УДК 530.145

ВНЕЗАПНОЕ ИЗМЕНЕНИЕ ПОЛОЖЕНИЯ РАВНОВЕСИЯ И КВАНТОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ОСЦИЛЛЯТОРА В ТОМОГРАФИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

Е. Д. Жебрак[1], В. И. Манько[2]

В настоящей работе получены вероятности переходов при мгновенном изменении положения равновесия квантового осциллятора в томографическом представлении. Проведено сравнение с известными факторами Франка–Кондона, получаемыми вычислением интегралов перекрытия волновых функций. Получены явные выражения для симплектической и оптической томограмм и производящая функция для интегралов перекрытия симплектических томограмм, определяющих вероятности переходов в осцилляторе, возбуждаемом вынуждающей силой.

Ключевые слова: вероятности квантовых переходов в осцилляторе, факторы Франка–Кондона, симплектическая томограмма, оптическая томограмма.

1. Введение. Задача о вероятностях переходов в осцилляторе с вынуждающей силой является одной из наиболее важных задач квантовой механики как с теоретической, так и с практической точки зрения. Этим объясняется богатая библиография, существующая по данному вопросу. Впервые эту задачу рассмотрел Р. Фейнман. Так в статье [1] описано взаимодействие гармонического осциллятора с частицей или системой частиц. Принималось, что вынуждающая сила в такой системе зависит от времени, а осцилляторная частота постоянна. В терминах лагранжевой механики в данной работе впервые было получено выражение для вероятностей переходов между собственными состояниями осциллятора, представленное в виде ряда. Несколько позднее Ю. Швингер опубликовал работу [2], в которой вероятности переходов в осцилляторе с переменной силой и постоянной частотой были выражены через полиномы Лагерра.

[1] Московский физико-технический институт (государственный университет), 141701 Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9; e-mail: el1holstein@phystech.edu.

[2] ФИАН, 119991 Россия, Москва, Ленинский пр-т, 53; e-mail: manko@sci.lebedev.ru.

В [3] дан подробный обзор работ, в которых рассматривалось параметрическое возбуждение осциллятора, и обобщающих подход, предложенный в [1, 2]. В частности, рассматривалась ситуация, при которой вынуждающая сила остается постоянной, а со временем изменяется собственная частота колебаний осциллятора. В этом частном случае вероятности переходов между собственными состояниями в такой системе выражаются через полиномы Лежандра. Более общий случай, в котором как вынуждающая сила, так и частота являются функциями времени, исследовал К. Хусими [4]. Им была получена производящая функция для вероятностей переходов в такой системе. В работе [5] вероятность квантовых переходов в адиабатическом приближении обсуждалась с точки зрения изменения адиабатического инварианта, которое, как было показано, осциллирует со временем, убывая при этом обратно пропорционально времени. Задача о переходах между собственными уровнями энергии осциллятора рассматривалась также в [6] и [7]. Среди последних исследований по этой тематике в работе [8] найдена новая производящая функция для вероятности перехода в осцилляторе с постоянной частотой и переменной силой. Общее рассмотрение нестационарных решений уравнения Шредингера для осциллятора приведено в [9] и [10]. Во всех упомянутых исследованиях вероятности переходов были представлены как интеграл от перекрытия волновых функций. Этим методом решалась задача о переходах между уровнями энергии гармонического осциллятора и при вычислении вероятностей переходов в многоатомных молекулах (см., напр., [11] и [12]), где интегралы перекрытия волновых функций, называемые факторами Франка–Кондона, исследовались с помощью производящих функций.

В то же время, в последние годы новое развитие получил вероятностный подход к квантовой механике, называемый вероятностным томографическим представлением квантовых состояний. Данный подход имеет ряд преимуществ, которые будут вкратце рассмотрены в разделе 2. О возможности применения томографического подхода для нахождения вероятностей квантовых переходов было упомянуто в статье [13]. Позднее описанный метод применялся при рассмотрении квантовых переходов в различных физических системах, в частности, в [14] с его помощью были получены вероятности переходов между уровнями Ландау. В то же время подробное рассмотрение задачи о гармоническом осцилляторе, возбуждаемом внешней силой, в томографическом представлении не проводилось.

