Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Г. Морозов, Эффекты памяти и неравновесные корреляции в динамике открытых квантовых систем, *ТМФ*, 2018, том 194, номер 1, 127–136

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9394>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.162.127.20

26 апреля 2023 г., 03:28:24

© 2018 г.

В. Г. Морозов*

ЭФФЕКТЫ ПАМЯТИ И НЕРАВНОВЕСНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В ДИНАМИКЕ ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Предложен последовательный подход к динамике открытых квантовых систем в рамках метода неравновесного статистического оператора Зубарева. Данный подход основан на соотношении между средними по ансамблю от операторов Хаббарда и матричными элементами приведенного статистического оператора открытой квантовой системы. Это ключевое соотношение позволяет выводить основные кинетические уравнения для открытых систем, следуя схеме, которая по существу идентична схеме вывода кинетических уравнений для функций распределения. Достоинством предложенного формализма является то, что в нем удастся учесть некоторые важные динамические корреляции между открытой системой и ее окружением. В качестве иллюстрации метода выведено немарковское основное кинетическое уравнение, которое содержит вклад неравновесных корреляций, связанных с сохранением энергии.

Ключевые слова: неравновесная статистическая механика, метод неравновесного статистического оператора, открытые квантовые системы.

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9394>

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия динамика открытых квантовых систем (т. е. систем, взаимодействующих с макроскопическим окружением) [1]–[3] приобрела черты самостоятельного и быстро развивающегося раздела статистической механики. Объясняется это несколькими причинами. Во-первых, имеются многочисленные содержательные приложения теории в квантовой оптике [4], [5] и физике конденсированного состояния [6], [7]. Во-вторых, динамика открытых систем играет важную роль в новой области исследований – квантовой информации [8]. Наконец, динамика открытых квантовых систем тесно связана с фундаментальными вопросами всей статистической механики – эффектами памяти в неравновесных процессах [9] и корреляциями между динамической системой и окружением [10].

*Московский технологический университет, Москва, Россия.
E-mail: vladmorozov45@gmail.com

Важнейшими задачами в теории открытых квантовых систем являются вывод основного кинетического уравнения (master equation) для приведенного статистического оператора открытой системы и вычисление кинетических коэффициентов, которые учитывают влияние макроскопического окружения. Очень простая и компактная схема построения обобщенных кинетических уравнений с помощью метода проектирования была предложена Накаджимой и Цванцигом [11], [12]. До сих пор эта схема и ее более современные модификации [1], [3] наиболее популярны в теории открытых систем, а формально точное интегро-дифференциальное кинетическое уравнение Цванцига [12] широко используется для построения различных приближенных уравнений. Впрочем, отметим, что простота метода проектирования обманчива. Свойства решений уравнения Цванцига мало изучены, но есть основания полагать, что эти свойства очень чувствительны к введению приближений, а это может приводить к серьезным проблемам. Например, даже в случае слабого взаимодействия открытой системы с окружением переход в основном кинетическом уравнении от борновского приближения к более высоким приближениям по константе связи несколько улучшает поведение решения на коротких временах, но может приводить к расходимостям на стадии установления равновесия между открытой системой и окружением [13]. Поскольку метод проектирования нельзя считать абсолютно надежным методом построения основных кинетических уравнений для открытых квантовых систем, имеет смысл рассмотреть и другие подходы.

Привлекательной альтернативой методу проектирования может служить метод неравновесного статистического оператора (НСО), разработанный Зубаревым [14]. Этот метод, основанный на фундаментальных идеях статистических ансамблей, с успехом применяется для описания различных неравновесных процессов [15]–[17], поэтому кажется естественным воспользоваться им и для построения обобщенных кинетических уравнений в теории открытых квантовых систем. В настоящей работе мы обсудим один из способов постановки и решения этой задачи в рамках метода НСО.

