препринт 3

Г.Е.Векштейн, Г.М.Заславский

К теории релаксации под действием внешнего случайного поля

НОВОСИБИРСК 1966

А Н Н О Т А Ц И Я

Рассматривается поведение двухуровневой системы под действием внешнего поля с частотой, близкой к частоте перехода, и фазой, меняющейся по заданному случайному закону. Получены точные выражения для изменения матрицы плотности со временем без ограничения на соотношение между временем корреляции фаз и временем переходов. В предельном случае получено решение, соответствующее приближению хаотических фаз.

I. В настоящей работе изучается поведение двухуровневой системы под действием монохроматической волны со случайно меняющейся фазой в случае, близком к резонансу. Подобная задача возникает при изучении взаимодействия молекул с излучением, "размытым" вследствие столкновений. При определенных условиях процесс релаксации двухуровневой системы может быть описан с помощью кинетического уравнения (типа уравнения баланса - см. например / I /). Специальный интерес в рассматриваемой задаче представляет вопрос об описании процесса релаксации системы в случае, когда уравнения баланса несправедливы (последнее, обычно, связано с нарушением "приближения хаотических фаз" - ПХФ). Описанная выше задача была решена в работах / 2 / в предположении отсутствия каких-либо временных корреляций между фазами внешнего поля+). Ниже задача о релаксации двухуровневой системы, индуцированная внешним полем со случайно сбивающейся фазой, решается в достаточно общем виде при весьма слабых ограничениях на случайный закон поведения фаз поля. Развитый в работе метод допускает обращение на случай более сложных систем.

2. Уравнения для компонент матрицы плотности, описывающей поведение двухуровневой системы под действием внешнего поля, задаваемого в виде монохроматической волны со случайно меняющейся фазой, имеют вид:

$$\frac{dn}{dt} = 2i\left[F^{*}\rho_{12}e^{i\varepsilon t+i\varphi(t)} - F\rho_{21}e^{-i\varepsilon t-i\varphi(t)}\right]$$

$$\frac{d\rho_{12}}{dt} = iFe^{-i\varepsilon t-i\varphi(t)}n; \quad \frac{d\rho_{21}}{dt} = -iF^{*}e^{i\varepsilon t+i\varphi(t)} \qquad (I)$$

$$n = \rho_{11}-\rho_{22}; \quad \rho_{11}+\rho_{22}=1; \quad \varepsilon = \omega-\omega_0; \quad (\hbar = 1)$$

где ρ_{ik} - компоненты матрицы плотности; ω - частота внешнего поля; ω_0 - частота перехода двухуровневой системы; F - недиагональный матричный элемент возмущения; $\varphi(t)$ - фаза, меняющаяся по заданному случайному закону. При написании системы (I) предполагалось, что

$$\varepsilon \ll \omega_0 \qquad (2)$$

+) А.И.Бурштейн сообщил нам, что в настоящее время им получены результаты, более общие, чем в работах / 2 /.

в соответствии с условием близости к резонансу, и отброшен член, дающий вклад $\sim \varepsilon/\omega_0$. Ниже выбирается специальный вид закона изменения фазы $\varphi(t)$, который позволит в дальнейшем легко провести обобщение для более общего случая. Пусть $\varphi(t)$ имеет вид:

$$\varphi(t) = \alpha \int_0^t \sum_k \delta(t'-t_k)\,dt' \tag{3}$$

т.е. фаза увеличивается скачкообразно в точках t_k, попадающих в интервал $(0, t)$ каждый раз на величину α +). Распределение точек t_k сбива фаз(в дальнейшем - просто толчков) предполагается случайным и заданным в виде пуассоновского распределения. Иными словами, вероятность появления толчка в интервале $(t+dt, t)$ равна $\lambda dt = dt/\tau_0$, или вероятность того, что промежуток времени между любыми двумя последовательными толчками лежит в интервале $(t, t+dt)$ равна $e^{-\lambda t}dt$. Время τ_0 имеет смысл среднего времени между толчками. Нашей конечной целью является определение ρ_{ik}, усредненных по заданному выше случайному процессу.

