ной постановке электронный КПД не может быть получен из данных об излучаемой электромагнитной мощности, хотя во многих работах приводятся оценки именно такого плана [3, 7]. Используемые в данной работе консервативные конечно-разностные методы позволяют математически корректно вычислять значения мгновенного и усредненного электронного КПД на каждом временно́м шаге. Из приведенных графиков видно, что эффективность передачи энергии электронного пучка электромагнитному полю медленно убывает при увеличении тока инжекции. Однако, как нетрудно убедиться, абсолютная величина этой энергии продолжает расти. Скорее всего, при некотором токе достигается ее максимум. К сожалению, исследование предела больших токов: $I/I_{пр} \simeq 10$ наталкивается на серьезные трудности, поскольку в этом случае область виртуального катода прижимается к плоскости инжекции, что приводит к необходимости измельчения пространственно-временной сетки, а это выходит за рамки возможностей применяемой ЭВМ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Mahafey R. A., Sprangle P., Golden J., Kapetanakos C. A.//Phys. Rev. Lett. 1977. 39, N 13. P. 843. [2] Диденко А. Н., Жерлицын А. Г., Сулакшин А. С. и др.//Письма в ЖТФ. 1983. 9, № 24. С. 1510. [3] Burkhart S. C., Scarpetti R. D., Lundberg R. L.//J. Appl. Phys. 1985. 58, N 1. P. 28. [4] Богданкевич Л. С., Рухадзе А. А.//УФН. 1971. 103, № 4. С. 609. [5] Свешников А. Г., Якунин С. А., Майков А. Р.//ДАН СССР. 1986. 288, № 3. С. 597. [6] Майков А. Р., Свешников А. Г., Якунин С. А.//ЖВМ и МФ. 1985. 25, № 3. С. 883. [7] Kwan T. J., Thode L. E.//Phys. Fluids. 1984. 27, N 7. P. 1570.

Поступила в редакцию
27.01.88

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1989. Т. 30, № 2

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 535.075.8

СУПЕРОПЕРАТОРНАЯ ТЕХНИКА В ЗАДАЧАХ НЕЛИНЕЙНОЙ И НЕМАРКОВСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ

Б. А. Гришанин, В. М. Петникова, В. В. Шувалов

(кафедра общей физики и волновых процессов)

Кратко изложена супероператорная техника математического описания релаксирующих систем в терминах теории случайных процессов, особенно эффективная при исследовании релаксационных свойств нелинейных и немарковских систем нелинейной оптики на основе их динамических микроскопических моделей.

1. **Введение.** Сокращение длительности и повышение интенсивности лазерных импульсов требуют перехода от марковских уравнений Блоха с независимыми от поля релаксационными константами к более общим — нелинейным и немарковским. Это соответствует переходу к динамическому описанию релаксации. Соответствующий полный гамильтониан описывает оптически активную систему, шумовые подсистемы и взаимодействие между ними, приводящее к соответствующим каналам релаксации [1—3]. Однако в рамках математического аппарата замкнутых систем приемлемое изложение теории релаксации невозможно. Необходим переход к методам квантовой теории

случайных процессов. Это аналогично переходу от детерминированных систем классической радиофизики к системам с шумами [4] с использованием классической теории случайных процессов. Различие в описании классических и квантовых систем устраняется при использовании эволюционных супероператоров, что существенно упрощает и физическую интерпретацию многих эффектов. В неявном виде супероператорная техника сравнительно давно применяется в квантовой электронике (вектор Блоха [5], представление Вигнера [6]).

2. **Векторное представление квантовомеханической системы.** Неравноправие квантовых и классических систем устраняется при рассмотрении в качестве исходного объекта не волновой функции, а непосредственно квантовых динамических переменных. Последние описываются линейными операторами $\hat{A}$, образующими линейное пространство. Задав в нем базис $\{\hat{e}_k\}$, представим операторы $\hat{A}$ с помощью разложения $\hat{A}=\Sigma f_k\hat{e}_k$ числовыми наборами (векторами) $\{f_k\}$.

