

На правах рукописи

Шлеенков Марк Александрович

ОПИСАНИЕ ДИНАМИКИ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ,  
ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ,  
МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ВЛИЯНИЯ

01.04.21 – лазерная физика

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Саратов 2013

Работа выполнена на кафедре общей и теоретической физики физического факультета ФГБОУ ВПО «Самарский государственный университет»

**Научный руководитель:**

Бирюков Александр Александрович,  
кандидат физико-математических наук, профессор

**Официальные оппоненты**

Борняков Виталий Геннадьевич,  
доктор физико-математических наук,  
ведущий научный сотрудник ФГБУ  
«Государственный Научный Центр  
РФ Институт Теоретической и Экс-  
периментальной Физики»

Аветисян Юрий Арташесович  
доктор физико-математических наук,  
ведущий научный сотрудник ФГБУН  
«Институт проблем точной механики  
и управления РАН»

**Ведущая организация:**

ФГБУН «Самарский филиал  
Физического института имени  
П.Н.Лебедева РАН»

Защита состоится 20 декабря 2013 г. в 14:00 на заседании диссертационного совета Д 212.243.05 на базе Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского по адресу: 410012, Саратов, ул. Астраханская, 83, корпус 3, ауд. 34.

С диссертацией можно ознакомиться в Зональной научной библиотеке имени В.А.Артисевич Саратовского государственного университета имени Н.Г. Чернышевского.

Автореферат разослан \_\_\_\_\_ 2013 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета



Дербов В.Л.

## Актуальность исследования

В настоящее время проводятся исследования процессов, протекающих при взаимодействии вещества с лазерным излучением как в режиме непрерывного излучения (порядка мегаватт), так и в режиме генерации сверхмощных ультракоротких импульсов (порядка петаватт). Исследования таких процессов указывают на их нелинейность, которая выражается в высокой вероятности протекания многофотонных и нерезонансных (при несовпадении частоты электромагнитного излучения и частот квантовых переходов) процессов. Результатом протекания таких процессов является экспериментальное наблюдение сложной динамики поведения многоуровневых квантовых систем (атомов, молекул, др.) – многофотонные осцилляции Раби, многофотонное возбуждение, включая фотоионизацию атомов и фотодиссоциацию молекул.

В нелинейной квантовой оптике активно проводятся исследования инфракрасного многофотонного (ИК МФ) возбуждения атомов и молекул (Н.Б. Делоне, Б.А. Зон, В.С. Летохов, И.И. Рябцев, T.R. Gentile, D. Ursrey, S. Zhdanovich и др.).

Возможность возбуждения различных систем в любые квантовые состояния лазерным излучением малой частоты представляет интерес:

- в биофизике и медицинской физике – при контролируемом воздействии на различные органические соединения и биологические объекты (Shaun D. Gittard, Alexander Nguyen, Boris N. Chichkov);
- в области создания квантового компьютера – при использовании управляемых электромагнитными полями квантовых систем (Chen Chang-Yong);
- в квантовой химии – при исследовании протекания химических реакций под действием лазерного излучения (В.А. Коварский);
- в квантовой литографии – при обработке изделий (Wenchao Ge, P.R. Hemmer, M. Suhail Zubairy) и др.

Однако при теоретическом исследовании многофотонных процессов и моделировании поведения облучаемой системы возникает ряд трудностей, которые приводят к использованию различных приближений в описании этих процессов (многоуровневая система моделируется двух- или трехуровневыми системами; приближение вращающейся волны; ограничение низшими порядками теории возмущений).

Указанные трудности направляют на поиск и апробацию новых методов описания различных физических процессов при взаимодействии лазерного излучения и вещества.

Соответственно, представляется перспективным метод интегрирования по траекториям, который доказал свою эффективность при решении различных задач (квантование калибровочных полей, расчеты на решетках и др.).

Таким образом, актуальным является разработка метода описания динамики квантовых систем, взаимодействующих с лазерным излучением, при использовании формализма функционального интегрирования.

**Целью диссертационной работы** является исследование нелинейных эффектов и явлений в процессах взаимодействия вещества и излучения методами численного моделирования в рамках подхода интегралов по траекториям и метода функционала влияния.

