

ВРЕМЯ ВОЗВРАЩЕНИЙ В КВАНТОВОЙ ДИНАМИКЕ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ

*М. Л. Стрекалов**

*Институт химической кинетики и горения Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 19 мая 2016 г.

Волновой пакет, составленный из линейной суперпозиции связанных состояний с произвольным спектром энергий, возвращается произвольно близко к начальному состоянию после достаточно долгого времени. Развита метод, в котором квантовые времена возвращений рассчитываются точным образом. В частности, точное аналитическое выражение выведено для времени возвращения в предельном случае двухуровневой системы. В общем случае обратное время возвращения пропорционально распределению Гаусса, которое зависит от двух параметров: средней величины и дисперсии вероятности возвратов. Установлена зависимость времени возвращения от среднего уровня возбуждения системы. Время возвращения будет самым длинным при максимальном уровне возбуждения.

DOI: 10.7868/S0044451017010023

1. ВВЕДЕНИЕ

Времена возвращений есть мера временного интервала, в течение которого система возвращается в малую окрестность первоначального состояния, из которого она стартовала в прошлом. Пуанкаре был первым, кто строго доказал существование времени возвращения, исходя из доказанной теоремы о возвратах. Чандрасекар сделал критический обзор значений этой теоремы для кинетической теории и статистической механики [1]. Он доказал, что малые флуктуации от равновесия будут иметь малые циклы Пуанкаре, тогда как большие флуктуации должны приводить к очень длинным циклам Пуанкаре. Первый расчет среднего времени возвращения для линейной цепочки классических осцилляторов был осуществлен много позднее [2]. Квантовый аналог теоремы Пуанкаре был сформулирован в [3], однако фактических оценок времени возвращения в этой работе сделано не было. Для квантовой системы эта теорема утверждает следующее: если $\Psi(x, 0)$ — волновая функция в начальный момент времени и ε — любое положительное число, то найдется по крайней мере одно время t , для которого расстояние между $\Psi(x, 0)$ и $\Psi(x, t)$ будет меньше чем ε . В результате квантовое время возвраще-

ния удалось приближенно оценить через расстояние между начальным и конечным состояниями системы [4, 5]. В дальнейшем значительное внимание было уделено теоретическому рассмотрению эффекта возрождения волновых пакетов [6–18]. Специально отметим, что этот эффект является не только теоретической концепцией, он неоднократно наблюдался во множестве квантовых систем, таких как колебательные уровни молекул [19], ридберговские волновые пакеты в атомах [20] и молекулах [21], холодные атомы в оптических ловушках [22], полупроводниковые квантовые ямы [23], поляризационное эхо в ЯМР [24] и др. (подробности можно найти в обзорах [9, 11–14, 20, 22]). Явление возрождений используется как средство сжать нежелательную дисперсию волновых пакетов при лазерном разделении изотопов [25].

Квантовый волновой пакет возвращается к своей первоначальной форме в определенные моменты времени из-за интерференции между связанными состояниями нелинейной системы, из волновых функций которой составлен этот пакет [6, 7, 11–18]. Возрождения волновых пакетов есть неотъемлемое свойство квантовых систем, когда их временная эволюция управляется спектром собственных значений энергии, которые аналитически зависят от квантовых чисел. По этой причине соответствующий классический гамильтониан должен быть интегрируемым в фазовом пространстве. Для квантовых

* E-mail: strekalov@kinetics.nsc.ru

систем полное возрождение будет истинным в том смысле, что волновой пакет при $t = T_{rev}$ точно равен волновому пакету, взятому при $t = 0$. Обозначим через $f(t)$ абсолютный квадрат автокорреляционной функции, которая описывает квантовую динамику волновых пакетов. В нашей предыдущей работе [18] мы показали, что $f(t)$ есть периодическая функция с периодом, равным истинному времени возрождения. Другими словами, для конечного числа связанных состояний существует время T_{rev} , которое является корнем уравнения $f(t) = 1$, причем величины kT_{rev} ($k = 1, 2, \dots$) также являются корнями этого уравнения. Дробные возрождения появляются как зависящие от времени масштабные копии начального волнового пакета. Времена дробных возрождений — это простые дроби времени возрождения [6, 7].

Тем не менее, истинное время возрождения может оказаться настолько чрезвычайно большим, что никогда не сможет быть достигнуто в экспериментах. Вместо этого времени можно попытаться найти среднее время между ансамблем одинаковых повторяющихся событий. Рассмотрим более сложный случай. Пусть $f(t)$ равна ε в некоторый момент времени t_0 . Если эта функция принимает значение ε один раз, то она будет принимать это значение бесконечное число раз. Наша задача состоит в том, чтобы вычислить среднее время возвращения, когда $f(t)$ возвращается к прежней величине, равной $\varepsilon = f(t_0)$, где $0 \leq \varepsilon < 1$. Ясно, что времена возвращений зависят от начальных условий, тогда как времена возрождений не зависят от начальных условий и определяются только дискретным спектром собственных значений [11–18]. В первом случае можно выбрать начальные условия таким образом, чтобы эти времена были доступны для измерений. Во втором случае выбор такой возможности отсутствует, и время, полученное из уравнения $f(T_{rev}) = 1$, может оказаться очень большим.