Целью данной работы является получение явных выражений для симплектической и оптической томограмм возбужденного вынуждающей силой гармонического осциллятора и вероятностей квантовых переходов между уровнями энергии такого осциллятора в томографическом представлении квантовой механики.

Статья организована следующим образом. В разделе 2 дан краткий обзор вероятностного представления квантовой механики. В разделе 3 вероятности переходов в осцилляторе при мгновенном изменении положения равновесия получены в рамках томографического метода. Результаты работы просуммированы в разделе 4.

2. Вероятности переходов в томографическом представлении квантовой механики. С момента зарождения квантовой механики вопрос о переходе от комплекснозначных функций, описывающих квантовые состояния, к некоему классически подобному представлению поднимался неоднократно. Практическую актуальность этот вопрос получил с развитием квантовых вычислений, где важной является задача контроля и измерения квантовых состояний. В 1996 году в [15] была использована действительная функция распределения вероятностей, однозначно определяющая квантовое состояние и получившая название симплектической томограммы. Она принадлежит семейству функций на фазовой плоскости с тем лишь отличием, что симплектическая томограмма $w(X,\mu,\nu)$ отвечает распределению вероятностей в повернутой и сжатой системе координат и зависит от переменной X, имеющей физический смысл координаты на преобразованной фазовой плоскости, и от действительных параметров μ и ν, являющихся характеристиками поворота и сжатия соответственно.

Симплектическая томограмма связана обратимым интегральным преобразованием Радона [16] с функцией Вигнера $W(q,p)$ [17]:

$$w(X,\mu,\nu) = \frac{1}{2\pi}\int W(q,p)\,\delta(X-\mu q-\nu p)\,dqdp \tag{1}$$

и, соответственно, с волновой функцией:

$$w(X,\mu,\nu) = \frac{1}{2\pi|\nu|}\left|\int \psi(x)\,e^{\frac{i\mu}{2\nu}x^2-\frac{iX}{\nu}x}dx\right|^2. \tag{2}$$

В частном случае, когда $\mu=\cos\theta$ и $\nu=\sin\theta$, симплектическая томограмма, зависящая от трех переменных, переходит в функцию от двух переменных $w(X,\theta)$, называемую оптической томограммой.

Помимо важного свойства измеримости томограммы обладают другими практически значимыми особенностями. В частности, в терминах томографического представления могут быть заданы энтропийные и информационные характеристики квантовых состояний.

Также томографический подход может быть полезен и при нахождении вероятностей квантовых переходов. Как известно, вероятность перехода P_{nm} из начального состояния n в конечное состояние m через функции Вигнера выражается как интеграл перекрытия:

$$P_{nm} = \frac{1}{2\pi} \int W_n(q,p)\, W_m(q,p)\, dqdp. \qquad (3)$$

Тогда, используя формулу (1), легко получить выражение для вероятностей переходов через симплектическую томограмму [13]:

$$P_{nm} = \frac{1}{2\pi} \int w_n(X,\mu,\nu)\, w_m(Y,-\mu,-\nu)\, e^{i(X+Y)} dXdYd\mu d\nu \qquad (4)$$

и через оптическую томограмму [19]:

$$P_{nm} = \frac{1}{\pi} \int\limits_0^\infty rdr \int_0^{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int w_n(X,\theta)\, w_m(-Y,\theta) \cos(r(X+Y))\, dXdYd\theta. \qquad (5)$$

3. Вероятности квантовых переходов в гармоническом осцилляторе при мгновенном изменении положения равновесия. Рассмотрим гармонический осциллятор, который при $t = 0$ является свободным, а в момент времени $t = t_0$, близкий к нулю, на него действует вынуждающая сила, приводящая к мгновенному сдвигу положения равновесия на величину γ. Для простоты положим, что $\hbar = m = \omega = 1$.