В соответствии с этой целью были поставлены следующие **задачи**:

1. Получить выражения в рамках формализма функционального интегрирования и метода функционала влияния, описывающие временную эволюцию статистической матрицы плотности и вероятностей квантовых переходов многоуровневой квантовой системы, заданной в координатном представлении, которая взаимодействует с лазерным излучением, рассматриваемым в представлении когерентных состояний.

2. Конкретизировать явный вид функционалов влияния электромагнитных полей различных структур на многоуровневую квантовую систему посредством вычисления интегралов по траекториям электромагнитного поля

в представлении когерентных состояний.

3. Доказать формулу, представляющую вероятности квантовых переходов функциональным интегралом от действительного функционала в координатном представлении, порождаемого функционалом влияния поля электромагнитного излучения.

4. Представить вероятности квантовых переходов как интегралы по траекториям от действительного функционала в пространстве энергетических состояний системы.

5. Разработать алгоритм интегрирования по траекториям в энергетическом представлении для проведения компьютерного моделирования динамики многоуровневых квантовых систем, взаимодействующих с электромагнитным полем, на основе представления вероятностей квантовых переходов функциональным интегралом от действительного функционала, включая векторизацию полученного алгоритма и оптимизацию для реализации параллельных вычислений.

6. Исследовать нелинейную динамику поведения многоуровневых квантовых систем под действием электромагнитного поля, в том числе возбуждение молекул, многофотонные осцилляции Раби в атомах, многофотонный фотоэффект и явление когерентного пленения населенностей вне рамок приближения вращающейся волны.

### **Научная новизна**

1. Проведено вычисление функционалов влияния электромагнитного поля в представлении когерентных состояний для различных структур электромагнитного поля (вакуума, лазерного, теплового).

2. Получена формула в виде функционального интеграла в координатном представлении от действительного функционала, порождаемого функционалом влияния, для вычисления вероятности квантовых переходов многоуровневой системы, взаимодействующей с электромагнитным полем вне рамок теории возмущений и приближения вращающейся волны.

3. Вероятности квантовых переходов представлены как интеграл по траекториям от действительного функционала в энергетическом представлении.

4. Создан алгоритм для нахождения временной зависимости вероятностей квантовых переходов многоуровневой системы, взаимодействующей с лазерным излучением.

5. На основе разработанного алгоритма описан ряд многофотонных процессов, в том числе возбуждение молекул, многофотонные осцилляции Раби, многофотонный фотоэффект и явление когерентного пленения населенностей вне рамок теории возмущений и приближения вращающейся волны.

### **Методы исследования**

Решение задач, сформулированных в диссертации, проводилось в формализме функционального интегрирования (интегрирование по траекториям) по методу функционала влияния.

Для решения вычислительных задач использовались среда программирования С и суперкомпьютерный центр «Сергей Королев» на базе ФБГОУ ВПО «Самарский государственный аэрокосмический университет им. С.П. Королева» (Научно-исследовательский университет).

**Теоретическая значимость** исследования состоит в том, что создан оригинальный теоретический метод описания динамики многоуровневых квантовых систем, взаимодействующих с лазерным излучением, в рамках фундаментального формализма интегрирования по траекториям.

Данный метод в рамках подхода интегралов по траекториям может быть использован для описания квантовых систем в физике высоких энергий (описание динамики в реальном времени взаимодействующих глюонов и кварков).

**Практическая значимость.** Полученные в диссертации результаты позволяют проводить компьютерное моделирование динамики многоуровневых квантовых систем (атомов, молекул и др.) под действием лазерного излучения. Компьютерное моделирование позволило исследовать различные многофотонные эффекты и квантовые явления при взаимодействии вещества

и излучения при микроскопическом моделировании явления индуцированной прозрачности (когерентном пленении населенностей), при исследовании сложных многофотонных процессов возбуждения молекул.

Полученные в диссертации результаты используются в учебном процессе на физическом факультете ФГБОУ ВПО «Самарский государственный университет» в курсе «Континуальное интегрирование» для студентов бакалавриата по специальности «Физика» и студентов магистратуры по специальности «Теоретическая и математическая физика».

**Достоверность** полученных результатов обеспечивается:

- использованием апробированного формализма интегрирования по траекториям, который применяется в различных областях физики;
- анализом общих физических принципов, лежащих в их основе;
- сравнением расчетных и экспериментальных данных и сопоставлением результатов, полученных различными численными методами;
- совпадением результатов компьютерных расчетов с аналитическими результатами в рамках определенных приближений.