В разд. 2 дается постановка задачи и приводится ее решение. Необходимые численные оценки даются в разд. 3, где используются уровни энергии осциллятора Морзе и биномиальное распределение для весовых коэффициентов. Это распределение позволит нам исследовать зависимость времени возвращения от квантового состояния, в котором находится возбужденная система.

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ КВАНТОВОГО ВРЕМЕНИ ВОЗВРАЩЕНИЯ

Чтобы вычислить квантовое время возвращения, рассмотрим зависящую от времени волновую

функцию в виде локализованного волнового пакета как линейную суперпозицию собственных функций нелинейного осциллятора:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^N c_n \phi_n(x) \exp\left(-i \frac{E_n t}{\hbar}\right). \quad (1)$$

Здесь E_n — собственные значения и $\phi_n(x)$ — собственные функции для частицы, удерживаемой в одномерном потенциале $V(x)$. В этом уравнении $|c_n|^2 = p_n$ — весовые коэффициенты, зависимость которых от квантового числа n определяет локализацию волнового пакета в энергетическом пространстве. Далее, будем рассматривать динамику волнового пакета, используя пространственно усредненную автокорреляционную функцию, которая задается как проекция движущегося волнового пакета на его начальное состояние [15–17]:

$$A(t) = \sum_{n=0}^N p_n \exp(-i\omega_n t), \quad (2)$$

где $\omega_n = E_n/\hbar$. Зависящий от времени экспериментальный сигнал, возникающий от большого числа одновременно возбужденных квантовых состояний, будет пропорционален абсолютному квадрату автокорреляционной функции [17]. Вероятность повторного появления или просто вероятность возвратов определяется как $f(t) = |A(t)|^2$. Эта функция представляет собой упрощенную форму квантовой достоверности (fidelity) или эха Лошмидта [8, 9]. Она также известна как вероятность выживания [16].

В квантовой теории расстояние между двумя состояниями $\Psi(x, 0)$ и $\Psi(x, t)$ дается действительной частью автокорреляционной функции [3]

$$D(t) = 2 \left[1 - \sum_{n=0}^N p_n \cos(\omega_n t) \right]. \quad (3)$$

Пусть $N_T(q)$ — число нулей $\text{Re}[A(t)] - q$ на интервале $[0, T]$. Средняя частота достижения q функцией $\text{Re}[A(t)]$ дается уравнением [26]

$$L(q) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{N_T(q)}{T}. \quad (4)$$

Следовательно, можно записать обратное время возвращений в следующем виде:

$$\frac{1}{T_r} = L\left(1 - \frac{\varepsilon}{2}\right), \quad (5)$$

где T_r — среднее время, при котором выполняется соотношение $D(t) = \varepsilon$. С помощью этого подхода были сделаны приближенные оценки времени возвращения для конкретных начальных состояний [4, 5].

Две проблемы возникают при практическом применении этой оценки времени возврата. Во-первых, действительная часть автокорреляционной функции не измеряется в экспериментах. Во-вторых, согласно квантовой теореме о возвратах, ε может быть любым положительным числом. Можно показать, что более подходящей величиной будет вероятность возвратов. В таком случае ε — это начальная величина вероятности возвратов. Далее, будем использовать функцию $f(t)$, чтобы рассчитать время возврата из уравнения $f(t) = \varepsilon$. Это конструктивное определение с экспериментально измеряемой функцией открывает путь к экспериментальному определению этих времен.

Для дальнейшего продвижения нам понадобятся средняя величина и дисперсия функции $f(t)$, рассчитанные усреднением по времени за очень большой промежуток времени. Простые выкладки приводят к результату

$$\langle f \rangle = \sum_{n=0}^N p_n^2 \quad (6)$$

и

$$\langle \Delta f^2 \rangle = 2 \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{n' > n}^N p_n^2 p_{n'}^2 = \langle f \rangle^2 - \sum_{n=0}^N p_n^4. \quad (7)$$

На временах, больших, чем классический период, функция $f(t)$ осциллирует около постоянной величины и ведет себя как

$$f(t) = \langle f \rangle + 2 \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{n' > n}^N p_n p_{n'} \cos((\omega_n - \omega_{n'})t). \quad (8)$$

На временных масштабах порядка классического периода поведение зависящих от времени членов суммы остается коррелированным и эта функция приближенно показывает классическую периодичность. Такое поведение особенно характерно для низких уровней возбуждения (разности частот максимальны при малых n). Поскольку разности частот сгущаются к пределу диссоциации, зависимость от времени становится слабо выраженной именно в этом случае. На более длинных временах осциллирующие компоненты испытывают расфазировку, что ведет к большим выбросам относительно средней величины. При средних уровнях возбуждения существенный вклад в сумму (8) дают многие компоненты. Из-за этого возникает область почти хаотического поведения $f(t)$, ограниченная сверху и снизу (область флуктуаций). Резкие пики возникают благодаря дробным возрождениям.