Как известно, волновая функция осциллятора, находящегося на n-ом уровне энергии в начальный момент времени равна:

$$\psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{2^n n!}} e^{-\dfrac{x^2}{2}} H_n(x), \qquad (6)$$

где $H_n(x)$ – полином Эрмита. При мгновенном сдвиге положения равновесия волновая функция принимает следующий вид:

$$\psi_n(x,\gamma,t>t_0) = \langle x|n,\gamma,t>t_0\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{(x-\gamma)^2}{2}} H_n(x-\gamma). \qquad (7)$$

Рассмотрим вероятность перехода с собственного состояния с энергией $E_n = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)$ в состояние с энергией E_m. Интеграл перекрытия соответствующих волновых функций, называемый фактором Франка–Кондона, определяет вероятность возбуждения осциллятора при мгновенном сдвиге положения равновесия, равную:

$$P_{nm} = |\langle n,\gamma,t=0|m,\gamma,t>t_0\rangle|^2 =$$

$$\left|\frac{1}{\sqrt{\pi 2^{n+m} n! m!}} \int e^{-\frac{x^2+(x-\gamma)^2}{2}} H_n(x) H_m(x-\gamma)\, dx\right|^2 . \tag{8}$$

Как показано в [2], вероятность перехода между этими состояниями осциллятора следующим образом выражается через полиномы Лагерра:

$$P_{nm} = \frac{n_<!}{n_>!} \exp\left(-|\kappa|^2\right) |\kappa|^{2|m-n|} \left(L_{n_<}^{|m-n|}\left(|\kappa|^2\right)\right)^2 , \tag{9}$$

где $n_< = \min(n, m)$, $n_> = \max(n, m)$ а $\kappa = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \int_{t'}^{t''} f(t)\, e^{-i\omega t} dt$, где $f(t)$ – возбуждающая сила.

Теперь найдем вероятность переходов в осцилляторе с мгновенно сдвинутым положением равновесия, используя томографический подход.

В соответствии с формулой (2) симплектические томограммы начального и конечного состояний равны следующим выражениям, содержащим полиномы Эрмита:

$$w_n(X, \mu, \nu) = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi(\nu^2 + \mu^2)}} e^{-\frac{X^2}{\nu^2+\mu^2}} \left| H_n\left(\frac{X}{\sqrt{\nu^2 + \mu^2}}\right)\right|^2 ,$$

$$w_m(X, \mu, \nu) = \frac{1}{2^m m! \sqrt{\pi(\nu^2 + \mu^2)}} e^{-\frac{(X+\gamma\mu)^2}{\nu^2+\mu^2}} \left| H_m\left(\frac{X + \gamma\mu}{\sqrt{\nu^2 + \mu^2}}\right)\right|^2 . \tag{10}$$

Тогда вероятность переходов между начальным и конечным состояниями согласно (4) будет равна:

$$P_{nm} = \frac{1}{2\pi} \int \frac{1}{2^n n! 2^m m! \pi(\nu^2 + \mu^2)} e^{-\frac{X^2}{\nu^2+\mu^2} - \frac{(Y-\gamma\mu)^2}{\nu^2+\mu^2}} \left| H_n\left(\frac{X}{\sqrt{\nu^2 + \mu^2}}\right) H_m\left(\frac{Y - \gamma\mu}{\sqrt{\nu^2 + \mu^2}}\right)\right|^2 \times$$

$$\times e^{i(X+Y)} dX dY d\mu d\nu. \tag{11}$$

Как следует из физического смысла, выражения (9) и (11) равны, что дает условие на κ:

$$|\kappa| = \frac{\gamma}{\sqrt{2}}$$

и новое выражение для вероятностей переходов между уровнями энергии параметрического осциллятора, зависящее от величины сдвига положения равновесия:

$$P_{nm} = \frac{n!}{m!} \left(\frac{\gamma^2}{2}\right)^{m-n} \exp\left(-\frac{\gamma^2}{2}\right) \left(L_n^{m-n}\left(\frac{\gamma^2}{2}\right)\right)^2 , \tag{12}$$

где $n < m$. Теперь вычислим вероятность переходов при помощи оптических томограмм. Для начального и конечного состояний они примут вид:

$$w_n(X,\theta) = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} e^{-X^2} \left| H_n(X) \right|^2,$$

$$w_m(X,\theta) = \frac{l}{2^m m! \sqrt{\pi}} e^{-(X+\gamma\cos\theta)^2} \left| H_m(X+\gamma\cos\theta) \right|^2.$$

Как следует из (5), вероятности переходов соответствует следующее интегральное выражение:

$$P_{nm} = \frac{1}{2^n n! 2^m m! \pi^2} \int_0^{\infty} r dr \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int e^{-X^2-(Y-\gamma\cos\theta)^2} \cos\left(r\left(X+Y\right)\right) \times$$
$$\times \left| H_n(X) H_m(Y-\gamma\cos\theta) \right|^2 dX dY d\theta, \tag{13}$$

которое также должно сводиться к выражениям (9) и (11).