### **Апробация работы**

Основные результаты работы докладывались и обсуждались на 8 международных и 6 всероссийских конференциях, научных школах и семинарах:

International School for Young Scientists on Optics, Laser Physics and Biophysics (Saratov Fall Meeting (SFM)) (Saratov, Russia, 2013); International Symposium on photon echo and coherent spectroscopy PECS (Kazan, 2009; Volgograd, 2011; Mari El Republic, 2013); The XXI International Workshop High Energy Physics and Quantum Field Theory QFTHEP (Saint Petersburg Area, 2013); Сессия-конференция секции ядерной физики отделения физических наук РАН «Физика фундаментальных взаимодействий» (Москва, 2011); Международная конференция «Математическая физика и ее приложения» (Самара, 2010, 2012); XXII Международное совещание и Международная молодежная конферен-

ция «Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния» (Санкт-Петербург, 2012);

Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике (Самара, 2009, 2011, 2012, 2013); Всероссийская заочная научно-практическая конференция «Современные проблемы физики, биофизики и инфокоммуникационных технологий» (Краснодар, 2012, 2013).

Основные результаты исследования опубликованы в 12 печатных работах, включающих 4 статьи в периодических изданиях, входящих в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов ВАК РФ.

Данная работа была поддержана федеральной целевой программой «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы, Министерством образования и науки Российской Федерации в рамках задания № 2.2459.2012, Министерством образования и науки Самарской области в рамках конкурса «Молодой ученый» в 2013 году.

### **Личный вклад**

Обсуждение полученных результатов проводилось автором и научным руководителем. Личный вклад соискателя заключается в том, что:

- найдены функционалы влияния электромагнитного поля;
- разработан алгоритм вычисления вероятностей квантовых переходов многоуровневой квантовой системы под действием лазерного излучения путем проведения усреднения действительного функционала;
- создан алгоритм, позволяющий проводить параллельные вычисления на суперкомпьютерах;
- решены конкретные задачи по описанию динамики многоуровневой квантовой системы, взаимодействующей с лазерным излучением, на основе предложенного непертурбативного метода вне рамок приближения вращающейся волны.



## **На защиту выносятся следующие положения и результаты:**

1. Явный вид функционалов влияния электромагнитных полей разной структуры в случаях вакуумного, чистого когерентного (лазерного) и теплового полей позволяет проводить непertурбативные вычисления вероятностей квантовых переходов квантовой системы под действием лазерного излучения.

2. Вероятности квантовых переходов представляются функциональным интегралом в координатном и энергетическом представлениях от действительных функционалов, порождаемых функционалами влияния электромагнитного излучения.

3. Разработанный алгоритм для проведения компьютерного моделирования динамики многоуровневой квантовой системы, взаимодействующей с лазерным излучением, дает возможность описать многофотонные процессы (возбуждение молекул, осцилляции Раби, фотоэффект) и явление когерентного пленения населенностей вне рамок теории возмущений и приближения вращающейся волны.

## **Структура и объем работы**

Диссертация состоит из введения, 3 глав и заключения. Работа изложена на 155 страницах, содержит 18 рисунков, 1 таблицу и список литературы из 203 наименований.

## **Основное содержание работы**

Во **Введении** обозначен предмет исследования, дан краткий анализ современного состояния проблемы, обосновывается актуальность темы диссертации, формулируются цель и задачи исследования, основные положения, выносимые на защиту; охарактеризованы новизна полученных результатов, теоретическая и практическая ценность работы; приводятся сведения о методах исследования, об апробации работы, о структуре диссертации и публикациях по теме, а также определяется личный вклад автора.

**В первой главе** «Экспериментальные и теоретические исследования нелинейных процессов в квантовой оптике» анализируется современное состояние

экспериментальных и теоретических методов исследований взаимодействия вещества и излучения, проводится их сравнение, анализируются их преимущества и недостатки. Излагаются основы формализма функционального интегрирования и метода функционала влияния, рассматривается применение данных методов в квантовой оптике. Обосновывается необходимость поиска новых методов и подходов к изучению нелинейных, многофотонных процессов в рамках взаимодействия многоуровневых квантовых систем и квантованных электромагнитных полей, выхода за рамки существующих приближенных методов в квантовой оптике.

