

# Вероятности переходов между уровнями энергии в системах с квадратичным гамильтонианом в томографическом представлении



Е.Д. Жебрак  
25 ноября 2014 г.

# Постановка задачи

## Мгновенное возбуждение гармонического осциллятора

### Частный случай 1:

Сдвиг положения равновесия в одномерном осцилляторе

### Частный случай 2:

Сдвиг частоты в одномерном осцилляторе

### Общий случай:

Произвольный сдвиг в многомерной системе с квадратичным гамильтонианом

Цель: нахождение вероятностей переходов между уровнями системы до и после воздействия

# Физическая реализация

Примеры: возбуждение многоатомных молекул резонансным ИК-лазерным излучением, безызлучательные переходы электрона в локальных центрах кристалла и т.д.

Эффект Душинского:

Нормальные координаты в основном и возбужденном электронном состоянии связаны соотношением

$$\vec{x}' = \Lambda \vec{x} + \vec{d}$$



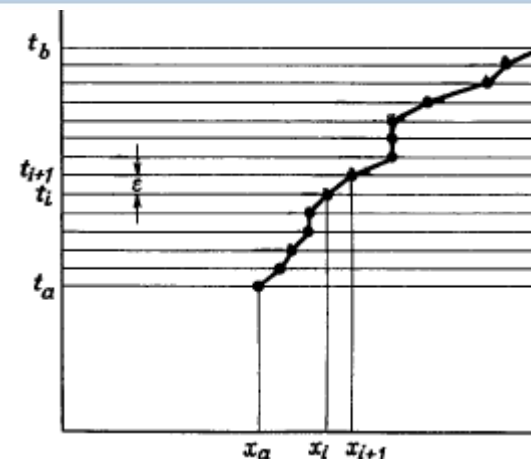
$$\psi_{in}(\vec{x}) = N \tilde{\psi}_{fin}(\Lambda \vec{x} + \vec{d})$$

# Вероятности переходов

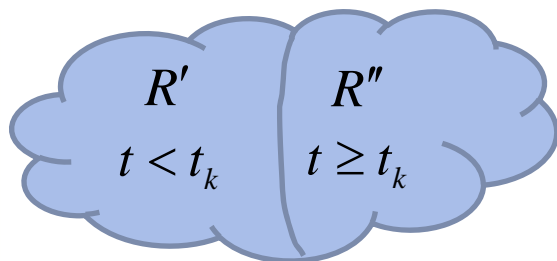
В квантовой механике  $P_{12} \neq P_1 + P_2 = |\varphi_1 + \varphi_2|^2$

Пусть траектория лежит в области  $R$

$$\varphi(R) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_R \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \sum_i S(x_{i+1}, x_i) \right] \dots \frac{dx_i}{A} \frac{dx_{i+1}}{A} \dots$$



$S$  - классическое действие,  $S(x_{i+1}, x_i) = \min \int_{t_i}^{t_{i+1}} L(\dot{x}(t), x(t)) dt$



$$\varphi(R) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{R'} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=-\infty}^{k-1} S(x_{i+1}, x_i) \right] \frac{dx_{k-1}}{A} \frac{dx_{k-2}}{A} \dots \int_{R''} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=k}^{\infty} S(x_{i+1}, x_i) \right] \frac{dx_k}{A} \frac{dx_{k+1}}{A} \dots$$

Волновую функцию можно определить как

$$\psi(\vec{x}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_R \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \sum_i S(x_{i+1}, x_i) \right] \dots \frac{d\vec{x}}{\tilde{A}} \dots$$

# Вероятности переходов

Через волновую функцию:

$$P_{1 \rightarrow 2} \equiv |\varphi(R)|^2 = \left| \int \chi^*(x, t < t_k) \psi(x, t \geq t_k) dx \right|^2$$

Через функцию Вигнера:

$$P_{nm} = \frac{1}{2\pi} \int W_n(q, p) W_m(q, p) dq dp$$

Через симплектическую томограмму:

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



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

# Одномерный осциллятор: сдвиг положения равновесия

Волновая функция:

$$\psi_{t < t_k}(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x)$$

Симплектическая томограмма:

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

## Факторы Франка-Кондона

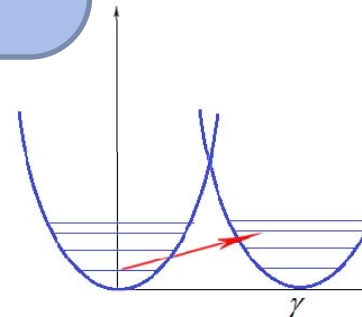
Через волновую функцию

$$\left| \langle n_{t \rightarrow -\infty} | m_{t \rightarrow \infty} \rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^{n+m} n! m!} \int e^{-\frac{x^2 + (x-\gamma)^2}{2}} H_n(x) H_m(x-\gamma) dx \right|^2$$

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

Через симплектическую томограмму

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



# Одномерный осциллятор: сдвиг частоты

Симплектические томограммы начального и конечного состояний:

$$w_n^{in}(X, \mu, \nu, l) = \frac{l}{2^n n! \sqrt{\pi(\nu^2 + \mu^2 l^4)}} e^{-\frac{X^2 l^2}{\nu^2 + \mu^2 l^4}} \left| H_n \left( \frac{Xl}{\sqrt{\nu^2 + \mu^2 l^4}} \right) \right|^2$$

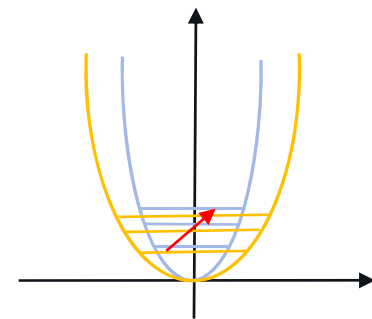
$$w_n^{fin}(X, \mu, \nu, l') = \frac{l'}{2^n n! \sqrt{\pi(\nu^2 + \mu^2 l'^4)}} e^{-\frac{X^2 l'^2}{\nu^2 + \mu^2 l'^4}} \left| H_n \left( \frac{Xl'}{\sqrt{\nu^2 + \mu^2 l'^4}} \right) \right|^2$$

Вероятность перехода:

$$P_{nm} = \frac{ll'}{2^{n+m+1} \pi^2} \int \frac{1}{\sqrt{(\nu^2 + \mu^2 l^4)(\nu^2 + \mu^2 l'^4)}} \exp \left[ -X^2 \left( \frac{l^2}{\nu^2 + \mu^2 l^4} \right) + iX - Y^2 \left( \frac{l'^2}{\nu^2 + \mu^2 l'^4} \right) + iY \right] \times$$

$$\times H_n^2 \left( \frac{Xl}{\sqrt{\nu^2 + \mu^2 l^4}} \right) H_m^2 \left( \frac{Xl'}{\sqrt{\nu^2 + \mu^2 l'^4}} \right) dXdYd\mu d\nu$$

$$P_{nm} = \frac{(n_<!)^2}{2^{n+m} n! m!} \xi \left( P_{m \max}^{m \min}(\xi) \right)^2, \quad \xi = \frac{\sqrt{\omega \omega'}}{\left( \frac{\omega + \omega'}{2} \right)}$$



# N-мерная система с квадратичным гамильтонианом

Волновые функции начального и конечного состояний

$$\psi_{n_1 \dots n_N}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi^N} \sqrt{2^{n_1 + \dots + n_N} n_1! \dots n_N!}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \vec{x}^T \sigma \vec{x} + \vec{\omega}^T \vec{x} + \varphi \right]$$

$$\tilde{\psi}_{n_1 \dots n_N}(\Lambda \vec{x} + \vec{d}) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi^N} \sqrt{2^{n_1 + \dots + n_N} n_1! \dots n_N!}} \exp \left[ -\frac{1}{2} (\Lambda \vec{x} + \vec{d})^T \tilde{\sigma} (\Lambda \vec{x} + \vec{d}) + \vec{\tilde{\omega}}^T (\Lambda \vec{x} + \vec{d}) + \tilde{\varphi} \right]$$