Наиболее употребительны базисы операторов переходов и квазиспина для двухуровневой системы и базис вигнеровски упорядоченных δ-функций для лагранжевых систем. При задании матрицы плотности представление операторов квазиспина вводит вектор Блоха, а представление Вигнера

$$\hat{\rho}=\int p(X)w\delta(\hat{X}-X)h^n\,dX, \quad h=2\pi\hbar$$

— вигнеровскую плотность $p(X)$, где X — набор классических фазовых переменных (импульсов и координат), $\hat{X}$ — соответствующие им канонические квантовомеханические операторы. Для замкнутой двухуровневой системы получаются уравнения Блоха без релаксации, а для лагранжевой системы — уравнение временной эволюции [7]

$$\frac{\partial p}{\partial t}=\mathcal{N}_{X,\partial/\partial X}\frac{1}{i\hbar}\left[\mathcal{H}\left(X+\frac{C}{2}\frac{\partial}{\partial X^T}\right)-\mathcal{H}\left(X-\frac{C}{2}\frac{\partial}{\partial X^T}\right)\right]p,$$

где $\mathcal{H}$ — гамильтониан, C — матрица коммутаторов для $\hat{X}$, пропорциональная $i\hbar$. При $\hbar\to 0$ или для квадратичного гамильтониана это уравнение переходит в классическое уравнение Лиувилля, что и обусловливает предпочтительность представления Вигнера при описании систем с малым ангармонизмом или неклассичностью.

3. **Эволюционные супероператоры и алгебра супероператоров.** Динамика квантовомеханической системы описывается линейным преобразованием матрицы плотности или ее динамических переменных в соответствии с уравнениями Лиувилля или Гейзенберга. В векторном представлении этому преобразованию отвечают дискретная матрица или линейный оператор, действующий на функцию континуального индекса, например X. Поскольку в исходном представлении объектом преобразования являются операторы, такое преобразование называется супероператорным. Удобно иметь два типа представлений супероператоров — символическое, основанное на исходном операторном представлении переменных, и матричное — после перехода к векторному представлению. Алгебраическим операциям с супероператорами также соответствуют символическое и матричное представления, причем второе строится на основе первого. Символическое представление базируется на использовании символа подстановки [7], обозначающего место подстановки оператора $\hat{X}$ в супероператорном выражении $\mathcal{L}=\hat{A}\odot\hat{B}$, которое описывает преобразование $\hat{X}\to\hat{A}\hat{X}\hat{B}$.

Приведем некоторые соотношения алгебры супероператоров в символическом представлении:

1. $(\hat{A}\odot\hat{B})*(\hat{C}\odot\hat{D})=\hat{A}\hat{C}\odot\hat{D}\hat{B}$;
2. $\exp(\hat{A}\odot+\odot\hat{B})=\exp(\hat{A})\odot\exp(\hat{B})$;
3. $[\hat{A},\odot]***[\hat{B},\odot]=[\hat{A},[\ldots,[\hat{B},\odot]\ldots]]$;
4. $\exp[\hat{A},\odot]=\exp(\hat{A})\odot\exp(-\hat{A})$.

Здесь $[\hat{A},\odot]$ обозначает коммутатор $(\hat{A}\odot-\odot\hat{A})$.

Важнейшим супероператором замкнутой системы с гамильтонианом $\mathscr{H}$ является ее лиувиллиан $\mathscr{L}=(-i/\hbar)\,[\widehat{\mathscr{H}},\odot]$. Соотношение 4 выражает для $\hat{A}=(i/\hbar)\widehat{\mathscr{H}}$ тот факт, что соответствующий ей эволюционный супероператор $S=\exp(\mathscr{L}t)$ сводится к преобразованию $U^{-1}\odot U$ с унитарным оператором $U=\exp(-i\mathscr{H}t/\hbar)$. В случае открытой системы это не имеет места.

Для матричного представления супероператоров справедлива обычная алгебра матриц (линейных операторов). Расчет и исследование свойств эволюционных супероператоров релаксирующих систем являются естественным разделом теории открытых систем.

