

1.3. Описание квантовых ансамблей и процессов релаксации

Для реализации принципа квантового усиления электромагнитных волн используются переходы между уровнями в квантовых системах, то есть в макросистемах, состоящих из большого числа микросистем. Как известно, квантовые микросистемы описываются на языке квантовой механики, а их совокупность – на основе подходов статистической физики. Существует такое понятие, как *чистый ансамбль* – ансамбль тождественных изолированных микросистем, который описывается единственной волновой функцией. В так называемом *смешанном ансамбле* содержится совокупность нескольких чистых ансамблей, каждый из которых описывался своей волновой функцией до образования смешанного ансамбля из чистых. Смешанный ансамбль описывается *матрицей плотности* ρ , физический смысл элементов которой следующий.

1. Диагональные элементы описывают распределение микросистем по энергетическим

уровням:

$$\rho_{kk} = \frac{N_k}{\sum_k N_k},$$

где N_k - число микросистем, находящихся в k -м состоянии (на k -м энергетическом уровне), а сумма определяет общее количество микросистем в ансамбле. Важное свойство ρ :

Матрица

Недиагональные элементы ρ_{kn} ($k \neq n$) характеризуют связь между k -м и n -м (переходы), и отличны от нуля в состоянии релаксации.

В стационарном состоянии $\rho_{kn} = 0$

Зная ρ , можно найти среднее по ансамблю значение физической величины F :

$$\langle F \rangle = \sum_{n,k} F_{nk} \rho_{kn} = \sum_n (F \cdot \rho)_n = S_p (F \cdot \rho)$$

Уравнение движения для матрицы плотности смешанного ансамбля,

характеризующее временные изменения матрицы плотности, имеет вид:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\rho, H]$$

где $[\rho, H] = \rho \cdot H - H \cdot \rho$ - коммутатор оператора ρ с гамильтонианом H .

В стационарном состоянии матрица плотности ρ не зависит от времени и коммутирует с H . Это означает, что в энергетическом представлении H и ρ

описываются диагональными матрицами:

$$H_{kn} = E_n \delta_{kn}, \rho_{kn} = f(E_n) \delta_{kn}.$$

1.3.1. Термостатированный ансамбль. Безизлучательные переходы

Рассмотрим систему частиц, находящихся при температуре T_0 . Пример: кристалл рубина, представляющий собой кристаллическую матрицу Al_2O_3 (корунд), в котором небольшая часть ионов Al ($\sim 3 \cdot 10^{-4}$) замещена ионами Cr^{3+} ($\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$). Весь объем кристалла можно разбить на части, в каждой из которых находится один ион Cr^{3+} . Окружающая его решетка играет роль термостата, поддерживающего температуру T_0 , и такая система частиц (в данном случае ионов Cr^{3+}) называется ***термостатированным ансамблем***.

Если такую систему вывести из состояния равновесия, то распределение частиц по уровням будет отличаться от больцмановского. Однако после прекращения воздействия она будет стремиться к прежнему равновесному состоянию, определяемому температурой термостата T_0 . Такой переход системы частиц из неравновесного состояния в равновесное называется ***релаксацией***.

При релаксации система частиц обменивается энергией с термостатом. Этот процесс будем характеризовать вероятностью Γ_{mn} перехода одной частицы в единицу времени с уровня m на уровень n под действием термостата. При таких переходах не происходит излучения или поглощения электромагнитного поля, поэтому их называют *безызлучательными*, или *тепловыми*. Однако ясно, что на самом деле, когда речь идет о твердом теле, при безызлучательных переходах поглощаются или излучаются фононы.

