right. \\ \left. - \mathcal{H}_{int}\left(x(t'), \alpha^*(t'), \alpha(t')\right) + \mathcal{H}_{field}\left(\alpha'^*(t'), \alpha'(t')\right) + \mathcal{H}_{int}\left(x'(t'), \alpha'^*(t'), \alpha'(t')\right)\Big]dt'\right\}\end{split} \tag{11}$$

— функционал влияния электромагнитного поля на исследуемую квантовую систему.

Выражение (10) с учетом (11) описывает эволюцию статистической матрицы плотности исследуемой квантовой системы в координатном представлении.

В ряде задач удобно описывать динамику квантовой системы в энергетическом представлении. Статистическая матрица плотности квантовой системы в энергетическом представлении определяется формулой:

$$\rho_{syst}\left(m,m',t\right)=\int\varphi_m^*\left(x_f\right)\rho_{syst}\left(x_f,x_f',t\right)\varphi_{m'}\left(x_f'\right)dx_fdx_f'. \tag{12}$$

Для случая, когда начальное состояние исследуемой квантовой системы — чистое квантовое состояния матрица плотности принимает вид:

$$\rho_{syst}\left(x_{in},x_{in}';t=0\right)=\varphi_n^*\left(x_{in}\right)\varphi_{n'}\left(x_{in}'\right), \tag{13}$$

где в выражениях (12) и (13) $\varphi_{m'}\left(x_f'\right)$ — волновая функция квантовых состояний системы.

Учитывая (12) и (13), получаем уравнение эволюци для статистической матрицы плотности в энергетическом представлении:

$$\begin{multline}\rho_{syst}\left(m,m',t\right)=\\=\int\mathcal{D}p(t')\mathcal{D}x(t')\mathcal{D}p'(t')\mathcal{D}x'(t')dx_fdx_f'dx_{in}dx_{in}'\varphi_m^*\left(x_f\right)\varphi_{m'}\left(x_f'\right)F\left[x(t'),x'(t')\right]\times\\\times\exp\left\{\int_0^t\left(\frac{i}{\hbar}\left(p(t')\dot{x}(t')-\mathcal{H}_{syst}\left(p(t'),x(t')\right)-p'(t')\dot{x}'(t')+\mathcal{H}_{syst}\left(p'(t'),x'(t')\right)\right)dt'\right)\right\}\times\\\times\varphi_n^*(x_{in})\varphi_{n'}(x_{in}'). \tag{14}\end{multline}$$

В выражении (14) диагональные элементы статистической матрицы плотности выражают вероятности соответствующих квантовых состояний, так что из уравнения (14) мы получаем выражения для вероятностей переходов системы $P(m,t|n,0)$ из состояния n в состояние m:

$$\begin{multline}P\left(m,t|n,0\right)=\\=\int\mathcal{D}p(t')\mathcal{D}x(t')\mathcal{D}p'(t')\mathcal{D}x'(t')dx_fdx_f'dx_{in}dx_{in}'\varphi_m^*\left(x_f\right)\varphi_m\left(x_f'\right)F\left[x(t'),x'(t')\right]\times\\\times\exp\left\{\int_0^t\left(\frac{i}{\hbar}\big(p(t')\dot{x}(t')-\mathcal{H}_{syst}\left(p(t'),x(t')\right)-p'(t')\dot{x}'(t')+\mathcal{H}_{syst}\left(p'(t'),x'(t')\right)\big)dt'\right)\right\}\times\\\times\varphi_n^*(x_{in})\varphi_{n'}(x_{in}'). \tag{15}\end{multline}$$

Уравнения (10), (14), (15) описывают динамику квантовой системы под действием электромагнитного поля. Примечально, что они получены вне рамок пертурбативных методов Для вычисления статистической матрицы в определенный момент времени t и вероятностей переходов необходимо:

- конкретизация исследуемой квантовой подсистемы, а именно задание H_{syst} в координатном представлении и явного вида волновых функций $\varphi_n(x)$;
- вычисление явного вида функционала влияния F на исследуемую квантовую систему;
- вычисление соответствующих функциональных интегралов.

Заметим, что формулы (10), (14), (15) указывают, что процесс эволюции статистической матрицы плотности системы является процессом с памятью, то есть его принципиально нельзя представить марковским процессом.

4. Явный вид функционала влияния электромагнитного поля

Функционал влияния впервые ввел Фейнман в функциональном методе описания квантовых систем [11]. Фейнман высказал гипотезу, что для широкого класса физических воздействий на квантовую систему функционал влияния имеет квадратичную структуру и представляется выражением:

$$F\left[x,x'\right]=\exp\left[-\int_0^t\int_0^{t'}\Big(\gamma\left(t',t''\right)x(t')x(t'')+\gamma^*\left(t',t''\right)x'(t')x'(t'')-\right.$$
$$\left.-\gamma^*\left(t',t''\right)x(t')x'(t'')-\gamma\left(t',t''\right)x'(t')x(t'')\Big)dt'dt''\right],\quad(16)$$

где функции $\gamma(t,t')$ конкретизируются в зависимости от исследуемой модели.