3. Введем обозначения

$$\rho_1 = \rho_{12}\, e^{i\varepsilon t + i\varphi(t)} \;; \quad \rho_2 = \rho_1^* \tag{4}$$

и перепишем систему (I) в новых переменных:

$$\begin{aligned} \dot n &= 2i(F^*\rho_1 - F\rho_2) \\ \dot\rho_1 &= i\Big(\varepsilon + \alpha\sum_k \delta(t-t_k)\Big)\rho_1 + iFn \\ \dot\rho_2 &= -i\Big(\varepsilon + \alpha\sum_k \delta(t-t_k)\Big)\rho_2 - iF^*n \end{aligned} \tag{5}$$

Рассмотрим теперь фазовое пространство случайных переменных (n, ρ_1, ρ_2) и найдем уравнение, описывающее изменение со временем функции распределения $f(n,\rho_1,\rho_2,t)$. Вид системы (5) позволяет применить для этой цели известный метод, использованный, например, в работах / 3,4 /. Обозначая для удобства переменные (n,ρ_1,ρ_2) одной буквой x, составим уравнение баланса для $f(x,t)$, описывающее изменение числа точек в элементе объема фазового пространства $dx = dn\,d\rho_1\,d\rho_2$ с координатой x за время dt:

$$\begin{aligned} &f(x(t+dt), t+dt)\,dx(t+dt) - f(x,t)\,dx = \\ &= -\lambda dt\cdot f(x,t)\,dx + \lambda dt\cdot f(\bar x,t)\,d\bar x \end{aligned} \tag{6}$$

+) Значение фазы при $t=0$ включено в F.

где первый член в правой части учитывает уход точек из dx вследствие столкновения, а второй член-приход из области $d\bar x$ с координатой $\bar x$ точек вследствие столкновения. Из уравнений (5) имеем:

$$\begin{aligned} &n(t+dt) = n + 2i(F^*\rho_1 - F\rho_2)\,dt \\ &\rho_1(t+dt) = \rho_1 + (i\varepsilon\rho_1 + iFn)\,dt\,;\;\; \rho_2(t+dt) = \rho_2 - (i\varepsilon\rho_2 + F^*n)\,dt \\ &\bar n = n\,;\;\; \bar\rho_1 = \rho_1 e^{-i\alpha}\,;\;\; \bar\rho_2 = \rho_2 e^{+i\alpha}\,; \\ &dx(t+dt) = dx\,;\;\; d\bar x = dx \end{aligned} \tag{7}$$

Подставляя (7) в (6) и переходя к пределу $dt \to 0$, получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} = &-2i(F^*\rho_1 - F\rho_2)\frac{\partial f}{\partial n} - i\frac{\partial}{\partial\rho_1}\big[(\varepsilon\rho_1 + Fn)f\big] + \\ &+ i\frac{\partial}{\partial\rho_2}\big[(\varepsilon\rho_2 + F^*n)f\big] + \lambda f(n,\rho_1 e^{-i\alpha},\rho_2 e^{i\alpha},t) - \lambda f\,; \end{aligned} \tag{8}$$

$$f = f(n,\rho_1,\rho_2,t)$$

Решение уравнения (8) затруднительно для произвольных α. Нам, однако, необходимо найти только моменты функции $f(n,\rho_1,\rho_2,t)$. Умножая (8) последовательно на n, ρ_1, ρ_2 и интегрируя по всему фазовому пространству, получаем:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle n\rangle}{dt} &= 2iF^*\langle\rho_1\rangle - 2iF\langle\rho_2\rangle \\ \frac{d\langle\rho_1\rangle}{dt} &= iF\langle n\rangle + \big[i\varepsilon + \lambda(e^{i\alpha}-1)\big]\langle\rho_1\rangle \\ \frac{d\langle\rho_2\rangle}{dt} &= -iF^*\langle n\rangle + \big[-i\varepsilon + \lambda(e^{-i\alpha}-1)\big]\langle\rho_2\rangle \end{aligned} \tag{9}$$

Отыскивая решение системы (9) в виде $e^{\Gamma t}$, находим:

$$\begin{aligned} &\Gamma^3 + 2\lambda(1-\cos\alpha)\Gamma^2 + \big[4|F|^2 + (\varepsilon + \lambda\sin\alpha)^2 + \\ &+ \lambda^2(1-\cos\alpha)^2\big]\cdot\Gamma + 4|F|^2\lambda(1-\cos\alpha) = 0 \end{aligned} \tag{10}$$

При $\lambda = 0$, либо $\alpha = 0;\ 2\pi$ мы получаем Γ, соответствующее решению системы (I) в отсутствии случайного процесса (см. например / 5 /). Каждый из моментов $\langle n\rangle$, $\langle\rho_{1,2}\rangle$ выражается в виде линейной комбинации решений типа $e^{\Gamma t}$, соответствующих трем корням уравнения (10) и начальным условиям. Задача, однако, решена только для диагональных элементов (n), поскольку переменные $\rho_{1,2}$ нас не интересуют. Перейдем теперь к усреднению недиагонального элемента ρ_{12} .