Во **второй главе** диссертации «Метод функционала влияния и его применение в квантовой оптике для описания многофотонных процессов» описывается эволюция исследуемой многоуровневой квантовой системы, взаимодействующей с электромагнитным полем, в рамках метода функционала влияния в формализме функционального интегрирования.

В **разделе 2.1** «Метод функционала влияния в формализме интегрирования по траекториям» в формализме функционального интегрирования вероятности квантовых переходов представляются усреднением функционала влияния электромагнитного поля

$$\begin{aligned}
P(m, t|n, 0) = & \int (\mathfrak{D}p(\tau)\mathfrak{D}x(\tau))dx_f dx_{in} (\mathfrak{D}p'(\tau)\mathfrak{D}x'(\tau))dx'_f dx'_{in} \times \\
& \times \phi_m^*(x_f)\phi_m(x'_f) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(S_{syst}[p(\tau), x(\tau)] - S_{syst}[p'(\tau), x'(\tau)])\right] \times \\
& \times F_k[x(\tau), x'(\tau)]\phi_n(x_{in})\phi_n^*(x'_{in}), \tag{1}
\end{aligned}$$

где  $F_k[x(\tau), x'(\tau)]$  – функционал влияния моды  $k$  электромагнитного поля.

$$\begin{aligned}
F_k[x(\tau), x'(\tau)] = & \int d\mu(\alpha'_{in})d\mu(\alpha_{in})d\mu(\alpha_f)U_{eff}(\alpha_f^*, \alpha_{in}; [x(\tau)]; t) \times \\
& \times \rho_{0,field}(\alpha_{in}^*, \alpha'_{in})U_{eff}^*(\alpha_{in}^*, \alpha_f; [x'(\tau)]; t), \tag{2}
\end{aligned}$$

$U_{eff}(\alpha_f^*, \alpha_{in}; [x(\tau)]; t)$  – функция Грина электромагнитного поля, взаимодействующего с исследуемой квантовой системой.

**Раздел 2.2** «Функции Грина квантованного электромагнитного поля, взаимодействующего с квантовой системой» посвящен вычислению функции Грина  $U_{eff}(\alpha_f^*, \alpha_{in}; [x(\tau)]; t)$ , описывающей эволюцию электромагнитного поля, взаимодействующего с квантовой системой путем явного проведения интегрирования по траекториям в пространстве когерентных состояний.

В **разделе 2.3** «Функционалы влияния полей электромагнитного излучения различной структуры», используя явный вид функции Грина  $U_{eff}(\alpha_f^*, \alpha_{in}; [x(\tau)]; t)$ , проводятся вычисления явного вида функционалов влияния (2) при различных начальных и конечных состояниях электромагнитного поля: состоянии вакуума; чистого когерентного состояния; смешанного состояния. Получены выражения функционалов влияния одной моды электромагнитного излучения для ряда структур поля:

- начальное и конечное состояния электромагнитного поля представлены вакуумом:

$$F_k^{vac \rightarrow vac}[x'(\tau), x(\tau)] = \exp\left[-\int_0^t \int_0^\tau \beta_k^*(\tau - \tau') x'(\tau) x'(\tau') d\tau d\tau' - \int_0^t \int_0^\tau \beta_k(\tau - \tau') x(\tau) x(\tau') d\tau d\tau'\right]; \quad (3)$$

- начальное состояние электромагнитного поля задано вакуумом, а конечное состояние не задано, оно может быть неопределенным:

$$F_k^{vac \rightarrow all}[x'(\tau), x(\tau)] = \exp\left[-\int_0^t \int_0^\tau \beta_k^*(\tau - \tau') x'(\tau) x'(\tau') d\tau d\tau' - \int_0^t \int_0^\tau \beta_k(\tau - \tau') x(\tau) x(\tau') d\tau d\tau' + \int_0^t \int_0^\tau \beta_k(\tau - \tau') x(\tau) x'(\tau') d\tau d\tau'\right]; \quad (4)$$

- электромагнитное поле в начальный момент времени  $t = 0$  задано в чистом когерентном состоянии  $|\alpha\rangle$ , а конечное состояние не определено

$$F_k^{\alpha \rightarrow all}[x'(\tau), x(\tau)] = F_k^{vac \rightarrow all}[x'(\tau), x(\tau)] \times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar \Omega_k \langle n \rangle_k}{2\epsilon_0 V}} q(x(\tau) - x'(\tau)) \cos(\Omega_k \tau - \phi_k)\right], \quad (5)$$

где функции  $\beta_k(\tau - \tau') = \frac{q^2}{\hbar^2} \frac{\hbar \Omega_k}{2\epsilon_0 V} e^{i\Omega_k(\tau - \tau')}$ ;  $q$  – заряд частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем;  $\Omega_k$  – частота электромагнитного излучения моды  $k$ ;  $V$  – объем резонатора.