Пусть t_m — m -й корень уравнения $f(t) = \varepsilon$. Численное нахождение этих корней является гораздо более сложной задачей в случае, когда $\varepsilon \neq 1$. Она нелегко поддается численному решению, а с физической точки зрения интерес представляет только минимальный корень. Вместо этого мы вычислим число корней $N_T(\varepsilon)$ приведенного выше уравнения на большом интервале $[0, T]$. Как и в уравнении (4), средняя частота достижения ε функцией $f(t)$ равна

$$\frac{1}{T_{rec}(\varepsilon)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{N_T(\varepsilon)}{T}. \quad (9)$$

Будем использовать оба термина: средняя частота и обратное время возврата или, проще говоря, время возврата.

Легко убедиться в том, что число корней на интервале $[0, T]$ дается уравнением

$$N_T(\varepsilon) = \int_0^T \sum_m \delta(t - t_m) dt. \quad (10)$$

Далее, используя хорошо известные свойства дельта-функции, это уравнение можно записать в виде

$$N_T(\varepsilon) = \int_0^T |f'(t)| dt \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{i[f(t) - \varepsilon]x\} \frac{dx}{2\pi}. \quad (11)$$

Теперь представим производную $|f'(t)|$ в интегральном виде:

$$|f'(t)| = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - \cos[f'(t)y]}{y^2} dy. \quad (12)$$

Ясно, что уравнения (11) и (12) совместно с (9) эквивалентны следующему:

$$\frac{1}{T_{rec}(\varepsilon)} = \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{y^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{i(\langle f \rangle - \varepsilon)x\} \times \left[R(x, 0) - \frac{1}{2} R(x, y) - \frac{1}{2} R(x, -y) \right] dx, \quad (13)$$

где

$$R(x, y) = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T \exp\{i\Phi(x, y, t)\} \frac{dt}{T}. \quad (14)$$

С помощью уравнения (8) фазу $\Phi(x, y, t)$ можно легко рассчитать:

$$\Phi(x, y, t) = 2 \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{n' > n}^N p_n p_{n'} [x \cos((\omega_n - \omega_{n'})t) - (\omega_n - \omega_{n'})y \sin[(\omega_n - \omega_{n'})t]]. \quad (15)$$

Для удобства мы выделили из этого выражения постоянную величину $\langle f \rangle$ и включили ее в уравнение (13).

При вычислении предела, указанного в уравнении (14), будем использовать прием, который позволяет заменить средние по времени средними по фазовому пространству большого многомерного тора [27]. Если частоты ω_n линейно независимы, то функцию $R(x, y)$, записанную в виде произведения экспонент,

$$R(x, y) = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T \prod_{n=0}^{N-1} \prod_{n' > 0}^N \exp \{ i 2 p_n p_{n'} [x \cos((\omega_n - \omega_{n'})t) - (\omega_n - \omega_{n'})y \sin((\omega_n - \omega_{n'})t)] \} \frac{dt}{T}, \quad (16)$$

можно заменить эквивалентным выражением:

$$R(x, y) = \prod_{n=0}^{N-1} \prod_{n' > 0}^N \int_0^{2\pi} \exp \{ i 2 p_n p_{n'} [x \cos \theta - (\omega_n - \omega_{n'})y \sin \theta] \} \frac{d\theta}{2\pi}. \quad (17)$$

Интегрирование по θ приводит к результату

$$R(x, y) = \prod_{n=0}^{N-1} \prod_{n' > 0}^N J_0 \left(2 p_n p_{n'} \sqrt{x^2 + (\omega_n - \omega_{n'})^2 y^2} \right). \quad (18)$$

Итак, уравнения (13) и (18) дают принципиальную возможность рассчитать время возвращения без всяких приближений. Если число связанных состояний не слишком велико, то необходимую функцию $R(x, y)$ можно численно рассчитать точно как из уравнений (14) и (16), так и из (18). Совпадение результатов является тестом в наших численных расчетах времени возвращения.

Развитый метод позволяет получить точное аналитическое выражение для времени возвращения в случае квантовой системы, состоящей из двух состояний 0 и 1. Вычисления тривиальны и в результате получаем

$$T_{rec}(\varepsilon) = \frac{\pi \hbar}{|E_0 - E_1|}, \quad (1 - 2p_0)^2 < \varepsilon < 1. \quad (19)$$

Специально подчеркнем, что время возвращения существует только в случае, когда начальное состояние является смешанным состоянием. При $(1 - 2p_0)^2 > \varepsilon$ время возвращения становится

бесконечно большим. Этот факт нетрудно понять, поскольку функция $f(t) - \varepsilon$ нигде не обращается в нуль, если имеет место это неравенство. Итак, двухуровневая система — самый простой пример быстрых возвращений.