4. Введем обозначения

$$\rho_0 = n\, e^{-i\varepsilon t - i\varphi(t)}\ ; \quad \rho_3 = \rho_{21}\, e^{-2i\varepsilon t - 2i\varphi(t)} \qquad \text{(II)}$$

и перепишем систему (I) в виде:

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho_0}{dt} &= -i\Big[\varepsilon + \alpha \sum_k \delta(t-t_k)\Big]\rho_0 + 2i\left(F^*\rho_{12} - F\rho_3\right)\\
\frac{d\rho_{12}}{dt} &= iF\rho_0\\
\frac{d\rho_3}{dt} &= -iF^*\rho_0 - 2i\Big[\varepsilon + \alpha\sum_k \delta(t-t_k)\Big]\rho_3
\end{aligned} \qquad \text{(I2)}$$

Теперь мы можем рассмотреть фазовое пространство случайных переменных (ρ_0 , ρ_{12}, ρ_3) и получить уравнение для функции распределения f (ρ_0 , ρ_{12} , ρ_3 , t), которое позволит вычислить $\langle \rho_{12}\rangle$. Аналогично выводу уравнения (8) получим:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial t} = &-\frac{\partial}{\partial \rho_0}\left[(-i\varepsilon\rho_0 + 2iF^*\rho_{12} - 2iF\rho_3, f\right] - iF\rho_0 \frac{\partial f}{\partial \rho_{12}} +\\
&+\frac{\partial}{\partial\rho_3}\left[(2i\varepsilon\rho_3 + iF^*\rho_0)f\right] + \lambda f(\rho_0 e^{i\alpha}, \rho_{12}, \rho_3 e^{2i\alpha})e^{3i\alpha} - \lambda f,
\end{aligned} \qquad \text{(I3)}$$

$$f = f(\rho_0, \rho_{12}, \rho_3, t)$$

Уравнение (I3) приводит к следующим уравнениям для моментов:

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\rho_0\rangle}{dt} &= \left[-i\varepsilon + \lambda(e^{i\alpha}-1)\right]\langle\rho_0\rangle + 2iF^*\langle\rho_{12}\rangle - 2iF\langle\rho_3\rangle\\
\frac{d\langle\rho_{12}\rangle}{dt} &= iF\langle\rho_0\rangle\\
\frac{d\langle\rho_3\rangle}{dt} &= -iF^*\langle\rho_0\rangle + \left[-2i\varepsilon + \lambda(e^{-2i\alpha}-1)\right]\langle\rho_3\rangle
\end{aligned} \qquad \text{(I4)}$$

Отыскивая решение системы (I4) в виде $e^{\gamma t}$ получаем для определения трех комплексных корней γ следующее характеристическое уравнение:

$$\begin{aligned}
&\gamma^3 + \gamma^2\left[3i\varepsilon + \lambda(2 - e^{-i\alpha} - e^{-2i\alpha})\right] + \gamma\left[4|F|^2 - 2\varepsilon^2 -\right.\\
&\left. - i\varepsilon\lambda(e^{-2i\alpha} + 2e^{-i\alpha} - 3) + \lambda^2(e^{-i\alpha}-1)(e^{-2i\alpha}-1)\right] +\\
&+ 2|F|^2\cdot\left[2i\varepsilon - \lambda(e^{-2i\alpha}-1)\right] = 0
\end{aligned} \qquad \text{(I5)}$$

Во избежание громоздких выражений мы не будем выписывать в явном виде корни $\Gamma_{1,2,3}$; $\gamma_{1,2,3}$ уравнений (I0), (I5).

Ясно, однако, что задав определенные начальные условия, теперь можно записать поведение со временем компонент $\langle\rho_{ik}\rangle$, усредненных по заданному случайному процессу сбива фаз.

5. Рассмотрим некоторые предельные случаи. Прежде всего, покажем при каких условиях возникает решение, соответствующее ПХФ, т.е. кинетическому уравнению типа уравнения баланса. Положим

$$\nu = |F|\cdot\tau_0 / \sqrt{1-\cos\alpha} \ll 1\ ; \quad \varepsilon = 0 \qquad \text{(I6)}$$

Из (I0), (I5) имеем:

$$\begin{aligned}
&\Gamma_{1,2} = -\frac{1-\cos\alpha + i\sin\alpha}{\tau_0}\left[1 + O(\nu)\right];\ \Gamma_3 = -\frac{4|F|^2\tau_0}{(1-\cos\alpha)^2 + \sin^2\alpha}\left[1 + O(\nu)\right]\\
&\gamma_{1,2} \approx \Gamma_{1,2}\ ;\ \gamma_3 \approx \frac{1}{2}\Gamma_3
\end{aligned} \qquad \text{(I7)}$$

Если теперь выбрать начальные условия $\langle n\rangle_{t=0} = 1$, $\langle\rho_{12}\rangle_{t=0} = 0$, то из (9), (I4), (I6), (I7) следует:

$$\begin{aligned}
&\langle n\rangle \approx e^{-t/\tau_R}\left[1 + O(\nu)\right];\quad \tau_R \doteq -\Gamma_3\\
&\langle\rho_{12}\rangle \approx iF\tau_0\left\{e^{-t/2\tau_R} - e^{-|\Gamma_2|t}\right\}\cdot\left[1 + O(\nu)\right]
\end{aligned} \qquad \text{(I8)}$$