1.3.2. Описание релаксации

Если термостатированный ансамбль вывести из состояния равновесия, то он с течением времени будет переходить в другое равновесное состояние. Однако уравнение движения для смешанного ансамбля не может быть использовано для описания процессов релаксации. Перепишем его в виде

$$\dot{\rho}_{kn} = \frac{i}{\hbar} [\rho, H]_{kn} = \frac{i}{\hbar} \sum_m (\rho_{km} H_{mn} - H_{km} \rho_{mn}).$$

Для ρ_{kn} в энергетическом представлении

имеем:

$$H_{mn} = 0, m \neq n; H_{km} = 0, k \neq m;$$

$$H_{mn} = E_n, m = n; H_{km} = E_k, k = m;$$

$$\dot{\rho}_{kn} = \frac{i}{\hbar} (\rho_{kn} E_n - E_k \rho_{kn}) = \frac{i}{\hbar} \rho_{kn} (E_n - E_k) = -\frac{i}{\hbar} (E_k - E_n) \rho_{kn}.$$

Обозначая $(E_k - E_n)/\hbar = \omega_{kn}$, получаем:

$$\dot{\rho}_{kn} + i\omega_{kn} \rho_{kn} = 0.$$

Запишем это уравнение отдельно для диагональных и недиагональных

элементов: $\rho_{nn} = 0, \rho_{nn} = const,$

$$\rho_{kn} + i\omega_{kn}\rho_{kn} = 0, \rho_{kn} = C_{kn} \exp(-i\omega_{kn}t).$$

Из этого решения следует, что модуль $|\rho_{kn}| = C_{kn} = const$ и от времени не зависит.

Однако эксперимент показывает, что при приближении системы к состоянию равновесия недиагональные элементы матрицы плотности стремятся к нулю. Это связано с тем, **в действительности рассматриваемые нами микросистемы взаимодействуют с термостатом.**

Учтем действие термостата феноменологически. Опыт показывает, ρ_{kn} стремится к нулю по экспоненциальному закону. Это можно учесть добавкой ρ_{kn} в лагранжиан уравнение для недиагональных элементов:

$$\rho_{kn} + \frac{\rho_{kn}}{\tau_{kn}} + i\omega_{kn}\rho_{kn} = 0,$$

где τ_{kn} - время релаксации, определяемое из эксперимента. ρ_{kn} данного уравнения

следующее решение $\rho_{kn}(t) = C_{kn} \exp(-t/\tau_{kn}) \exp(-i\omega_{kn}t),$

причем $|\rho_{kn}| = |C_{kn}| \exp(-t/\tau_{kn}).$ За время τ_{kn} элементы матрицы плотности по модулю уменьшаются в e раз. Числа τ_{kn} образуют квадратную матрицу, ввиду самосопряженности матрицы ρ являющуюся симметричной:

$$\tau_{kn} = \tau_{nk}.$$

Обратимся теперь к уравнению для диагональных элементов. Примем, что действие термостата состоит в индуцировании переходов между различными состояниями системы. Пусть Γ_{kn} - вероятность перехода под действием термостата для одной частицы в единицу времени с уровня k , характеризуемого энергией E_k , на уровень с энергией E_n (рис. 1.3.1). У нас ρ_{kk} - относительное число частиц на k -м уровне.

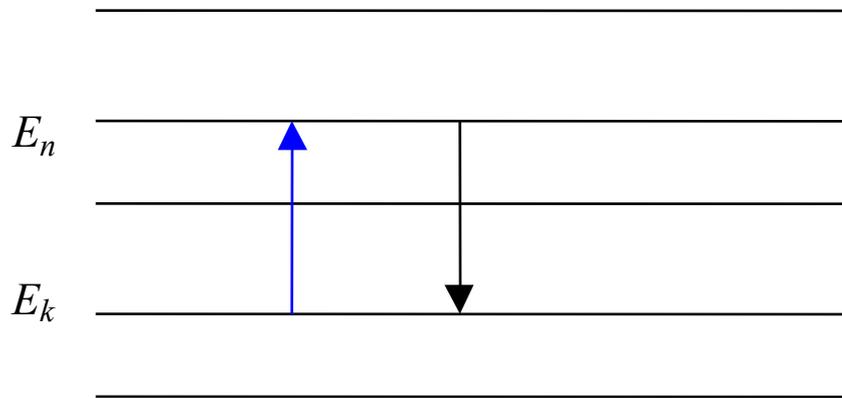


Рис.1.3.1. Переходы между уровнями, индуцируемые термостатом

Относительное число частиц, перешедшее с уровня k на уровень n , будет равно $\Gamma_{kn}\rho_{kk}$. Общее относительное число частиц, перешедшее в единицу времени с уровня k на все n -е уровни, будет равно $\sum_n \Gamma_{kn}\rho_{kk}$.