Численная оценка времени возвращения с помощью уравнений (13) и (18) дает точную величину. Однако эта численная задача становится весьма сложной, когда число связанных состояний очень велико. Для решения этой задачи мы используем прием, который при больших N дает удовлетворительные результаты. Более того, на этом пути удастся вывести аналитическое выражение для $T_{rec}(\varepsilon)$. Рассмотрим выражение [28]

$$J_0(2\sqrt{t}) = e^{-t} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \sum_{m=0}^k (-1)^m \binom{k}{m} \frac{1}{m!}. \quad (20)$$

Это выражение позволяет нам переписать уравнение (18) в виде

$$R(x, y) = \left(1 - \frac{1}{4} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{n' > n}^N t_{nn'}^2 + \dots \right) \times \exp \left(- \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{n' > n}^N t_{nn'} \right), \quad (21)$$

где

$$t_{nn'} = p_n^2 p_{n'}^2 [x^2 + (\omega_n - \omega_{n'})^2 y^2]. \quad (22)$$

В разложении перед экспонентой встречаются слагаемые, которые пропорциональны $(p_n^2 p_{n'}^2)^k$, $k = 2, 3, \dots$. Следовательно, уравнение (18) мы переписали в виде разложения по малому параметру. Функция $R(x, y)$ имеет острый пик вблизи нуля ($x = 0$ и $y = 0$) и быстро убывает, если x и y сколько-нибудь заметно отличаются от нуля, особенно в пределе больших N . По этой причине мы оставили в уравнении (21) только первую исчезающую поправку, чтобы контролировать точность вычислений. Необходимые расчеты приведены в разд. 3. Здесь мы дадим наш главный результат:

$$\frac{1}{T_{rec}(\varepsilon)} \approx \frac{\sqrt{\langle \Delta \omega^2 \rangle}}{\pi} \exp \left[- \frac{(\varepsilon - \langle f \rangle)^2}{2 \langle \Delta f^2 \rangle} \right], \quad (23)$$

где

$$\langle \Delta \omega^2 \rangle = \frac{2}{\langle \Delta f^2 \rangle} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{n' > n}^N p_n^2 p_{n'}^2 (\omega_n - \omega_{n'})^2. \quad (24)$$

Итак, средняя частота достижения $\varepsilon = f(t_0)$ посредством $f(t)$ дается распределением Гаусса, параметрами которого являются средняя величина и

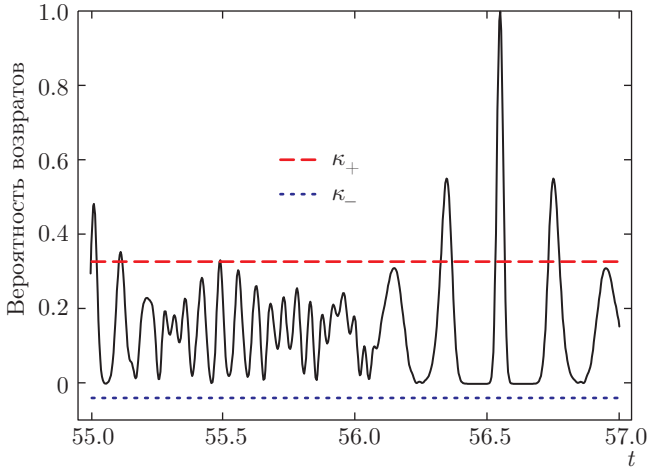


Рис. 1. Вероятность возвратов как функция времени. Параметры: $N = 20$, $u = 1$, $v = 3$ и $x_e \omega_e = 1$. Система возбуждается в состояние с $\langle n \rangle = 5$ и $\langle \Delta n^2 \rangle = 3.75$

дисперсия этой функции. Если число связанных состояний очень велико, то период циклов Пуанкаре становится очень большим для величин $f(t)$ за пределами области флуктуаций (κ_-, κ_+), но он будет порядка $\pi/\sqrt{\langle \Delta \omega^2 \rangle}$ для величин $f(t)$ внутри области флуктуаций. Для распределения Гаусса верхняя и нижняя границы области флуктуаций даются выражением

$$\kappa_{\pm} = \langle f \rangle \pm \sqrt{2\langle \Delta f^2 \rangle}. \quad (25)$$

На рис. 1 представлена зависимость $f(t)$ (в единицах, при которых $x_e \omega_e = 1$). Для наглядности показан лишь небольшой интервал времени. Вне интервала картина получается качественно такая же. Мы видим, что вероятность возвратов осциллирует (более или менее быстро) внутри области флуктуаций, иногда показывая резкие выбросы, которые называются дробные возрождения [11, 12]. При выбранных параметрах истинное время возрождения получается равным 56.55 (см. уравнение (21) в [18]). Мы видим на рисунке, что $f(T_{rev}) = 1$ для этого времени.

3. ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ МЕТОДА

Обрисовав в общих чертах наш главный результат, теперь обратимся к деталям вычислений. Рассмотрим общий случай, когда число связанных состояний может быть произвольным, включая двухуровневую систему. Тогда удобно моделировать весовые коэффициенты биномиальным распределением

$$p_n = \binom{N}{n} \left(\frac{\bar{n}}{N}\right)^n \left(1 - \frac{\bar{n}}{N}\right)^{N-n}, \quad (26)$$

где \bar{n}/N — параметр распределения с областью определения $0 \leq \bar{n}/N \leq 1$. Биномиальное распределение характеризуется средней величиной $\langle n \rangle = \bar{n}$ и дисперсией $\langle \Delta n^2 \rangle = \bar{n}(1 - \bar{n}/N)$. Во многих экспериментальных реализациях локализованный волновой пакет создается с распределением по квантовым числам, которое центрируется около среднего квантового числа \bar{n} . Обычно это распределение Гаусса [11–17]. Заметим, что этот случай содержится в биномиальном распределении, которое имеет дело с конечным числом связанных состояний. Когда N велико и дисперсия $\langle \Delta n^2 \rangle$ тоже велика, биномиальное распределение стремится к распределению Гаусса. С другой стороны, именно эти условия выполняются для волновых пакетов, которые формируются из ридберговских состояний [11, 12], что послужило причиной широкого применения гауссова распределения в дальнейшем. Однако для многих экспериментальных реализаций квантовое число \bar{n} не слишком велико и применение биномиального распределения более оправдано для таких систем.