2. ПРИВЕДЕННЫЙ СТАТИСТИЧЕСКИЙ ОПЕРАТОР И ОПЕРАТОРЫ ХАББАРДА

Как обычно, будем предполагать, что интересующая нас открытая квантовая система (S) взаимодействует с другой (как правило, большей) системой (E) – окружением, причем гамильтониан составной системы имеет вид

$$H = H_S + H_E + V \equiv H_0 + V, \quad (2.1)$$

где H_S и H_E – гамильтонианы открытой квантовой системы и окружения, а V – гамильтониан взаимодействия между ними. Вообще говоря, операторы H_S и H_E могут явно зависеть от времени, если на открытую квантовую систему и (или) окружение действуют переменные внешние поля. Мы ограничимся случаем, когда составная система ($S + E$) является изолированной и, следовательно, H_S и H_E не зависят от времени. Отметим, однако, что основные результаты и выводы нетрудно обобщить на случай зависящих от времени гамильтонианов.

Состояние открытой квантовой системы полностью описывается *приведенным статистическим оператором*

$$\varrho_S(t) = \text{Tr}_E \{ \varrho_{SE}(t) \}, \quad (2.2)$$

где символ Tr_E означает след по всем степеням свободы окружения, а $\varrho_{SE}(t)$ – статистический оператор составной системы в момент времени t . Аналогично определяется приведенный статистический оператор окружения $\varrho_E(t)$. Эволюция составной системы описывается уравнением фон Неймана (в системе единиц с $\hbar = 1$)

$$\frac{\partial \varrho_{SE}(t)}{\partial t} = i[\varrho_{SE}(t), H]. \quad (2.3)$$

Как уже отмечалось, задача состоит в том, чтобы вывести основное кинетическое уравнение (master equation) для приведенного статистического оператора $\varrho_S(t)$. В качестве первого шага применим операцию Tr_E к обеим частям уравнения (2.3). В результате получим

$$\frac{\partial \varrho_S(t)}{\partial t} - i[\varrho_S(t), H_S] = -i \text{Tr}_E[V, \varrho_{SE}(t)]. \quad (2.4)$$

Чтобы это формальное равенство приобрело смысл замкнутого уравнения эволюции для подсистемы (S), статистический оператор $\varrho_{SE}(t)$ нужно выразить через ϱ_S . Напомним, что в методе проектирования Накаджимы–Цванцига решение уравнения фон Неймана (2.3) ищется в виде суммы

$$\varrho_{SE}(t) = \varrho_S(t) \otimes \varrho_E + \Delta\varrho(t), \quad (2.5)$$

где ϱ_E – некоторый стационарный статистический оператор макроскопического окружения. Обычно предполагается, что ϱ_E – равновесное распределение Гиббса. Заметим, что оператор взаимодействия V всегда можно определить так, чтобы было выполнено равенство

$$\langle V \rangle_E \equiv \text{Tr}_E(V\varrho_E) = 0. \quad (2.6)$$

Действительно, если исходный оператор V не удовлетворяет этому условию, то достаточно переопределить H_S и V , сделав замены $H_S \rightarrow H_S + \langle V \rangle_E$ и $V \rightarrow V - \langle V \rangle_E$.

Первый член в выражении (2.5) принято называть *релевантной частью* (существенной частью), а второй член – *иррелевантной частью* (несущественной частью) статистического оператора $\varrho_{SE}(t)$. Легко проверить, что

$$\varrho_S(t) \otimes \varrho_E = \mathcal{P}\varrho_{SE}(t), \quad \Delta\varrho(t) = (1 - \mathcal{P})\varrho_{SE}(t), \quad (2.7)$$

где действие оператора (точнее, супероператора) проектирования $\mathcal{P}$ определяется равенством $\mathcal{P}(\cdot) = \varrho_E \text{Tr}_E(\cdot)$. Если в момент времени $t = 0$ отсутствуют корреляции между открытой системой и окружением, то $\Delta\varrho(0) = 0$. В этом случае удастся найти $\Delta\varrho(t)$ в виде функционала от релевантной части $\mathcal{P}\varrho_{SE}(t')$, где $0 \leq t' \leq t$, и вывести из (2.4) замкнутое и формально точное основное кинетическое уравнение для приведенного статистического оператора открытой системы $\varrho_S(t)$ (детали вывода можно найти, например, в книгах [1], [3], [16]).