На основании полученных выражений явного вида функционалов влияния сделан вывод, что они имеют структуру

$$F_k[x(\tau), x'(\tau)] = \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_R^{inf}[x(\tau), x'(\tau)]\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar} S_I^{inf}[x(\tau), x'(\tau)]\right], \quad (6)$$

где

$$S_R^{inf}[x(\tau), x'(\tau)] = \int_0^t f_R(x(\tau), x'(\tau), \tau) d\tau,$$

$$S_I^{inf}[x, x'] = \int_0^t f_I(x(\tau), x'(\tau), \tau) d\tau$$

– действительные функционалы вдоль траекторий, которые определяются для конкретных структур электромагнитного поля, его начальных условий и специфики взаимодействия с квантовой системой.

В разделе 2.4 «Аналитические исследования квантовых систем методом функционала влияния» на основании явного вида функционалов влияния доказываем непротиворечивость метода функционала влияния и метода теории возмущений. Делается вывод, что функционал влияния электромагнитного поля содержит в себе вклады всех порядков теории возмущений. Проводится описание спонтанных переходов под действием вакуума электро-

магнитного поля, однофотонных осцилляций Раби, двухфотонного фотоэффекта.

В разделе 2.5 «Вероятности квантовых переходов как интегралы по траекториям от действительного функционала» доказана формула, представляющая вероятности квантовых переходов в виде интегралов по траекториям от действительного функционала, порождаемого функционалом влияния поля электромагнитного излучения:

$$\begin{aligned}
 P(m, t; n, 0) = & \int \mathcal{D}p'(\tau) \mathcal{D}x'(\tau) \mathcal{D}p(\tau) \mathcal{D}x(\tau) dx_{in} dx'_{in} dx_f dx'_f \times \\
 & \times \phi_m^*(x_f) \phi_m(x'_f) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_R^{inf}[x, x']\right] \times \\
 & \times \cos\left[\frac{1}{\hbar} (S_{syst}[p(\tau), x(\tau)] - S_{syst}[p'(\tau), x'(\tau)] + S_I^{inf}[x, x'])\right] \phi_n^*(x'_{in}) \phi_n(x_{in}), \quad (7)
 \end{aligned}$$

где функционалы  $S_R^{inf}[x, x']$  и  $S_I^{inf}[x, x']$  являются действительными и конкретизируются, исходя из явного вида функционала влияния поля электромагнитного излучения со структурой, соответствующей исследуемой модели.

Интеграл по траекториям (7) при компьютерном моделировании динамики поведения вероятностей квантовых переходов многоуровневых систем, взаимодействующих с электромагнитным излучением, обладает преимуществом по сравнению с фейнмановскими функциональными интегралами (1) с «комплексной мерой». Оно заключается в интегрировании вещественного функционала, что возможно выполнить численно при использовании современных вычислительных технологий.

В третьей главе «Описание динамики квантовых систем в поле лазерного излучения путем функционального интегрирования действительных функционалов, порождаемых функционалами влияния» получены выражения, позволяющие разработать алгоритм компьютерного моделирования поведения исследуемой системы, взаимодействующей с лазерным излучением; проводятся исследования многофотонных возбуждений атомов и молекул.

В разделе 3.1 «Функционалы влияния поля лазерного излучения» конкретизируется функционал влияния лазерного излучения для высоких энергий пучка, при которых возможно пренебрежение влиянием вакуума электромагнитного поля на исследуемую систему. В этих случаях формула для вероятностей квантовых переходов многоуровневой системы под действием поля лазерного излучения имеет вид

$$P(m, t; n, 0) = \int \mathcal{D}p'(\tau) \mathcal{D}x'(\tau) \mathcal{D}p(\tau) \mathcal{D}x(\tau) dx_{in} dx'_{in} dx_f dx'_f \phi_m^*(x_f) \phi_m(x'_f) \times \\ \times \cos\left[\frac{1}{\hbar}(S_{eff}[p(\tau), x(\tau)] - S_{eff}[p'(\tau), x'(\tau)])\right] \phi_n^*(x'_{in}) \phi_n(x_{in}), \quad (8)$$