Симплектическая томограмма

$$w_{n_1 \dots n_N}(\vec{X}, \vec{\mu}, \vec{\nu}) = \frac{1}{2^N \pi^{\frac{N}{2}} 2^{n_1 + \dots + n_N} n_1! \dots n_N! |\nu_1 \dots \nu_N| |\det \xi|} \left| \exp \left[ \frac{1}{4} \vec{\kappa}^T \xi^{-1} \vec{\kappa} - \frac{1}{2} \vec{d}^T \tilde{\sigma} \vec{d} + \vec{\tilde{\omega}}^T \vec{d} + \tilde{\varphi} \right] \right|^2$$

$$\times \left| H_{n_1 \dots n_N}^{\left\{ \tilde{\sigma} - \frac{1}{2} \sigma \Lambda \xi^{-1} \Lambda \sigma \right\}} \left( \left( \tilde{\sigma} - \frac{1}{2} \tilde{\sigma} \Lambda \xi^{-1} \Lambda \tilde{\sigma} \right)^{-1} \left( \tilde{\sigma} \vec{d} + \frac{1}{2} \tilde{\sigma} \Lambda \xi^{-1} \vec{\kappa} \right) \right) \right|^2, \quad \xi = \frac{\Lambda \sigma \Lambda}{2} - \sigma, \quad \vec{\kappa} = \Lambda \vec{\tilde{\omega}} + \vec{\eta} - \Lambda \tilde{\sigma} \vec{d}, \quad (\eta)_i = -\frac{iX_i}{\nu_i},$$

$$(\Omega)_{ii} = \frac{i\mu_i}{2\nu_i}, \quad (\Omega)_{ij} = 0.$$



# N-мерная система с квадратичным гамильтонианом: вероятности переходов

Через симплектическую томограмму:

$$\begin{aligned}
 P_{n_1 \dots n_N m_1 \dots m_N} &= \frac{1}{4^N \pi^N 2^{n_1 + \dots + n_N + m_1 + \dots + m_N} n_1! \dots n_N! m_1! \dots m_N!} \int \frac{1}{|v_1 \dots v_N|^2 |\det \xi \det \tilde{\xi}|} \\
 &\times \left| \exp \left[ \frac{1}{4} (\vec{\omega} + \vec{\eta})^T \left( \frac{\sigma}{2} - \Omega \right) (\vec{\omega} + \vec{\eta}) + \frac{1}{4} \vec{k}^T \xi^{-1} \vec{k} - \frac{1}{2} \vec{d}^T \tilde{\sigma} \vec{d} + \vec{\omega}^T \vec{d} + \varphi + \tilde{\varphi} \right] \right|^2 \exp \left[ i (\vec{X} - \vec{Y}) \right] \\
 &\times \left| H_{m_1 \dots m_N}^{\left\{ \sigma - \sigma (\sigma - 2\Omega)^{-1} \sigma \right\}} \left( \left( \sigma - \sigma (\sigma - 2\Omega)^{-1} \sigma \right)^{-1} \left( \sigma (\sigma - 2\Omega)^{-1} (\vec{\omega} + \vec{\eta}) \right) \right) \right|^2 \\
 &\times \left| H_{m_1 \dots m_N}^{\left\{ \tilde{\sigma} - \frac{1}{2} \tilde{\sigma} \Lambda \xi^{-1} \Lambda \tilde{\sigma} \right\}} \left( \left( \tilde{\sigma} - \frac{1}{2} \tilde{\sigma} \Lambda \xi^{-1} \Lambda \tilde{\sigma} \right)^{-1} \left( \tilde{\sigma} \vec{d} + \frac{1}{2} \tilde{\sigma} \Lambda \xi^{-1} \vec{k} \right) \right) \right|^2 d\vec{X} d\vec{Y} d\vec{\mu} d\vec{v}
 \end{aligned}$$