Рассмотрим теперь, как можно сформулировать схему вывода основного кинетического уравнения в рамках метода НСО [15]–[17]. Следуя этому методу, будем исходить из разложения статистического оператора $\varrho_{SE}(t)$, аналогичного (2.5):

$$\varrho_{SE}(t) = \varrho_{\text{rel}}(t) + \Delta\varrho(t), \quad (2.8)$$

где $\varrho_{\text{rel}}(t)$ играет роль релевантной части статистического оператора составной системы. Напомним, что в методе НСО ставится задача вывода уравнений эволюции (обобщенных кинетических уравнений) для некоторого набора наблюдаемых $P_i(t) = \langle \hat{P}_i \rangle^t$, характеризующих неравновесное состояние системы, где $\{\hat{P}_i\}$ – набор соответствующих базисных динамических переменных, а усреднение проводится с НСО системы (в данном случае с $\varrho_{SE}(t)$). Ясно, что теперь проблема состоит в том, чтобы построить подходящий релевантный статистический оператор, который должен иметь вид функционала от наблюдаемых. Обычно требуется, чтобы $\varrho_{\text{rel}}(t)$ соответствовал экстремуму информационной энтропии $S = -\text{Tr}(\varrho \ln \varrho)$ при дополнительных условиях, что заданы средние значения $\langle \hat{P}_i \rangle$, и при сохранении нормировки $\text{Tr} \varrho = 1$. При этих условиях имеем [15]

$$\varrho_{\text{rel}}(t) = \exp \left\{ -\Phi(t) - \sum_i F_i(t) \hat{P}_i \right\}. \quad (2.9)$$

Функция Массье–Планка $\Phi(t)$ определяется из условия нормировки,

$$\Phi(t) = \ln \text{Tr} \exp \left\{ - \sum_i F_i(t) \hat{P}_i \right\}, \quad (2.10)$$

а параметры $F_i(t)$ (множители Лагранжа) находятся из условий самосогласования (неравновесных уравнений состояния)

$$P_i(t) = \text{Tr} \{ \hat{P}_i \varrho_{\text{rel}}(t) \}. \quad (2.11)$$

Основным критерием выбора базисных динамических переменных $\hat{P}_i$ служит медленность их изменения на выбранной шкале времени. Подробное обсуждение этого вопроса приводится, например, в книгах [15]–[17]. Важно подчеркнуть, что есть еще одно обстоятельство, которое может влиять на выбор переменных $\hat{P}_i$ в динамике открытых квантовых систем. Если нас интересует поведение приведенного статистического оператора $\varrho_s(t)$ на достаточно больших временах t , когда детали начального состояния составной системы становятся несущественными, то удобно потребовать, чтобы решение $\varrho_{SE}(t)$ уравнения фон Неймана совпадало с $\varrho_{\text{rel}}(t)$ в отдаленном прошлом. В методе НСО отбор такого запаздывающего решения осуществляется с помощью введения в уравнение (2.3) бесконечно малого источника $-\varepsilon \{ \varrho_{SE}(t) - \varrho_{\text{rel}}(t) \}$, где $\varepsilon \rightarrow +0$ после вычисления средних значений со статистическим оператором $\varrho_{SE}(t)$ [14], [15]. Однако довольно часто также представляет интерес динамика открытой системы на малых временах, когда эволюция составной системы начинается со специально приготовленного (например, с помощью некоторого квантового измерения) состояния $\varrho_{SE}(0)$ [1]. В таких случаях желательно, чтобы выполнялось начальное условие $\varrho_{SE}(0) = \varrho_{\text{rel}}(0)$ или эквивалентное ему условие $\Delta \varrho(0) = 0$.

Оставляя пока в стороне проблемы, связанные с учетом начальных корреляций, эффектов памяти и других особенностей квантовой динамики, рассмотрим принципиальный вопрос о возможности вывода основного кинетического уравнения (master equation) для открытой системы в рамках метода НСО. Проблема состоит в том,

чтобы найти такие динамические переменные $\hat{P}_i$, средние значения которых, вычисленные со статистическим оператором $\varrho_{SE}(t)$, содержали бы такую же информацию о состоянии открытой системы (S), что и приведенный статистический оператор $\varrho_S(t)$.