где

$$S_{eff}[p(\tau), x(\tau)] = \int_0^t [p(\tau)\dot{x}(\tau) - \mathcal{H}_{syst}(p(\tau), x(\tau)) - \mathcal{V}_{inf}(x(\tau))] d\tau,$$

$\mathcal{H}_{syst}(p(\tau), x(\tau))$  – функция Гамильтониана невзаимодействующей исследуемой квантовой системы,  $\mathcal{V}_{inf}(x(\tau))$  – потенциал взаимодействия, который конкретизируется явным видом функционала влияния лазерного излучения.

В разделе 3.2 «Вычисление квантовых переходов системы в поле лазерного излучения методом функционального интегрирования в энергетическом представлении» интеграл по траекториям (8) для удобства проведения расчетов на компьютере записывается в энергетическом представлении в дискретном пространстве энергетических состояний исследуемой многоуровневой квантовой системы, взаимодействующей с лазерным излучением.

$$P(n_f, t_f | n_{in}, t_{in}) = \sum_{n_1, \dots, n_K=1}^N \sum_{m_1, \dots, m_K=1}^N \int_0^1 \dots \int_0^1 \times \\ \times \cos[S[n_f, n_K, \xi_K; \dots; n_k, n_{k-1}, \xi_{k-1}; \dots; n_1, n_{in}, \xi_0] -$$

$$-S[n_f, m_K, \zeta_K; \dots; m_k, m_{k-1}, \zeta_{k-1}; \dots; m_1, n_{in}, \zeta_0] d\xi_0 \dots d\xi_K d\zeta_0 \dots d\zeta_K, \quad (9)$$

где действие

$$S[n_f, n_K, \xi_K; \dots; n_k, \xi_k; \dots; n_1, \xi_1, n_0, \xi_0] = \sum_{k=1}^{K+1} S[n_k, n_{k-1}, \xi_{k-1}]$$

с условиями  $t_{K+1} = t_f$ ,  $n_{K+1} = n_f$ ,  $t_0 = t_{in}$ ,  $n_0 = n_{in}$  и

$$\begin{aligned} S[n_k, t_k; n_{k-1}, t_{k-1}; \xi_{k-1}] &= 2\pi(n_k - n_{k-1})\xi_{k-1} + \Omega_{n_k, n_{k-1}}^R \times \\ &\times (\cos(2\pi(n_k - n_{k-1})\xi_{k-1} + (\Omega + \omega_{n_k, n_{k-1}}) \frac{t_k + t_{k-1}}{2}) + \\ &+ \cos(2\pi(n_k - n_{k-1})\xi_{k-1} - (\Omega - \omega_{n_k, n_{k-1}}) \frac{t_k + t_{k-1}}{2})) (t_k - t_{k-1}), \end{aligned} \quad (10)$$

$n_f, n_{in}$  соответствуют квантовым состояниям с энергиями  $E_{n_f}$  и  $E_{n_{in}}$  в моменты времени  $t_f$  и  $t_{in}$  соответственно.

Интеграл по траекториям (9) с учетом явного вида действия (10) позволяет проводить непертурбативные исследования динамики атомов и молекул, взаимодействующих с лазерным излучением, как в приближении вращающейся волны, так и за его пределами. Формула справедлива для любых интенсивностей излучения и длительностей импульсов.

На основе формулы (9) для проведения компьютерного моделирования разработан алгоритм, реализованный в среде программирования С, с использованием современных технологий параллельных вычислений для использования суперкомпьютера.

**В разделе 3.3** «Исследования многофотонных процессов, индуцированных лазерным излучением, в многоуровневых системах методом функционального интегрирования» представлены результаты компьютерного моделирования динамики модели электрона в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, взаимодействующего с лазерным излучением. Объясняются осцилляции Раби (однофотонные и двухфотонные) и нерезонансные

квантовые переходы. В рамках численного моделирования также объясняются интерференционные явления в квантовой оптике, такие как когерентное пленение населенностей в трехуровневой квантовой системе.