4. **Открытые системы и квантовые случайные процессы.** Открытой системой называют подсистему гамильтоновой системы, описываемой гильбертовым пространством состояний вида $H=H_0\otimes H_f$ (волновая функция составной системы зависит от составного аргумента); H_0 отвечает открытой системе, а H_f — шумовой (резервуару). В расчетах требуется усреднять переменные, отвечающие H_0 и имеющие операторный вид $\hat{A}\otimes\hat{I}$. Алгебра представляющих интерес переменных имеет структуру $L\otimes I$, где L — алгебра операторов в H_0. Если U — унитарное преобразование в полной системе, описывающее изменение во времени, то переменные открытой системы имеют вид $U^{-1}(t)\,(\hat{A}\odot\hat{I})\,U(t)$. Эта операторная функция времени и есть случайный процесс в открытой системе, который в результате взаимодействия между подсистемами качественно отличается от детерминированных процессов вида $U_0^{-1}(t)\hat{A}U_0(t)$.

Задача теории открытых систем состоит в построении методов расчета средних для функций описанных случайных процессов. Стандартным предположением относительно матрицы плотности полной системы является представление $\rho=\rho_0\otimes\rho_f$ (независимость при $t=0$ открытой системы и резервуара). Соответствующее усреднение одновременных переменных дается одним из выражений

$$\langle\hat{A}\rangle=\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}_0 S(t)\hat{A}=\mathrm{Tr}\,\hat{A}S_\rho(t)\hat{\rho}_0, \tag{1}$$

где S — супероператор временной эволюции в представлении Гейзенберга, преобразующий операторы динамических переменных; S_ρ — в представлении Шрёдингера, преобразующий матрицу плотности открытой системы. Эти супероператоры являются аналогами классического переходного распределения вероятностей за время t.

Семейство квантовых одномоментных распределений вероятностей $\hat{\rho}(t)$ и соответствующим образом рассчитываемых многомоментных распределений S_n [7] заменяет для открытой системы ее исходное динамическое описание, феноменологически задавая происходящие в ней случайные процессы. Во многих физических расчетах исходной является динамическая структура открытой системы.

Расчет супероператора S радикально упрощается для марковских систем, для которых, по определению, он распадается на произведение операторов, описывающих эволюцию на промежуточных вре-

менных интервалах. Он может быть представлен в каноническом виде:

$$S(t) = \mathrm{T} \exp\left\{ \int_0^t \mathscr{L}(\tau)\, d\tau \right\}, \tag{2}$$

где T — символ хронологического упорядочения, а супероператор $\mathscr{L}$ называется обобщенным лиувиллианом. В отличие от замкнутой системы $\mathscr{L}$ не имеет вида $(i/\hbar)[\mathscr{H}, \odot]$ и описывает в общем случае и марковскую релаксацию.

5. **Относительность понятия марковости.** В связи с современными приложениями важно остановиться на относительном характере понятия марковости реального физического процесса — в противовес ее математическому абстрактному определению. Последнее предполагает отсутствие изменений в усредненном состоянии за сколь угодно малые интервалы времени вследствие строгого равенства нулю времен корреляции шума. В реальной системе присутствуют переменные, осциллирующие с высокой («несущей») частотой, которая в оптике особенно велика. При интенсивном воздействии на двухуровневые системы становится существенной частота Раби. Она может превосходить не только скорости релаксационных процессов, но и соответствующие времена корреляции [3]. Переход к математическому понятию марковости требует предварительной редукции физически марковской системы с учетом осцилляций. Она осуществляется с помощью представления взаимодействия, отделяющего быстрые движения от медленных: математическое понимание марковости — пренебрежение конечностью времен корреляции — справедливо только в этом представлении.

Применимость марковского приближения может определяться и внешним воздействием. Представим супероператор эволюции составной системы в виде $S(t) = S_f(t) S_d(t)$, где S_d учитывает внешние воздействия в отсутствие шумов, а S_f — взаимодействие с резервуаром. В S_f входят шумовые переменные, преобразованные внешним воздействием. Поскольку оно может существенно повлиять на время корреляции, то очевидна относительность марковости, т. е., например, при достаточно сильных внешних воздействиях марковская система может стать немарковской.