Пусть $\mathcal{G} = \{|n\rangle\}$ – некоторый полный ортонормированный набор квантовых состояний в гильбертовом пространстве состояний открытой системы (S). Введем так называемые *операторы Хаббарда* [18]

$$\hat{X}_{mn} = |m\rangle\langle n|. \quad (2.12)$$

Приведем несколько полезных алгебраических свойств этих операторов, которые следуют непосредственно из определения (2.12). Для упрощения некоторых формул будем использовать упорядоченные пары индексов $\alpha = (m, n)$, $\alpha' = (m', n')$ и т. д.

Прежде всего отметим, что любой оператор $\hat{O}^{(S)}$, действующий в гильбертовом пространстве состояний системы (S), можно представить в виде

$$\hat{O}^{(S)} = \sum_{m,n} \langle m | \hat{O}^{(S)} | n \rangle \hat{X}_{mn}. \quad (2.13)$$

Для проверки этого соотношения достаточно убедиться, что матричные элементы операторов в левой и правой частях совпадают. Далее, имеем равенства

$$\hat{X}_\alpha \hat{X}_{\alpha'} = \sum_{\alpha''} g_{\alpha\alpha';\alpha''} \hat{X}_{\alpha''}, \quad [\hat{X}_\alpha, \hat{X}_{\alpha'}] = \sum_{\alpha''} c_{\alpha\alpha';\alpha''} \hat{X}_{\alpha''} \quad (2.14)$$

со структурными постоянными

$$g_{\alpha\alpha';\alpha''} = \delta_{mm''} \delta_{nm'} \delta_{n'n''}, \quad c_{\alpha\alpha';\alpha''} = \delta_{mm''} \delta_{nm'} \delta_{n'n''} - \delta_{mn'} \delta_{nn''} \delta_{m'm''}. \quad (2.15)$$

Наконец, покажем, что матричные элементы приведенного статистического оператора $\varrho_S(t)$ открытой системы (S) выражаются через средние значения $\langle \hat{X}_{mn} \rangle^t$, где усреднение ведется с НСО составной системы ($S + E$). Для этого запишем цепочку очевидных равенств:

$$\langle \hat{X}_{mn} \rangle^t \equiv \text{Tr}_{S,E} \{ \hat{X}_{mn} \varrho_{SE}(t) \} = \text{Tr}_S \{ \hat{X}_{mn} \varrho_S(t) \} = \sum_{k,k'} \langle k | \hat{X}_{mn} | k' \rangle \langle k' | \varrho_S(t) | k \rangle,$$

где было использовано соотношение (2.2). Поскольку при вычислении следа можно выбрать $|k\rangle \in \mathcal{G}$ и $|k'\rangle \in \mathcal{G}$, из определения (2.12) следует, что $\langle k | \hat{X}_{mn} | k' \rangle = \delta_{km} \delta_{k'n}$. Поэтому

$$\langle \hat{X}_{mn} \rangle^t = \langle n | \varrho_S(t) | m \rangle. \quad (2.16)$$

Таким образом, включив операторы Хаббарда в набор базисных динамических переменных $\{\hat{P}_i\}$, можно воспользоваться методом НСО для описания динамики открытых квантовых систем.

3. РЕЛЕВАНТНЫЙ СТАТИСТИЧЕСКИЙ ОПЕРАТОР

Следует подчеркнуть, что сам по себе оператор $\varrho_{\text{rel}}(t)$, входящий в формулу (2.8), является вспомогательным, однако он играет важную роль в методе НСО. Во-первых, как уже отмечалось, от выбора релевантного статистического оператора зависит начальное (или граничное) условие для $\Delta\varrho(t)$. Во-вторых, выбор $\varrho_{\text{rel}}(t)$ определяет “структуру” приближений при решении уравнения фон Неймана для $\varrho_{SE}(t)$, так

как схема метода НСО работает особенно эффективно, когда оператор $\Delta\varrho(t)$ можно в некотором смысле рассматривать как малую поправку к релевантной части статистического оператора (2.8).