В рамках биномиального распределения среднюю величину функции $f(t)$ можно рассчитать в аналитическом виде:

$$\langle f \rangle = \left(1 - 2\frac{\bar{n}}{N}\right)^N P_N \left(\frac{1 - 2\bar{n}/N + 2(\bar{n}/N)^2}{1 - 2\bar{n}/N}\right), \quad (27)$$

где $P_N(x)$ — полином Лежандра. Этот результат получается непосредственно из определения полиномов Якоби [29]. При $\bar{n}/N \rightarrow 0$ или $\bar{n}/N \rightarrow 1$ средняя величина стремится к единице, поскольку ансамбль молекул находится либо в основном состоянии, либо в максимально возбужденном состоянии (рис. 2). Средняя величина достигает минимума при $\bar{n} = N/2$ и равна

$$\langle f \rangle_{min} = \frac{(2N)!}{2^{2N}(N!)^2}. \quad (28)$$

Как видно на рис. 2, дисперсия вероятности возвратов обращается в нуль в этих предельных случаях. Вероятность найти систему в состоянии n стремится к единице при $\bar{n} = 0$ или $\bar{n} = N$, поэтому $\langle \Delta f^2 \rangle = 0$. Локальный минимум расположен при $\bar{n} = N/2$ и его величина равна

$$\langle \Delta f^2 \rangle_{min} = \left[\frac{(2N)!}{2^{2N}(N!)^2} \right]^2 - \frac{1}{2^{4N}} \sum_{n=0}^N \binom{N}{n}^4. \quad (29)$$

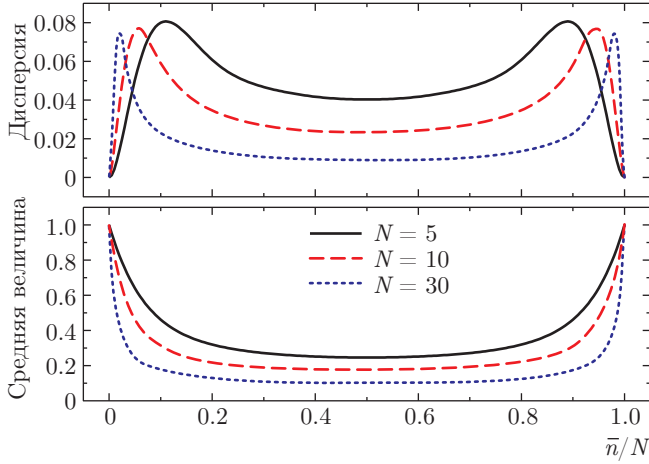


Рис. 2. Средняя величина и дисперсия вероятности возвратов в зависимости от параметра распределения \bar{n}/N для различных величин N

Наличие двух локальных максимумов — свойство, присущее биномиальному распределению. Фактически мы имеем дело с низковозбужденной системой при $\bar{n}/N < 0.5$ и высоковозбужденной системой при $\bar{n}/N > 0.5$.

Для систем, связанных с тепловым резервуаром, распределение (26) несправедливо. В этом случае p_n есть тепловое распределение при температуре T . В таких задачах циклы возвратов определяют переход от регулярной динамики к стохастической. Как известно, циклы Пуанкаре очень велики при обычных температурах [1], поэтому мы только кратко рассмотрим случай теплового распределения.

Средняя величина и дисперсия функции возвратов выражаются теперь через статистическую сумму системы $Q(\beta)$, где $\beta = 1/k_B T$, а именно:

$$\langle f \rangle = \frac{Q(2\beta)}{Q(\beta)^2}, \quad (30)$$

$$\langle \Delta f^2 \rangle = \frac{Q(2\beta)^2 - Q(4\beta)}{Q(\beta)^4}. \quad (31)$$

Пусть мы имеем дело с колебаниями нелинейного осциллятора. При комнатной температуре система находится преимущественно в основном состоянии. Тогда средняя величина близка к единице, а дисперсия стремится к нулю. Из уравнения (23) видно, что времена возвратов будут аномально большими. Напротив, в пределе высоких температур средняя величина равна $1/(N+1)$ и дисперсия — $N/(N+1)^3$. Из уравнения (23) сразу находим $T_{rec}(\varepsilon)$ в высоко-температурном приближении:

$$\frac{1}{T_{rec}(\varepsilon)} \approx \frac{1}{\pi} \left[\frac{2}{N(N+1)} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{n'>n}^N (\omega_n - \omega_{n'})^2 \right]^{1/2} \times \exp \left\{ -\frac{N+1}{2N} [(N+1)\varepsilon - 1]^2 \right\}. \quad (32)$$

Итак, времена возвратов доступны для измерений при высоких температурах и небольшом числе связанных состояний, из которых формируется волновой пакет. Последний вывод был сделан ранее [4], исходя из других соображений. Если начальная вероятность возвратов близка к нулю, то это будет случай быстрых возвратов при любом N . Заметим, что времена возвратов в двух предельных случаях с $\varepsilon = 1$ и $\varepsilon = 0$ различаются очень сильно. Их отношение возрастает с увеличением числа состояний как $\exp(N^2/2)$.