При написании (I8) мы опустили члены, затухающие намного быстрее со временем ($\sim \exp\{-|\Gamma_{1,2}|t\}$) в $\langle n\rangle$ и несущественный множитель в $\langle\rho_{12}\rangle$, зависящий от α . Из (I8) следует, что хотя при t =0 недиагональный элемент отсутствовал, однако в дальнейшем он возникает с малым коэффициентом $\sim \nu$ и релаксирует к нулю со временем в два раза большим времени релаксации диагональных элементов. Сделаем теперь следующий предельный переход:

$$\tau_0 \to 0;\ |F| \to \infty;\ |F|^2\tau_0 = const \qquad \text{(I9)}$$

В этом случае точный закон поведения $\langle n\rangle$ со временем представляет собой релаксацию со временем τ_R , а $\langle\rho_{12}\rangle \equiv 0$ во все моменты времени. Описанная ситуация соответствует известному приближению получения кинетического уравнения / I /, связанному с ПХФ. Отметим, что для зануления $\langle\rho_{12}\rangle$ во все моменты времени предельный переход (I9) является не единственной возможностью. Исчезновение $\langle\rho_{12}\rangle$ может произойти за счет усреднения по начальной фазе φ_0 ($F = |F|\, e^{i\varphi_0}$) с распределением $W(\varphi_0)\,d\varphi_0 = d\varphi_0 / 2\pi$ (см.вторую формулу в (I8).

В случае, когда $\nu \gg 1$ основным характерным временем задачи становится не τ_R, как в предыдущем случае, а τ_0. Релаксация $\langle \rho_{ik} \rangle$ происходит за времена $\sim \tau_0$ с наложением осцилляций и приближение к равновесию происходит немонотонным образом. Поскольку эти результаты легко следуют из (I0), (I5), то мы соответствующие формулы опускаем.

6. Полученные результаты легко обобщаются для более общих видов случайного процесса $\varphi(t)$. Пусть при каждом толчке вероятность того, что α лежит в интервале $(\alpha, \alpha + d\alpha)$ есть $w(\alpha)\, d\alpha$, одинаковая для каждого толчка. Тогда в (8) два последних члена заменяются на

$$\lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha\, w(\alpha) \left\{ f(n, \rho_1 e^{-i\alpha}, \rho_2 e^{i\alpha}, t) - f \right\}; \quad \left(\int_{-\pi}^{\pi} w(\alpha)\, d\alpha = 1 \right) \qquad (20)$$

Уравнение (I0) заменяется на:

$$\Gamma^3 + 2\lambda(1 - \overline{\cos\alpha})\,\Gamma^2 + \left[4|F|^2 + (\varepsilon + \lambda\overline{\sin\alpha})^2 + \lambda^2 (1 - \overline{\cos\alpha})^2 \right] \cdot \Gamma + 4|F|^2 \lambda (1 - \overline{\cos\alpha}) = 0 \qquad (21)$$

где $\overline{\psi(\alpha)} = \int_{-\pi}^{\pi} \psi(\alpha)\, w(\alpha)\, d\alpha$. Аналогичные изменения проделываются и в уравнениях (I3)-(I5). Если, например, распределение по α (в том числе и начальной фазы, включенной в F!) равномерное, т.е. $w(\alpha) = 1/2\pi$, то мы получаем результаты работ / 2 /.

Если, кроме всего прочего, $\lambda = \lambda(\alpha)$, то в выражении (20) следует внести $\lambda(\alpha)$ под знак интеграла со всеми последующими изменениями.

Отметим, что на случайный процесс изменения фазы внешнего поля имеется физически несущественное ограничение, связанное с отбрасыванием членов порядка ε/ω_0 при решении системы (I). Для случая, например, пуассоновского распределения толчков оно имеет вид:

$$\frac{\alpha}{\omega_0 \tau_0} \ll 1 \qquad (22)$$

В заключение выражаем благодарность С.Т.Беляеву и В.Г.Зелевинскому за полезную критику.

Литература

I. В.М.Файн. УФН, 79, 64I (I963).
2. А.И.Бурштейн. ЖЭТФ, 48, 850 (I965); 49, I363 (I965).
3. H.L. Frish, S.P. Lloyd. Phys. Rev., 120, 1175 (1960)
4. M.A. Leibowith. Journ. Math. Phys. 4, 852 (1963)
5. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. I963.Москва.

Ответственный за выпуск С.С.Моисеев

Тираж - I70 экз. Бесплатно
Отпечатано на ротапринте в ИЯФ СО АН СССР.I0.0I-I966г.