Заметим, что метод проектирования Накаджимы–Цванцига можно трактовать как частный вариант метода НСО. Чтобы убедиться в этом, достаточно показать, что релевантную часть статистического оператора (2.5) можно записать в виде (2.9). Выберем в качестве наблюдаемых средние значения $\langle \hat{X}_\alpha \rangle^t$ и среднюю энергию окружения $\mathcal{E}_E(t) = \langle H_E \rangle^t$. Поскольку окружение, как правило, есть макроскопическая система, пренебрежем изменением $\mathcal{E}_E$ из-за контакта с открытой квантовой системой и будем считать, что окружение находится в равновесном состоянии при температуре T . Тогда релевантный статистический оператор составной системы можно записать так:

$$\varrho_{\text{rel}}^{(0)}(t) = \exp \left\{ -\Phi^{(0)}(t) - \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}(t) \hat{X}_{\alpha} - \beta H_E \right\}, \quad (3.1)$$

где $\beta = 1/k_B T$, k_B – постоянная Больцмана. Это выражение совпадает с $\varrho_S(t) \otimes \varrho_E$, если

$$\varrho_E = \exp \{ -\Phi_E^{(0)} - \beta H_E \}, \quad (3.2)$$

где $\Phi_E^{(0)}$ – равновесная функция Массье–Планка для окружения, и если, кроме того, выполняется операторное равенство

$$\exp \left\{ -\Phi_S^{(0)}(t) - \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}(t) \hat{X}_{\alpha} \right\} = \varrho_S(t). \quad (3.3)$$

Функция Массье–Планка $\Phi_S^{(0)}(t)$ определяется из условия нормировки оператора, стоящего в левой части. Легко проверить, что равенство (3.3) эквивалентно условиям самосогласования

$$\text{Tr}_{S,E} \{ \hat{X}_{mn} \varrho_{\text{rel}}^{(0)}(t) \} = \langle n | \varrho_S(t) | m \rangle, \quad (3.4)$$

из которых находится матрица множителей Лагранжа $\Lambda_{\alpha}(t) \equiv \Lambda_{mn}(t)$.

Таким образом, с точки зрения метода НСО в методе проектирования Накаджимы–Цванцига контролируемые (наблюдаемые) величинами являются только матричные элементы приведенного статистического оператора открытой системы. Такое описание неравновесного состояния было бы вполне удовлетворительным, если бы времена релаксации для всех остальных динамических переменных, относящихся к составной системе, были гораздо меньше времен релаксации для величин $\langle n | \varrho_S(t) | m \rangle$. Заметим, однако, что независимо от устройства открытой системы и свойств окружения имеется величина, а именно средняя энергия составной системы $\langle H \rangle^t$, которая не зависит от времени и, следовательно, является “медленной” на всех временных масштабах. Как было показано в работе [19], учет сохранения энергии кардинально меняет структуру немарковских кинетических уравнений уже в борновском приближении и обеспечивает существование равновесного решения для статистического оператора. В рамках метода НСО можно найти явный вид дополнительных “корреляционных” членов в кинетическом уравнении, если включить $\langle H \rangle^t$ в набор наблюдаемых для построения релевантного статистического оператора. Часто бывает удобно выбрать в качестве контролируемого параметра состояния не полную энергию системы, а среднюю энергию взаимодействия, поскольку

остальные вклады в $\langle H \rangle^t$ можно получить, переопределив множители Лагранжа для других базисных динамических переменных [19].

Следуя работе [19], вместо (3.1) возьмем релевантный статистический оператор в виде

$$\varrho_{\text{rel}}(t) = \exp \left\{ -\Phi(t) - \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}(t) \hat{X}_{\alpha} - \beta^*(t) V - \beta H_E \right\}. \quad (3.5)$$

Функция Массье–Планка определяется, как обычно, из условия нормировки оператора $\varrho_{\text{rel}}(t)$, а множители Лагранжа $\Lambda_{\alpha}(t)$ и $\beta^*(t)$ – из условий самосогласования

$$\text{Tr}_{S,E} \{ \hat{X}_{mn} \varrho_{\text{rel}}(t) \} = \langle n | \varrho_S(t) | m \rangle, \quad \text{Tr}_{S,E} \{ V \varrho_{\text{rel}}(t) \} = \langle V \rangle^t, \quad (3.6)$$

где среднее $\langle V \rangle^t$ вычисляется с НСО составной системы $\varrho_{SE}(t)$.