В разделе 3.4 «Описание двухфотонных осцилляций Раби в ридберговских атомах кальция» объясняются двухфотонные осцилляции Раби атомов кальция в ридберговских состояниях, взаимодействующих с электромагнитным излучением, вне рамок приближения вращающейся волны. Представлены результаты численного моделирования двухфотонных осцилляций Раби в атомах кальция между ридберговскими состояниями  $52p$  и  $51p$  через уровень  $51d$ . Получено полное соответствие результатов расчетов с экспериментальными данными, и сделаны прогнозы для проведения экспериментов при более высоких интенсивностях излучения.

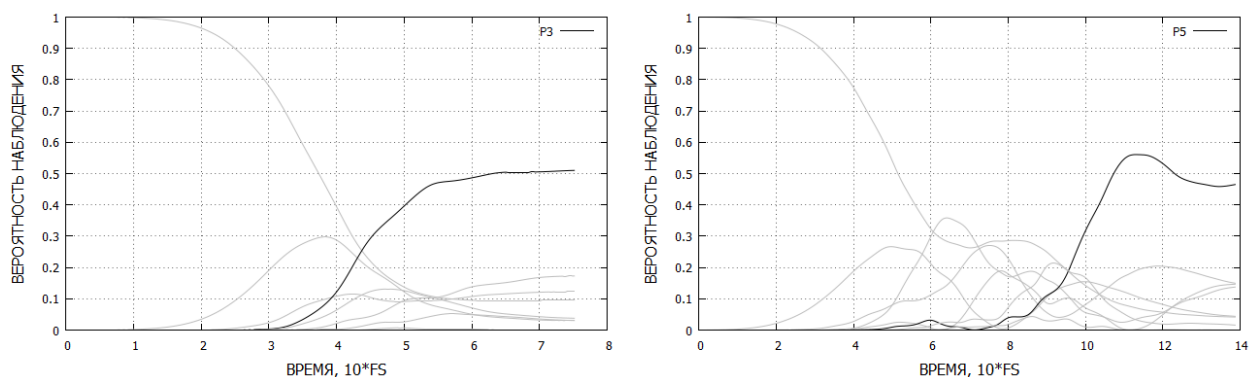


Рис. 1: Вероятность наблюдения квантовой системы в различных уровнях под действием лазерного импульса (слева) с дисперсией  $\sigma^2 = 14.5 fs$  и пиком в момент времени  $t_0 = 38 fs$  (справа) с дисперсией  $\sigma^2 = 30.5 fs$  и пиком в момент времени  $t_0 = 70 fs$

В разделе 3.5 «Многофотонная колебательная динамика молекулы HF в поле лазерного импульса» в рамках разработанного метода проводится компьютерное моделирование колебательной динамики молекулы HF (фтористый водород), взаимодействующей с лазерными импульсами различной пиковой интенсивности и длительности. Найдены конкретные параметры лазерного импульса (интенсивность и длительность), при которых наблюдается селективное возбуждение молекулы HF из основного состояния в начальный момент времени в возбужденные состояния (третий уровень на рис. 1 (слева) и пятый уровень на рис. 1 (справа)) в конечный момент времени.



В разделе 3.6 «Многофотонная вращательная динамика молекулы  $N_2$  под действием группы лазерных импульсов» на основе разработанного метода проводится компьютерное моделирование вращательной динамики молекулы  $N_2$ , взаимодействующей с группой лазерных импульсов. Результаты численного моделирования описывают зависимость вероятностей возбуждения вращательных состояний молекулы  $N_2$  от периода импульсов в рассматриваемых последовательностях, что объясняет экспериментальные данные (S. Zhdanovich, C. Bloomquist, J. Floss и др., 2012).

На основании полученных результатов делается вывод о том, что в рамках разработанного метода могут быть проведены исследования любых молекул, позволяющие определить параметры лазерного излучения, при которых наблюдается селективное возбуждение исследуемых молекул в различные квантовые состояния.

В **Заключении** приводятся основные результаты и выводы диссертации.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ

1. Получены уравнения в рамках метода функционала влияния в формализме функционального интегрирования, позволяющие описать динамику квантовой системы, взаимодействующей с лазерным излучением.

2. Вычислен явный вид функционалов влияния электромагнитных полей различной структуры. Выражение для функционалов влияния зависит от структуры поля электромагнитного излучения.

3. Полученная формула для вероятностей квантовых переходов, представленная функциональным интегралом от действительного функционала в координатном представлении, может быть использована для непертурбативного описания временной динамики квантовых систем, взаимодействующих с лазерным излучением.