Вычисление явного вида функционала влияния гармонического осциллятора проводилось в координатном и энергетическом представлениях [11]. Авторами был проведен расчет функционала влияния одномодового электромагнитного поля частоты Ω, представленным выражением (11), в голоморфном представлении. Вычисления привели к квадратичному функционалу влияния (16), где функция $\gamma\left(t,t'\right)$ имеет вид:

$$\gamma_\Omega\left(t',t''\right)=\frac{q^2\Omega}{2\varepsilon_0 V\hbar}e^{-i\Omega(t'-t'')}.\quad(17)$$

В случае, когда электромагнитное поле многомодовое, функционал влияния сохраняет свою квадратичную структуру (11), преобразуется функция $\gamma\left(t,t'\right)$. Она имеют вид:

$$\gamma_{field}\left(t',t''\right)=\sum_{k=0}^{\infty}\gamma_{\Omega_k}\left(t',t''\right)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{q^2\Omega_k}{2\varepsilon_0 V\hbar}e^{-i\Omega_k(t'-t'')}.\quad(18)$$

5. Приложения к описанию систем

Вычислим на основании формулы (15) зависимость вероятности пребывания квантовой системы на неком квантовом уровне n от времени в отсутствии электромагнитного поля. Функционал влияния вакуума на систему имеет вид:

$$F_{vac}\left[x(t'),x'(t')\right]=\exp\left[-\int_0^t\int_0^{t'}\left(\gamma_{vac}\left(t',t''\right)x(t')x(t'')+\gamma_{vac}^*\left(t',t''\right)x'(t')x'(t'')\right)dt'dt''\right],\quad(19)$$

где $\gamma_{vac}\left(t',t''\right)=\gamma_{field}\left(t',t''\right)$, то есть определяется формулой (18).

Подставляя функционал влияния вакуума (19) в выражение для вероятности квантового перехода (15) и проводя интегрирование по траекториям и переменным волновых функций состояния, получим:

$$P_{syst}(n,t) = \exp\left[-\int_0^t\int_0^{t'}\left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{q^2\Omega_k}{2\varepsilon_0 V\hbar}\left|\wp_{nm}\right|^2 e^{i(\omega_{nm}-\Omega_k)(t'-t'')}+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\sum_{k'=0}^{\infty}\frac{q^2\Omega_{k'}}{2\varepsilon_0 V\hbar}\left|\wp_{nm}\right|^2 e^{-i(\omega_{nm}-\Omega_{k'})(t'-t'')}\right)dt'dt''\right], \quad (20)$$

где были приняты обозначения:

$$\wp_{mn} = \int \varphi_m^*(x)x\varphi_n(x)dx, \qquad \omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar},$$

где $P_{syst}(n,t) = P_{syst}(n,t|n,0)$ — вероятность пребывания системы в квантовом состоянии $\varphi_n(x)$ при условии, что в начальный момент времени квантовая система находилась в состоянии $\varphi_n(x)$ с вероятностью $P_{syst}(n,t=0) = 1$.

Используя приближение Вайскопфа—Вигнера [13] (при $\omega_{nm} = \Omega > 0$), получим:

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{q^2\Omega_k}{2\varepsilon_0 V\hbar}\left|\wp_{nm}\right|^2 e^{i(\omega_{nm}-\Omega_k)(t'-t'')} = \frac{\Gamma}{2}\delta\left(t'-t''\right), \quad (21)$$

где

$$\Gamma = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{4\omega_{nm}^3\left|\wp_{mn}\right|^2}{3\hbar c^3}. \quad (22)$$

При использовании (21), выражение (20) принимает вид:

$$P_{syst}(n,t) = \exp\left[-\int_0^t\int_0^{t'}\left(\frac{\Gamma}{2}\delta\left(t'-t''\right)+\frac{\Gamma}{2}\delta\left(t'-t''\right)\right)dt'dt''\right] = \exp\left[-\Gamma t\right]. \quad (23)$$

Полученная вероятность (23) обнаружения системы в возбужденном состоянии совпадает с известным выражением, полученным другими методами [13].

Формула (15) для вероятности квантовых переходов легко представляется в виде ряда теории возмущений. Для его построения функционал влияния (16) необходимо разложить в ряд:

$$F\left[x,x'\right] = 1 - \int_0^t\int_0^{t'}\left(x(t')-x'(t')\right)\left(\gamma\left(t',t''\right)x(t'')+\gamma^*\left(t',t''\right)x'(t'')\right)dt'dt''+$$
$$+\frac{1}{2!}\left[-\int_0^t\int_0^{t'}\left(x(t')-x'(t')\right)\left(\gamma\left(t',t''\right)x(t'')+\gamma^*\left(t',t''\right)x'(t'')\right)dt'dt''\right]^2+\ldots. \quad (24)$$

Подставляя (24) в выражение (15) для вероятности квантового перехода исследуемой квантовой системы, получим:

$$P\left(m,t|n,0\right) = P^0\left(m,t|n,0\right)+P^I\left(m,t|n,0\right)+P^{II}\left(m,t|n,0\right)+P^{III}\left(m,t|n,0\right)+\ldots, \quad (25)$$