Релевантный статистический оператор (3.5) обладает некоторыми важными свойствами. Например, если положить $\beta^* = \beta$, то ϱ_{rel} совпадет с точным равновесным статистическим оператором при температуре $T = (k_B \beta)^{-1}$. В связи с этим величину $T^* = (k_B \beta^*)^{-1}$ можно трактовать как *корреляционную квазitemпературу* открытой системы. Отметим, что понятие неравновесной квазitemпературы как параметра, сопряженного энергии (не обязательно полной энергии), часто встречается в различных задачах теории неравновесных процессов (см., например, работу [20]). Так как в процессе эволюции составной системы должно выполняться граничное условие $\beta^*(t) \rightarrow \beta$ при $t \rightarrow \infty$, приходим к естественному граничному условию для $\Delta \varrho(t)$ в разложении (2.8):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta \varrho(t) = 0. \quad (3.7)$$

Очевидно, что в методе проектирования Накаджимы–Цванцига это граничное условие не выполняется, так как релевантная часть статистического оператора (2.5) не стремится к равновесному распределению при $t \rightarrow \infty$.

Остановимся теперь на начальном условии для параметра β^* . Если $\beta^*(0) = 0$ (или $T^* = \infty$), то в начальный момент времени релевантный статистический оператор (3.5) совпадает со статистическим оператором (3.1), т. е. он описывает состояние, в котором отсутствуют начальные корреляции между открытой системой и окружением. В случае $\beta^*(0) \neq 0$ эволюция составной системы начинается из коррелированного состояния.

4. ОСНОВНОЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ СЛАБОЙ СВЯЗИ

Исходя из описания неравновесного состояния составной системы с помощью релевантного статистического оператора (3.5), можно вывести основное кинетическое уравнение для $\varrho_S(t)$. Чтобы пояснить схему вывода, рассмотрим случай, когда оператор V в гамильтониане (2.1) описывает слабое взаимодействие между открытой квантовой системой и окружением, т. е. на некотором этапе можно разложить интересующие нас величины в ряд по степеням константы связи, которой пропорционален оператор V .

Сначала подставим выражение (2.8) в равенство (2.4):

$$\frac{\partial \varrho_S(t)}{\partial t} - i[\varrho_S(t), H_S] = -i \text{Tr}_E [V, \varrho_{\text{rel}}(t)] - i \text{Tr}_E [V, \Delta \varrho(t)]. \quad (4.1)$$

Заметим, что если релевантный статистический оператор взять в виде (3.1) (как мы видели, это эквивалентно переходу к схеме Накаджимы–Цванцига), то благодаря условию (2.6) первый член в правой части (4.1) обратится в нуль. Для более общего релевантного статистического оператора (3.5) этот член, вообще говоря, не равен нулю.

Теперь, следуя логике метода НСО, нужно выразить оператор $\Delta\varrho$ через ϱ_{rel} . Тогда правую часть (4.1) можно будет рассматривать, в принципе, как функционал от ϱ_S и β^* . С этой целью выведем сначала уравнение эволюции для оператора $\Delta\varrho(t)$. Подставим выражение (2.8) в уравнение фон Неймана (2.3) и перейдем к представлению взаимодействия, полагая для каждого оператора $A(t)$

$$\tilde{A}(t) = e^{itH_0} A(t) e^{-itH_0}. \quad (4.2)$$

После простых преобразований получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \Delta\tilde{\varrho}(t) - i[\Delta\tilde{\varrho}(t), \tilde{V}(t)] = - \left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varrho}_{\text{rel}}(t) - i[\tilde{\varrho}_{\text{rel}}(t), \tilde{V}(t)] \right). \quad (4.3)$$

Будем предполагать, что выполнено начальное условие $\Delta\tilde{\varrho}(t) = \Delta\varrho(t) = 0$ (см. обсуждение этого условия в предыдущем разделе). Тогда уравнение (4.3) можно записать в интегральной форме

$$\Delta\tilde{\varrho}(t) - i \int_0^t d\tau [\Delta\tilde{\varrho}(\tau), \tilde{V}(\tau)] = - \int_0^t d\tau \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \tilde{\varrho}_{\text{rel}}(\tau) - i[\tilde{\varrho}_{\text{rel}}(\tau), \tilde{V}(\tau)] \right). \quad (4.4)$$