Чтобы придать определенную завершенность нашему методу и получить численные оценки, рассмотрим дискретные уровни энергии, которые возникают в потенциале Морзе:

$$\omega_n = -x_e \omega_e \left(N + \frac{u}{v} - n \right)^2, \quad (33)$$

где $\omega_n = 0$ при $n > N$. Здесь ω_e — гармоническая частота, x_e — константа ангармоничности, $u/v = N_m - N$ — простая дробь,

$$N_m + \frac{1}{2} = \left(\frac{2mDL^2}{\hbar^2} \right)^{1/2}. \quad (34)$$

Частица массы m удерживается в потенциале Морзе, где D — энергия диссоциации и L — характерная длина потенциала (см. подробности в работе [18]).

Почтительно найти первую поправку к уравнению (23), чтобы сделать определенные выводы относительно области применимости метода. Используя приближение (21), можно переписать $R(x, y)$ в виде

$$R(x, y) = \left(1 - \frac{\Omega^{(0)}x^4 + 2\Omega^{(2)}x^2y^2 + \Omega^{(4)}y^4}{4} + \dots \right) \times \exp(-ax^2 - by^2). \quad (35)$$

Чтобы не писать громоздких формул, мы ввели обозначения

$$a = \frac{1}{2} \langle \Delta f^2 \rangle, \quad b = \frac{1}{2} \langle \Delta f^2 \rangle \langle \Delta \omega^2 \rangle, \quad c = \langle f \rangle - \varepsilon \quad (36)$$

и

$$\Omega^{(k)} = \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{n'>n}^N p_n^4 p_{n'}^4 (\omega_n - \omega_{n'})^k. \quad (37)$$

Вычисление времени возвращения сводится к расчету повторного интеграла:

$$\frac{1}{T_{rec}(\varepsilon)} = \frac{2}{\pi^2} \int_0^\infty [I(0) - I(y)] \frac{dy}{y^2}, \quad (38)$$

где

$$I(y) = \int_0^\infty \cos(cx) R(x, y) dx. \quad (39)$$

Подставляя уравнение (35) в (39), находим

$$I(y) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(-by^2 - \frac{c^2}{4a}\right) \times \\ \times \left[1 - \frac{3\Omega^{(0)}}{16a^2} \left(1 - \frac{c^2}{a} + \frac{c^4}{12a^2}\right) - \right. \\ \left. - \frac{\Omega^{(2)}y^2}{4a} \left(1 - \frac{c^2}{2a}\right) - \frac{\Omega^{(4)}y^4}{4} \right]. \quad (40)$$

Затем мы получаем

$$\frac{1}{T_{rec}(\varepsilon)} = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{b}{a}} [1 + C(\varepsilon)] \exp\left(-\frac{c^2}{4a}\right), \quad (41)$$

где поправка дается выражением

$$C(\varepsilon) = -\frac{3\Omega^{(0)}}{16a^2} \left(1 - \frac{c^2}{a} + \frac{c^4}{12a^2}\right) + \\ + \frac{\Omega^{(2)}}{8ab} \left(1 - \frac{c^2}{2a}\right) + \frac{\Omega^{(4)}}{16b^2}. \quad (42)$$

Далее будем называть расчет $T_{rec}(\varepsilon)$ согласно уравнениям (13) и (18) численно точным. Приближение 1 дается уравнением (41), приближение 2 соответствует уравнению (23). На рис. 3 показана зависимость времени возвращения от начальной вероятности возвратов $\varepsilon = f(t_0)$. Параметры $N = 8$, $u = 3$, $v = 4$, $x_e\omega_e = 75 \text{ см}^{-1}$ примерно соответствуют молекуле HgH [30]. Для таких гидридов число колебательных уровней не слишком велико. В таком случае точный расчет $T_{rec}(\varepsilon)$ будет тестом для аналитических приближений. Теперь обратим внимание на уравнение (13), в котором y — размерная переменная. Обратное время возвращения можно вычислить при $x_e\omega_e = 1$, но результат нужно разделить на конкретную величину $x_e\omega_e$. Если эта частота дается в см^{-1} , то время возвращения измеряется в фемтосекундах. Величина $\pi/\sqrt{\langle\Delta\omega^2\rangle}$ равна 11 фс при $\langle n \rangle = 1$ и 49 фс при $\langle n \rangle = 7$. Поправка из уравнения (42) является функцией переменных \bar{n} и ε , но не зависит от конкретной величины $x_e\omega_e$.