где

$$P^N\left(m,t|n,0\right)=\int\varphi_m^*(x_f)\varphi_m(x_f')\varphi_n(x_{in})\varphi_n^*(x_{in}')\times$$
$$\times\exp\left\{\int_0^t\left(\frac{i}{\hbar}\left(p(t')\dot{x}(t')-\mathcal{H}_{syst}\left(p(t'),x(t')\right)-p'(t')\dot{x}'(t')+\mathcal{H}_{syst}\left(p'(t'),x'(t')\right)\right)dt'\right)\right\}\times$$
$$\times\frac{1}{N!}\left[-\int_0^t\int_0^{t'}\left(x(t')-x'(t')\right)\left(\gamma\left(t',t''\right)x(t'')+\gamma^*\left(t',t''\right)x'(t'')\right)dt'dt''\right]^N\times$$
$$\times\mathcal{D}p(t')\mathcal{D}x(t')\mathcal{D}p'(t')\mathcal{D}x'(t')dx_fdx_f'dx_{in}dx_{in}'.$$

Оставляя первые два слагаемых в (25), получим, как это показано в работе [12] вероятность перехода в единицу времени, которая совпадает с известными правилами Э. Ферми.

Анализ полного ряда теории возмущений (25) показывает, что вероятность квантовых переходов, когда частота поля Ω совпадает с резонансной частотой перехода ω_{mn}, имеет вид:

$$P\left(m,t|n,0\right)=\sin^2\left(\Omega_Rt\right)+p\left(\Omega_R,\omega_{mn},t\right),\tag{26}$$

где Ω_R — частота Раби.

Первое слагаемое в формуле (19) описывает известные осцилляции Раби [13], второе представляется хаотично осциллирующей функцией, которая возникает как следствие многоуровневости системы. Это слагаемое представляет флуктуации квантовых переходов.

Предложенные выражения для эволюции статистической матрицы плотности (7), (14) приемлемы для описания широкого круга физических процессов в атомах, молекулах и других наноструктурах.

Литература

[1] Isenor N.R., Merchant V., Hallsworth R.S., Richardson M. C. CO_2 Laser-Induced Dissociation of SiF_4 Molecules into Electronically Excited Fragments // Can. J. Phys. — 1973. — 51. — P. 1281-1287.

[2] Амбарцумян Р.В., Горохов Ю.А., Летохов В.С., Макаров Г.Н., Пурецкий А.А. Исследование механизма изотопически-селективной диссоциации молекул SF_6 излучением $C0_2$ лазера// ЖЭТФ. — 1976. — 71. — С. 440-453.

[3] Апатин В.М., Лаптев В.Б., Рябов Е.А. ИК многофотонная диссоциация трихлорсилана под действием импульсного излучения CO_2- и NH_3-лазеров // Квант. электроника. — 2003. — 33(10). — С. 894-896.

[4] Кошляков П.В., Чесноков Е.Н., Горелик С.Р., Киселев В.Г., Петров А.К. Инфракрасная многофотонная диссоциация метилтрифторсилана // Химическая физика. — 2006. — 25(5). — С. 12-22.

[5] Карлов Н. В., Прохоров А. М. Лазерное разделение изотопов // УФН. — 1976. — 118. — С. 583-609.

[6] Lyman J. L., Jensen R. J., Rink J., Robinson C.P., Rockwood S. D. Isotopic enrichment of SF_6 in ^{34}S by multiple absorption of CO_2 laser radiation // Appl. Phys. Lett. — 1975. — 27. — P. 87-89.

[7] Карлов Н. В., Крынецкий Б. Б., Мишин В. А., Прохоров А. М. Селективная фотоионизация атомов и ее применение для разделения изотопов и спектроскопии // УФН. — 1979. — 127. — С. 593-620.

[8] Баранов В.Ю., Дядькин А.П., Колесников Ю.А., Котов А.А., Новиков В.П., Пигульский С.В., Разумов А.С., Стародубцев А.И. Особенности диссоциации молекул UF_6 в поле излучения импульсно-периодического CF_4-лазера // Квантовая Электроника. — 1997. — 24(7). — С. 613-616.

[9] Лоудон Р. Квантовая теория света. –М.: Мир, 1976. — 488 с.

[10] Славнов А.А., Фаддеев Л.Д. Введение в квантовую теорию калибровочный полей. — М.: Наука, 1978. — 272 с.

[11] Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — М.: Мир, 1968. — 382 с.

[12] Бирюков А.А., Шлеенков М.А. Квантовые переходы многоуровневой системы, взаимодействующей с электромагнитным полем, в представлении функционального интегрирования // Сб. т. VII Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике. Самара. — 2010.

[13] Скали М.О., Зубайри М.С. Квантовая оптика. — М.: Физматлит, 2003. — 512 с.
[14] Пескин М.Е., Шредер Д.В. Введение в квантовую теорию поля. — Ижевск: НИЦ „Регулярная и хаотическая динамика“ , 2001. — 784 с.