Если взаимодействие между открытой подсистемой и окружением мало, то, как видно из формулы (4.1), в главном (борновском) приближении достаточно найти $\Delta\varrho(t)$ с точностью до членов, линейных по V . Ясно, что в этом приближении можно опустить второй член в левой части уравнения (4.4). Используя затем соотношение (4.2), находим

$$\Delta\varrho(t) = - \int_0^t d\tau e^{-i(t-\tau)H_0} \left(\frac{\partial \varrho_{\text{rel}}(\tau)}{\partial \tau} - i[\varrho_{\text{rel}}(\tau), H] \right) e^{i(t-\tau)H_0}. \quad (4.5)$$

Выражение, стоящее в скобках, преобразуется стандартным образом [15] с помощью формулы (3.5) и условий самосогласования (3.6). С точностью до членов, линейных по V , в результате имеем

$$\Delta\varrho(t) = -i \int_0^t d\tau e^{-i(t-\tau)H_0} R(\tau) e^{i(t-\tau)H_0}, \quad (4.6)$$

где

$$R(\tau) = [V, \varrho_S(\tau)\varrho_E] + \beta^*(\tau) \int_0^1 dx (\varrho_S(\tau)\varrho_E)^x [V, H_0] (\varrho_S(\tau)\varrho_E)^{1-x}. \quad (4.7)$$

Отметим важное свойство этого выражения. Если ϱ_E дается формулой (3.2), $\beta^* = \beta$, а ϱ_S совпадает с

$$\varrho_S^{(0)} = \exp\{-\Phi_S^{(0)} - \beta H_S\}, \quad (4.8)$$

то, как легко проверить, два члена в (4.7) в точности сокращаются и, следовательно, в таком случае $\Delta\varrho = 0$. С математической точки зрения это гарантирует существование равновесного решения (4.8) основного кинетического уравнения для $\varrho_S(t)$ в пределе слабой связи с окружением.

С помощью формулы (4.6) уравнение (4.1) преобразуется к виду

$$\frac{\partial \varrho_S(t)}{\partial t} - i[\varrho_S(t), H_S] = -i \text{Tr}_E[V, \varrho_{\text{rel}}(t)] - \int_0^t d\tau \text{Tr}_E[V, e^{-i(t-\tau)H_0} R(\tau) e^{i(t-\tau)H_0}]. \quad (4.9)$$

Из проведенного анализа следует, что оба члена в правой части этого уравнения являются функционалами от $\varrho_S(t')$ и $\beta^*(t')$, где $0 < t' < t$. Это не означает, однако, что уравнение (4.9) само по себе является замкнутым основным кинетическим уравнением для приведенного статистического оператора ϱ_S , поскольку нам также необходимо уравнение эволюции для $\beta^*(t)$ или для корреляционной квазitemпературы $T^*(t) = (k_B \beta^*(t))^{-1}$. Аналогичная ситуация возникает и в “стандартной” кинетической теории при учете неравновесных корреляций в немарковских кинетических уравнениях. В приближении слабой связи уравнение для $\beta^*(t)$ было получено в работе [19], где рассматривалась квантовая система с парным взаимодействием между частицами. Как уже отмечалось, с формальной точки зрения излагаемый в настоящей работе подход к динамике открытых систем полностью аналогичен методу НСО в квантовой кинетике, поэтому уравнение для $\beta^*(t)$ можно вывести по схеме, описанной в работе [19]. Вывод этого уравнения и более подробное исследование основного кинетического уравнения (4.9) для конкретных моделей открытых систем будут проведены в отдельной работе.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе мы рассмотрели схему вывода основных кинетических уравнений (master equations) для открытых квантовых систем в рамках метода неравновесного статистического оператора Зубарева. Основная идея излагаемого подхода состоит в том, чтобы включить матричные элементы приведенного статистического оператора открытой системы в базисный набор наблюдаемых, которые описывают неравновесное состояние составной системы (открытая система + окружение). Это достигается с помощью соотношения (2.16) между матричными элементами приведенного статистического оператора и средними значениями операторов Хаббарда. Основное преимущество этого подхода над методом проектирования Накаджимы–Цванцига [1], [3], [11], [12] состоит в возможности учета влияния долгоживущих корреляций между открытой системой и окружением путем включения в базисный набор наблюдаемых дополнительных “медленных” динамических переменных. Следует, правда, отметить, что “платой” за возможность использования более обоснованных приближений при выводе основного кинетического уравнения является необходимость решать систему связанных уравнений для приведенного статистического оператора открытой системы и дополнительных неравновесных параметров состояния.