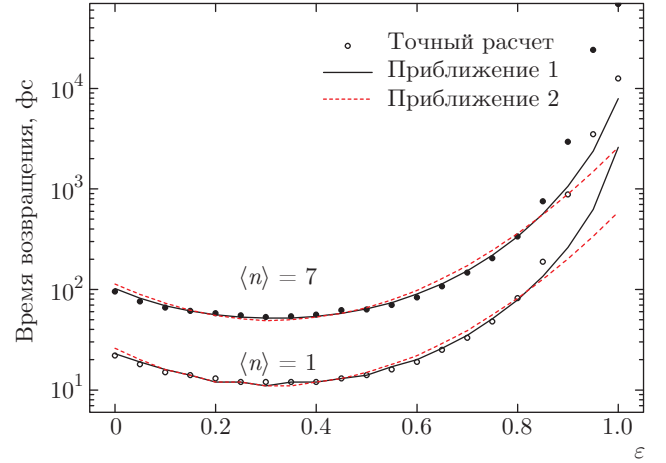


Рис. 3. Время возвращения как функция ε для различных величин среднего уровня возбуждения. Параметры: $N = 8$, $u = 3$, $v = 4$ и $x_e\omega_e = 75 \text{ см}^{-1}$

Как видно на рис. 3, время возвращения растет с увеличением среднего уровня возбуждения системы. Эффект определяется поведением средней величины и дисперсии вероятности возвратов в зависимости от параметра распределения (рис. 2). Время $T_{rec}(\varepsilon)$ будет минимальным при $\varepsilon = \langle f \rangle$. Три метода оценки $T_{rec}(\varepsilon)$ хорошо согласуются, когда начальная величина $f(t_0)$ находится внутри области флуктуаций $f(t)$, ограниченной сверху величиной κ_+ , равной 0.659 для рассмотренных случаев. Поправка расширяет область применимости приближения 1 для величин $f(t_0)$ за пределами области флуктуаций. Тем не менее, при $\varepsilon \rightarrow 1$ период циклов Пуанкаре становится очень большим и требуются точные расчеты времени возвращения. Для случая $\langle n \rangle = 7$ время возвращения увеличивается от 50 фс до 70 пс, т. е. возрастает в 1400 раз.

Теперь кратко обсудим задачу подсчета максимального числа различных состояний, которые изолированная физическая система может пройти за единицу времени. Следовательно, речь идет о максимальной скорости динамической эволюции [31]. В квантовой механике различные состояния хорошо определены: два состояния различимы, если они ортогональны. Для волновых пакетов эта скорость равна $N_T(0)/T$, т. е. средней частоте возвратов с $\varepsilon = 0$. Для анализа обратимся к уравнению (23). Из определения величины $\langle\Delta\omega^2\rangle$ видно, что она остается конечной как при $\bar{n} = 0$, так при $\bar{n} = N$, хотя показывает немонотонное поведение с ростом среднего уровня возбуждения. Таким образом, время возвращения $T_{rec}(0)$ экспоненциально зависит от отношения $\langle f \rangle^2/2\langle\Delta f^2\rangle$. Конечно, эта экспоненци-

альная зависимость оказывает существенное влияние на величины времени возвращения (рис. 3). Однако ситуация в корне меняется, когда квантовая система возбуждается близко к порогу диссоциации ($\bar{n} \rightarrow N$). Теперь время возвращения становится исключительно большим или даже расходится в пределе $\bar{n} = N$. Тем не менее, имеется возможность радикально уменьшить такие астрономические времена возвращения, если выбрать исходную вероятность возвратов примерно равной ее среднему значению. Время возвращения уменьшается от величин порядка 10^{39} фс при $\bar{n} = 7.946$ и $\varepsilon = 0$ до величины 100 фс при $\bar{n} = 7.946$ и $\varepsilon = 0.9$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Чтобы подвести итог, кратко суммируем результаты, полученные в этой статье. Мы исследовали эффект возрождения волновых пакетов, которые формируются из произвольного числа связанных состояний. Получено точное выражение для времени возвращения в квантовой динамике волновых пакетов. Это среднее время, которое требуется вероятности возвратов, чтобы вернуться к первоначальной величине. Оно выражается через повторный интеграл от произведения функций Бесселя нулевого порядка. Если число связанных состояний не слишком велико, то уравнения (13) и (18) позволяют численно рассчитать времена возвращения точно без всяких приближений. С другой стороны, развитый метод дает возможность найти точное аналитическое выражение для времени возвращения, которое для двухуровневой системы имеет особенно простой вид. В пределе больших N также удалось вывести аналитическое выражение для средней частоты возвращений, которая пропорциональна распределению Гаусса и зависит от средней величины и дисперсии вероятности возвратов. Масштабный коэффициент $\pi/\sqrt{\langle \Delta\omega^2 \rangle}$ необходим, чтобы правильно воспроизвести времена возвращения для величин вероятности возвратов внутри области флуктуаций. Первая не исчезающая поправка к уравнению (23) улучшает оценку времени возвращения для величин вероятности возвратов за пределами области флуктуаций. Тем не менее, если в начальный момент времени вероятность возвратов близка к единице, то период циклов Пуанкаре становится очень большим. Рассчитав среднюю частоту возвращений $1/T_{rec}(0)$, мы вычислили максимальную скорость динамической эволюции. Это полезная величина в квантовых вычислениях, где роль меры расстояния между со-