Найдем также число частиц, приходящих на k -й уровень: $\sum_n \Gamma_{nk}\rho_{nn}$. В

результате для скорости изменения числа частиц на уровне k получаем уравнение:

$$\dot{\rho}_{kk} = \sum_{n \neq k} (\Gamma_{nk}\rho_{nn} - \Gamma_{kn}\rho_{kk}). \quad (1.3.10)$$

Это уравнение и обобщает исходное соотношение,

$$\dot{\rho}_{kn} = \frac{i}{\hbar} \left[\rho, H \right]_{kn} = \frac{i}{\hbar} \sum_m (\rho_{km}H_{mn} - H_{km}\rho_{mn}),$$

на случай системы, взаимодействующей с термостатом, для диагональных элементов матрицы плотности.

В частном случае термодинамического равновесия $\rho = \rho^e$ и не зависит от времени. Поэтому сумма в правой части равна нулю. **Обычно постулируется, что в этой сумме равно нулю каждое слагаемое:**

$$\Gamma_{nk} \rho_{nn}^e = \Gamma_{kn} \rho_{kk}^e.$$

Это равенство выражает **принцип детального равновесия** и ограничивает возможные значения Γ_{nk} . При учете только тепловых переходов ρ_{nn}^e и ρ_{kk}^e могут быть найдены из закона Больцмана:

$$\Gamma_{nk} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) = \Gamma_{kn} \exp\left(-\frac{E_k}{kT}\right),$$

$$\Gamma_{nk} = \Gamma_{kn} \exp\left(\frac{E_n - E_k}{kT}\right).$$

Таким образом, вероятность тепловых (или безызлучательных) переходов сверху вниз всегда больше, чем для переходов снизу вверх.

1.3.3. Общие уравнения для матрицы плотности

В общем случае квантовая система находится во взаимодействии с внешним полем, и ее гамильтониан может быть представлен в виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

где \hat{H}_0 - гамильтониан невозмущенной системы и \hat{V} - оператор взаимодействия с внешним полем. В результате **общее уравнение движения для матрицы плотности может быть представлено в виде:**

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\rho, \hat{H}_0] + \frac{i}{\hbar} [\rho, \hat{V}] + \text{члены, ответств. за взаимодействие с термостатом.}$$

Распишем это уравнение отдельно для диагональных и недиагональных элементов:

$$\frac{d\rho_{mm}}{dt} = \sum_{n \neq m} (\rho_{nn} \Gamma_{nm} - \rho_{mm} \Gamma_{mn}) + \frac{i}{\hbar} \sum_s (\rho_{ms} V_{sm} - V_{ms} \rho_{sm}),$$

$$\frac{d\rho_{mn}}{dt} + \frac{\rho_{mn}}{\tau_{mn}} + i\omega_{mn} \rho_{mn} = \frac{i}{\hbar} \sum_s (\rho_{ms} V_{sn} - V_{ms} \rho_{sn}),$$

и дополним уравнениями:

$$\Gamma_{nk} \rho_{nn}^e = \Gamma_{kn} \rho_{kk}^e,$$

$$\tau_{nm} = \tau_{mn},$$

$$Sp \rho = 1.$$

Данная система уравнений позволяет анализировать динамику взаимодействия системы частиц с термостатом и внешним полем.

Задача 3_1

Для трехуровневого ансамбля частиц, находящегося в стационарном состоянии, населенности уровней составили $N_1 = 13 \cdot 10^{20} \text{ м}^{-3}$, $N_2 = 5 \cdot 10^{20} \text{ м}^{-3}$ и $N_3 = 7 \cdot 10^{20} \text{ м}^{-3}$.

Найдите все элементы матрицы плотности данного ансамбля.