4. Представление вероятности квантовых переходов в виде интеграла по траекториям от действительного функционала в пространстве энергетиче-

ских состояний системы позволяет описывать процессы вне рамок приближения вращающейся волны.

5. Алгоритм вычисления вероятностей квантовых переходов, разработанный на основе формулы вероятности в энергетическом представлении, позволяет реализовать параллельные вычисления на суперкомпьютере.

6. Применение разработанного алгоритма к конкретным задачам исследования динамики поведения многоуровневых квантовых систем под действием лазерного излучения позволило получить следующие результаты:

- возбуждение молекул – получены параметры лазерного импульса (интенсивность и длительность), при которых наблюдается многофотонное возбуждение молекул ( $HF$ ,  $N_2$ );
- многофотонные осцилляции Раби – объяснена динамика (зависимость вероятностей наблюдения атомов в определенных энергетических состояниях от времени) атомов кальция в ридберговских состояниях, взаимодействующих с электромагнитным излучением;
- многофотонный фотоэффект – объясняется зависимость силы фототока, обусловленного двухфотонным фотоэффектом, от интенсивности падающего лазерного излучения;
- явление когерентного пленения населенностей – объяснено существование данного явления в трехуровневых квантовых системах как в приближении вращающейся волны, так и за его пределами.

Проведенное исследование позволило разработать непертурбативный метод описания поведения атомов и молекул, взаимодействующих с лазерным излучением, вне рамок приближения вращающейся волны.

## ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ:

*Статьи в периодических изданиях, включенных в список ВАК РФ*

- [1] Шлеенков, М.А. Функциональный метод описания квантовых систем, взаимодействующих с электромагнитным полем / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. – 2013. – Т.15. – № 4. – С. 140–144.
- [2] Шлеенков, М.А. Описание динамики квантовых систем, взаимодействующих с лазерным излучением, методом функционала влияния / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. физ.-мат. науки. – 2013. – № 2 (31). – С. 185–192.
- [3] Шлеенков, М.А. Описание динамики наносистем методом функционала влияния / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2012. – № 3(1). – С. 42–50.
- [4] Шлеенков, М.А. Описание динамики многоуровневых квантовых систем в сильных лазерных полях методом функционала влияния / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. – 2012. – Т. 14. – № 4. – С. 236–242.

*Статьи в сборниках трудов научных конференций и других изданиях*

- [5] Шлеенков, М.А. Вычисление вероятностей переходов квантовой системы путем интегрирования вещественных функционалов / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Теоретическая физика. – 2012. – № 13. – С. 9–43.
- [6] Шлеенков, М.А. Описание двухфотонных осцилляций Раби в формализме интегрирования по траекториям / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Теоретическая физика. – 2012. – № 13. – С. 44–56.
- [7] Шлеенков, М.А. Функционалы влияния квантового электромагнитного поля / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Теоретическая физика. – 2011. – № 12. – С. 28–49.

- [8] Шлеенков, М.А. Описание динамики многоуровневых квантовых систем в электромагнитных полях методом функционала влияния / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Материалы всероссийской заочной научно-практической конференции «Современные проблемы физики, биофизики и инфокоммуникационных технологий». – Краснодар: ЦНТИ, 2012. – С. 188–201.
- [9] Шлеенков, М.А. Квантовые переходы многоуровневой системы, взаимодействующей с электромагнитным полем, в представлении функционального интегрирования / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Сб. тр. VII Всероссийского молодежного Самарского конкурса-конференции научных работ по оптике и лазерной физике. – Самара, 2012. – С. 125–132.
- [10] Шлеенков, М.А. Описание динамики квантовых систем, взаимодействующих с лазерным излучением, методом функционала влияния / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Материалы III международной конференции «Математическая физика и ее приложения». – Самара: СамГТУ, 2012. – С. 65.
- [11] Шлеенков, М.А. Расчет вероятности квантовых переходов УХН в гравитационной ловушке под действием электромагнитного излучения методом функционала влияния / А.А. Бирюков, В.Ф. Ежов, М.А. Шлеенков // Сб. тр. XXII Международного совещания и Международной молодежной конференции «Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния». – СПб., 2012. – С. 196.
- [12] Шлеенков, М.А. Описание эволюции квантовой системы методом функционала влияния / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Материалы II международной конференции «Математическая физика и ее приложения». – Самара: Изд-во «Книга», 2010. – С. 56.