$$\vec{k} = \Lambda \vec{\omega} + \vec{\eta} - \Lambda \tilde{\sigma} \vec{d}, \quad \vec{\eta} = \left( \frac{iY_1}{v_1}, \frac{iY_2}{v_2}, \dots, \frac{iY_N}{v_N} \right)$$

# N-мерная система с квадратичным гамильтонианом: вероятности переходов

Через волновую функцию:

$$\int H_{n_1 \dots n_N}^{\{S\}}(\vec{x}) H_{m_1 \dots m_N}^{\{T\}}(\Lambda \vec{x} + \vec{d}) \exp[-\vec{x}^T M \vec{x} + \vec{c}^T \vec{x}] d\vec{x} = \frac{\pi^{\frac{N}{2}}}{\sqrt{\det M}} \exp\left(\frac{1}{4} \vec{c} M^{-1} \vec{c}\right) H_{n_1 \dots n_N m_1 \dots m_N}^{\{R\}}(\vec{y})$$



$$P_{n_1 \dots n_N m_1 \dots m_N} = \frac{1}{2^{n_1 + \dots + n_N + m_1 + \dots + m_N - N} n_1! \dots n_N! m_1! \dots m_N! |\det(\sigma + \Lambda \tilde{\sigma} \Lambda)|} \left| H_{n_1 \dots n_N m_1 \dots m_N}^{\{U\}} \right|^2$$

$$\times \left| \exp \left[ \frac{1}{2} (\vec{\omega} + \Lambda \vec{\tilde{\omega}} - \Lambda \tilde{\sigma} \vec{d})^T (\sigma + \Lambda \tilde{\sigma} \Lambda)^{-1} (\vec{\omega} + \Lambda \vec{\tilde{\omega}} - \Lambda \tilde{\sigma} \vec{d}) - \frac{1}{2} \vec{d}^T \tilde{\sigma} \vec{d} + \vec{\tilde{\omega}}^T \vec{d} + \varphi + \tilde{\varphi} \right] \right|^2$$

$$R_{11} = \sigma - \frac{1}{2} \sigma (\sigma + \Lambda \tilde{\sigma} \Lambda)^{-1} \sigma, \quad \tilde{R}_{12} = -\frac{1}{2} \tilde{\sigma} \Lambda (\sigma + \Lambda \tilde{\sigma} \Lambda)^{-1} \sigma, \quad R_{22} = \tilde{\sigma} - \frac{1}{2} \tilde{\sigma} \Lambda (\sigma + \Lambda \tilde{\sigma} \Lambda)^{-1} \Lambda \tilde{\sigma},$$

$$\tilde{z}_1' = \frac{1}{4} \left( \sigma (\sigma + \Lambda \tilde{\sigma} \Lambda)^{-1} + (\sigma + \Lambda \tilde{\sigma} \Lambda)^{-1} \sigma \right) (\vec{\omega} + \Lambda \vec{\tilde{\omega}} - \Lambda \tilde{\sigma} \vec{d}), \quad \tilde{z}_2 = \frac{1}{4} \left( \tilde{\sigma} \Lambda (\sigma + \Lambda \tilde{\sigma} \Lambda)^{-1} + (\sigma + \Lambda \tilde{\sigma} \Lambda)^{-1} \Lambda \tilde{\sigma} \right) (\vec{\omega} + \Lambda \vec{\tilde{\omega}} - \Lambda \tilde{\sigma} \vec{d}) + \tilde{\sigma} \vec{d}$$

**Спасибо  
за внимание!**