Принимая во внимание (12), находим выражение для интеграла, содержащегося в правой части равенства (13):

$$\int\limits_0^{\infty} r dr \int_0^{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int e^{-X^2-(Y-\gamma\cos\theta)^2} \cos\left(r\left(X+Y\right)\right) \left| H_n(X) H_m(Y-\gamma\cos\theta) \right|^2 dX dY d\theta =$$
$$= 2^{m+n} (n!)^2 \pi^2 \left(\frac{\gamma^2}{2}\right)^{m-n} \exp\left(-\frac{\gamma^2}{2}\right) \left(L_n^{m-n}\left(\frac{\gamma^2}{2}\right)\right)^2. \tag{14}$$

Аналогичные интегралы, содержащие гауссовские экспоненты, одномерные и многомерные полиномы Эрмита и специальные функции, рассматривались в [20].

4. Заключение. В данной работе фактически предлагалось вычислить факторы Франка–Кондона через томограммы состояний двухатомных молекул. Интегральные выражения для вероятностей переходов между начальным состоянием до смещения положения равновесия и установившимся конечным состоянием были найдены как через симплектическую, так и оптическую томограммы. Эти новые соотношения выражаются формулами (11), (12), (14). Полученные выражения сравнивались с известными значениями интегралов перекрытия волновых функций. Рассмотрение вероятностей переходов в томографическом представлении можно использовать при изучении квантовых корреляций, в частности, запутанности, возникающих при электронных переходах в многоатомных молекулах.

ЛИТЕРАТУРА

[1] R. P. Feynman, Phys. Rev. **80**, 440 (1950).

[2] J. Schwinger, Phys. Rev. **91**, 728 (1953).

[3] В. С. Попов, УФН **177** (12), 1319 (2007).

[4] K. Husimi, Progress of Theoretical Physics **9** (4), 381 (1953).

[5] А. М. Дыхне, ЖЭТФ **38**, 570 (1960).

[6] H. R. Lewis Jr., W. B. Riesenfeld, Journal of Mathematical Physics **10**, 1458 (1969).

[7] И. Г. Малкин, В. И. Манько, *Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем* (М., Наука, 1979).

[8] V. S. Popov, M. A. Trusov, Physics Letters A **373** (22), 1925 (2009).

[9] S. I. Kryuchkov, S. K. Suslov, J. M. Vega-Guzman, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **46**, 104007 (2013).

[10] P. B. Acosta-Humanez, S. I. Kryuchkov, A. Mahalov, et al., *Degenerate Parametric Amplification of Squeezed Photons: Explicit Solutions, Statistics, Means and Variances*, arXiv:1311.2479 [quant-ph].

[11] E. V. Doktorov, I. A. Malkin, V. I. Man'ko, J. Mol. Spectrosc. **64**, 302 (1977).

[12] J. Huh, R. Berger, Journal of Physics: Conference Series **380**, 012019 (2012).

[13] O. Man'ko, V. I. Man'ko, Journal of Russian Laser Research **18**, 407 (1997).

[14] E. D. Zhebrak, Physica Scripta, **T153**, 014063 (2013).

[15] S. Mancini, V. I. Man'ko, P. Tombesi, Phys. Lett. A **213**, 1 (1996).

[16] J. Radon, Ber. der Sachische Akademie der Wissenschaften Leipzig **69**, 262 (1917).

[17] E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 759 (1932).

[18] V. I. Man'ko, R. Vilela Mendes, Physics Letters A **263** (1), 53 (1999).

[19] M. Bellini, A. S. Coelho, S. N. Filippov, et al., Phys. Rev. A **85**, 052129 (2012).

[20] V. I. Man'ko, A. Wünsche, Quantum Sem. Optics **9**, 381 (1997).

Поступила в редакцию 26 февраля 2014 г.