стояниями играет функция $f(t)$ [32]. В случае $\varepsilon = 0$ времена возвращений весьма чувствительны к среднему уровню возбуждения системы, различаясь на многие порядки величины, когда система возбуждается близко к пределу диссоциации. Развитый метод использует биномиальное распределение для весовых коэффициентов. Это хорошая идея, которая дает возможность выразить все величины, от которых зависит время возвращения, в виде функциональной зависимости от среднего уровня возбуждения системы. В случае теплового распределения времена возвращений могут быть темой обсуждения только в пределе высоких температур и при не слишком большом числе связанных состояний.

Времена возвращений имеют иерархическую структуру в зависимости от начальных условий и среднего уровня возбуждения системы. Мы показали, что масштабы иерархии, изменяющиеся от фемтосекунд до астрономических времен, можно успешно рассмотреть в рамках одной теории. В развитой теории времена возвращений зависят от начальных условий, тогда как времена возрождений [11–18] не зависят от начальных условий и определяются только дискретным спектром собственных значений. Например, в первом случае можно выбрать начальную вероятность возвратов, равную ее средней величине, с той целью, чтобы эти времена стали доступны для измерений. Во втором случае выбор такой возможности отсутствует, и время возрождения может оказаться как маленьким, так и очень большим. Подводя итог, специально подчеркнем, что благодаря общности нашего подхода, этим методом можно оценивать времена возвращений в квантовой динамике волновых пакетов, локализованных в одномерном потенциале. С другой стороны, времена возвращений могут стать хорошим средством исследования временной эволюции волновых пакетов, сформированных из колебательных состояний многоатомных молекул в условиях слабой межмодовой связи.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Chandrasekhar, Rev. Mod. Phys. **15**, 1 (1943).
2. P. C. Hemmer, L. C. Maximon, and H. Wergeland, Phys. Rev. **111**, 689 (1958).
3. P. Bocchieri and A. Loinger, Phys. Rev. **107**, 337 (1957).
4. A. Peres, Phys. Rev. Lett. **49**, 1118 (1982).

5. T. Hogg and B. A. Huberman, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 711 (1982).
6. I. Sh. Averbukh and N. F. Perelman, *Phys. Lett. A* **139**, 449 (1989).
7. И. Ш. Авербух, Н. Ф. Перельман, *ЖЭТФ* **96**, 818 (1989).
8. A. Peres, *Phys. Rev. A* **30**, 1610 (1984).
9. T. Gorin, T. Prosen, T. H. Seligman, and M. Žnidarič, *Phys. Rep.* **435**, 33 (2006).
10. В. Е. Захаров, А. Б. Шабат, *ЖЭТФ* **61**, 118 (1971).
11. И. Ш. Авербух, Н. Ф. Перельман, *УФН* **161**, 41 (1991).
12. R. W. Robinett, *Phys. Rep.* **392**, 1 (2004).
13. A. Stolow, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A* **356**, 345 (1998).
14. K. Ohmori, *Ann. Rev. Phys. Chem.* **60**, 487 (2009).
15. S. I. Vetchinkin, A. S. Vetchinkin, V. V. Eryomin, and I. M. Umanskii, *Chem. Phys. Lett.* **215**, 11 (1993).
16. V. V. Eryomin, S. I. Vetchinkin, and I. M. Umanskii, *J. Chem. Phys.* **101**, 10730 (1994).
17. C. Leichtle, I. Sh. Averbukh, and W. P. Schleich, *Phys. Rev. A* **54**, 5299 (1996).
18. M. L. Strekalov, *J. Math. Chem.* **54**, 1134 (2016).
19. A. H. Zewail, *Femtochemistry*, World Sci., Singapore (1994).
20. G. Albert and P. Zoller, *Phys. Rep.* **199**, 231 (1991).
21. R. A. L. Smith, J. R. R. Verlet, and H. H. Fielding, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **5**, 3567 (2003).
22. И. И. Рябцев, И. И. Бегерев, Д. Б. Третьяков и др., *УФН* **186**, 206 (2016).
23. K. Leo, J. Shah, and E. O. Gobel, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 201 (1991).
24. H. M. Pastawski, P. R. Levstein, G. Usaj, J. Raya, and J. Hirschinger, *Physica A* **283**, 166 (2000).
25. M. Leibscher and I. Sh. Averbukh, *Phys. Rev. A* **63**, 043407 (2001).
26. M. Кас, *Amer. J. Math.* **65**, 609 (1943).
27. I. Percival, *Adv. Chem. Phys.* **36**, 1 (1977).
28. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 3, Наука, Москва (1967).
29. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматлит, Москва (1963).
30. J. Dufayard, B. Majoumat, and O. Nedelec, *Chem. Phys.* **128**, 537 (1988).
31. N. Margolus and L. B. Levitin, *Physica D* **120**, 188 (1998).
32. M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2000).