Как было показано в работе [19], фундаментальную роль в немарковской квантовой кинетике играют неравновесные корреляции, связанные с сохранением энергии. Последовательный учет этих корреляций при построении приближений в методе проектирования очень сложен (если вообще возможен), поэтому включение в базисный набор наблюдаемых средней энергии взаимодействия (или сопряженного параметра – корреляционной температуры) следует, по-видимому, рассматривать как минимальное и необходимое усложнение схемы вывода немарковских основных кинетических уравнений для открытых систем.

Список литературы

- [1] H.-P. Breuer, F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford Univ. Press, Oxford, 2002.
- [2] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, Series in Modern Condensed Matter Physics, **13**, World Sci., Singapore, 2008.
- [3] Á. Rivas, S. F. Huelga, *Open Quantum Systems. An Introduction*, Springer, Heidelberg, 2012.
- [4] H. Carmichael, *An Open Systems Approach to Quantum Optics*, Springer, Berlin, 1993.
- [5] C. W. Gardiner, P. Zoller, *Quantum Noise. A handbook of Markovian and non-Markovian quantum stochastic methods with applications to quantum optics*, Springer, Berlin, 2004.
- [6] V. May, O. Kühn, *Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems*, Wiley, Weinheim, 2004.
- [7] A. Nitzan, *Chemical Dynamics in Condensed Phases: Relaxation, Transfer, and Reactions in Condensed Molecular Systems*, Oxford Univ. Press, New York, 2006.
- [8] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000.
- [9] H.-P. Breuer, E.-M. Laine, J. Piilo, B. Vacchini, “Colloquium: Non-Markovian dynamics in open quantum systems”, *Rev. Modern Phys.*, **88**:2 (2016), 021002, 24 pp.
- [10] B. Vacchini, G. Amato, “Reduced dynamical maps in the presence of initial correlations”, *Sci. Rep.*, **6** (2016), 37328, 12 pp.
- [11] S. Nakajima, “On quantum theory of transport phenomena: Steady diffusion”, *Progr. Theor. Phys.*, **20**:6 (1958), 948–959.
- [12] R. Zwanzig, “Ensemble method in the theory of irreversibility”, *J. Chem. Phys.*, **33**:5 (1960), 1338–1341.
- [13] H. P. Breuer, D. Burgarth, F. Petruccione, “Non-Markovian dynamics in a spin star system: exact solution and approximation techniques”, *Phys. Rev. B*, **70**:4 (2004), 045323, 10 pp.
- [14] Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, М., 1971.
- [15] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёпке, *Статистическая механика неравновесных процессов*, т. 1, Физматлит, М., 2002.
- [16] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёпке, *Статистическая механика неравновесных процессов*, т. 2, Физматлит, М., 2002.
- [17] R. Luzzi, Á. R. Vasconcellos, J. G. Ramos, *Predictive Statistical Mechanics. A Nonequilibrium Ensemble Formalism*, Fundamental Theories of Physics, **122**, Kluwer, Dordrecht, 2002.
- [18] J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands. IV. The atomic representation”, *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, **285**:1403 (1965), 542–560.
- [19] V. G. Morozov, G. Röpke, “Non-Markovian quantum kinetics and conservation laws”, *J. Statist. Phys.*, **102**:1–2 (2001), 285–313.
- [20] R. Luzzi, Á. R. Vasconcellos, J. Casas-Vazquez, D. Jou, “Characterization and measurement of a nonequilibrium temperature-like variable in irreversible thermodynamics”, *Phys. A*, **234**:3–4 (1997), 699–714.

Поступила в редакцию 1.05.2017