Такое представление эволюционного супероператора лежит в основе расчетов перестройки релаксации внешним резонансным полем. В работе [8] показано, что в двухуровневых системах сильное резонансное поле обычно не приводит к немарковости.

6. **Важнейшие типы квантовых случайных процессов.** Классификация классических случайных процессов сохраняет силу и в квантовом случае. Первое подразделение — на марковские и немарковские процессы — проводится по признаку существенного времени корреляции, т. е. по времени корреляции шума в стохастическом супероператоре S_f в представлении взаимодействия. Вклад вносит не весь спектр шума, а его часть, влияющая на динамику открытой системы и зависящая в общем случае от внешнего поля.

Второе подразделение — непрерывные и скачкообразные случайные процессы. В случае непрерывных процессов стохастический переходный супероператор $S_f(t)$ на малых временах мало отличается от единичного для всех представляющих интерес матриц плотности шумовой подсистемы (реализаций шума). В случае скачкообразных процессов он либо существенно отличен от единицы даже на временах, значительно меньше релаксационных, либо равен единичному. Изме-

нение состояния происходит импульсно за времена, значительно меньшие релаксационных. Для марковских процессов это различие определяет два способа расчета обобщенного лиувиллиана: с использованием разложения $S_f(t, t+\Delta)-1$ по степеням стохастического лиувиллиана и с явным усреднением S_f [7]. Примером скачкообразного квантового процесса является временная зависимость дипольного момента двухуровневого атома при столкновениях. Излучаемое им поле при малой частоте столкновений описывается немарковским процессом, определяющим неоднородное уширение, а при большой — марковским (переход к однородному уширению линии — сужение Дикке).

Третье подразделение связано со структурой открытой системы — с числом ее существенных состояний. Первый класс — процессы в системах с конечным числом базисных состояний. Они аналогичны классическим процессам с конечным числом состояний. Эта аналогия ограничена: классическая система отвечает редукции квантовой. Второй класс — системы с бесконечномерным пространством состояний: в предельных случаях они сводятся к классическим или дискретным. Пример — одномерный осциллятор. Важнейшей его характеристикой является степень ангармонизма, измеряемая неэквидистантностью энергетических уровней. Если она велика, осциллятор редуцируется к многоуровневой квантовой системе. В случае малого по отношению к существенным масштабам частот ангармонизма динамика осциллятора может описываться классически, так как его квантовая скобка Пуассона (лиувиллиан) сводится к классической:

$$(i/\hbar)[\widehat{\mathscr{H}}, \odot]=\{\mathscr{H}, \odot\}+O(\hbar^2).$$

В большинстве экспериментов квантовый характер колебательных степеней свободы в оптике не имеет значения: ангармонизм проявляется на качественном уровне лишь в классическом приближении. Из этого не следует, однако, возможность замены квантовых шумовых переменных на классические непосредственно в исходном гамильтониане до введения эволюционных супероператоров. При таком неверном описании шума теряется динамический характер его взаимодействия с открытой системой: шум становится внешним заданным случайным процессом, не приводящим к диссипации. В теории преобразования релаксации внешним полем это учтено в [8], пример внутримолекулярной релаксации будет рассмотрен в отдельной публикации. Точный переход к классическому описанию возможен только на супероператорном уровне.

Авторы искренне благодарны проф. С. А. Ахманову за плодотворные дискуссии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Климонтович Ю. Л. Кинетическая теория электромагнитных процессов. М., 1980. [2] Файн В. М. Фотоны и нелинейные среды. М., 1972. [3] Апанасевич П. А. Основы теории взаимодействия света с веществом. Минск, 1977. [4] Ахманов С. А., Дьяков Ю. Е., Чиркин А. С. Введение в статистическую радиофизику и оптику. М., 1981. [5] Аллен Л., Эберли Дж. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. М., 1978. [6] Раутиан С. Г., Смирнов Г. И., Шалагин А. М. Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул. М., 1979. [7] Гришанин Б. А. Квантовая электродинамика для радиофизиков. М., 1981. [8] Гришанин Б. А.// //ЖЭТФ. 1983. 85. С. 447.

Поступила в редакцию
14.10.87