Основы теории открытых квантовых систем II. Лекция 7.

Теретёнков Александр Евгеньевич

6 апреля 2021 г.

Точно-решаемая динамика с несколькими уровнями и резервуарами

Гильбертово пространство

$$\mathcal{H} \equiv (\mathbb{C} \oplus \mathbb{C}^N) \otimes \bigotimes_{i=1}^{N} \mathfrak{F}_b(\mathcal{L}^2(\mathbb{R})),$$

где $\mathbb{C} \oplus \mathbb{C}^N$ — гильбертово пространство молекулярной системы в одно-частичном приближении $\mathfrak{F}_b(\mathcal{L}^2(\mathbb{R}))$ — бозонное фоковское пространство вибрационныех степеней свободы с ККС $[b_{k,i}, b_{k',j}^\dagger] = \delta_{ij}\delta(k-k')$, $[b_{k,i}, b_{k',j}] = 0$ и вакуумом $b_{k,i}|\Omega\rangle = 0$.

Точно-решаемая динамика с несколькими уровнями и резервуарами

Экситонный гамильтониан обнуляется на состоянии $|0\rangle$, соответствующем отсутствию экситона

$$\hat{H}_S = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} J_{ij} |i\rangle\langle j| = 0 \oplus H_S, \qquad i,j = 1,\ldots,N,$$

$$\hat{H}_B = \sum_{i=1}^{N} \int \omega_k b_{k,i}^{\dagger} b_{k,i} dk.$$

Точно-решаемая динамика с несколькими уровнями и резервуарами

Каждое возбуждённое состояние взаимодействует со своим собственным резевуаром **в приближении вращающейся волны**

$$\hat{H}_I = \sum_i \int \left(g_k^* |0\rangle\langle i| \otimes b_{k,i}^\dagger + g_k |i\rangle\langle 0| \otimes b_{k,i} \right) dk.$$

Рассмотрим эволюцию в соответствии уравнением Шрёдингера

$$\frac{d}{dt} |\hat{\Psi}(t)\rangle = -i\hat{H} |\hat{\Psi}(t)\rangle,$$

с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_S \otimes I + I \otimes \hat{H}_B + \hat{H}_I$ и начальным состоянием

$$|\hat{\Psi}(0)\rangle = (c_0 \oplus |\psi(0)\rangle) \otimes |\Omega\rangle,$$

Точно-решаемая динамика с несколькими уровнями и резервуарами

Редуцированная матрица плотности системы

$$\rho_S(t) \equiv \mathrm{tr}_R\, |\hat{\Psi}(t)\rangle\langle\hat{\Psi}(t)|,$$

где tr_R — частичный след относительно по пространствам $\bigotimes_{i=1}^{N} \mathfrak{F}_b(\mathcal{L}^2(\mathbb{R}))$.

Редуцированная матрица плотности в представлении взаимодействия

$$\rho_{SI}(t) \equiv e^{i\hat{H}_S t} \rho_S(t) e^{-i\hat{H}_S t}$$

Точно-решаемая динамика с несколькими уровнями и резервуарами

Утверждение. Пусть интеграл

$$G(t) = \int |g_k|^2 e^{-i\omega_k t} dk$$

сходится для любых $t \in \mathbb{R}_+$ и определяет непрерывную функцию $G(t)$, тогда

$$\rho_{SI}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{00}(t) & c_0 \langle \psi_I(t)| \\ c_0^* |\psi_I(t)\rangle & |\psi_I(t)\rangle\langle\psi_I(t)| \end{pmatrix}$$

где $|\psi(t)\rangle$ — решение интегро-дифференциального уравнения (такое решение существует и единственно)

$$\frac{d}{dt}|\psi_I(t)\rangle = -\int_0^t ds\, G(t-s) e^{iH_S(t-s)} |\psi_I(s)\rangle$$

с начальным значением $|\psi_I(t)\rangle|_{t=0} = |\psi(0)\rangle$, $\rho_{00} = 1 - ||\psi_I(t)||^2$.

Точно-решаемая динамика с несколькими уровнями и резервуарами

В случае комбинации Лорентцевских пиков

$$\mathcal{J}_L(\omega) = \sum_{j=1}^{K} \frac{\gamma_j g_j^2}{\left(\frac{\gamma_j}{2}\right)^2 + (\omega - \varepsilon_j)^2}, \qquad g_j > 0, \gamma_i > 0, K \in \mathbb{N},$$

$$G_{\mathrm{L}}(t) = \sum_{j=1}^{K} g_j^2 e^{-\frac{\gamma_j}{2}|t| - i\varepsilon_j t}.$$

Точно-решаемая динамика с несколькими уровнями и резервуарами

Утверждение. В случае такой спектральной плотности введём $(K+1)N$-мерный вектор $|\tilde{\psi}(t)\rangle \equiv |\psi_I(t)\rangle \oplus \oplus_{j=1}^K |\varphi_j(t)\rangle \in \oplus^{K+1} \mathbb{C}^N$, где

$$|\varphi_j(t)\rangle \equiv -ig_j \int_0^t ds\, e^{-\left(\frac{\gamma_j}{2}+i\varepsilon_j\right)(t-s)} e^{iH_S(t-s)} |\psi(s)\rangle,$$

тогда $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ удволетворяет уравнению Шрёдингера с неэрмитовым гамильтонианом

$$\frac{d}{dt}|\tilde{\psi}(t)\rangle = -iH_{\text{eff}}|\tilde{\psi}(t)\rangle,$$

Точно-решаемая динамика с несколькими уровнями и резервуарами

$$
H_{\text{eff}} = \begin{pmatrix}
H_S & g_1 I_N & g_2 I_N & \cdots & g_K I_N \\
g_1 I_N & \left(\varepsilon_1 - i\frac{\gamma_1}{2}\right) I_N & 0 & \cdots & 0 \\
g_2 I_N & 0 & \left(\varepsilon_2 - i\frac{\gamma_2}{2}\right) I_N & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\
g_K I_N & 0 & 0 & 0 & \left(\varepsilon_K - i\frac{\gamma_K}{2}\right) I_N
\end{pmatrix} - \\
- H_S \otimes I_{K+1},
$$

с начальным условием $|\tilde{\psi}(0)\rangle = |\psi_I(0)\rangle \oplus 0$.

Точно-решаемая динамика с несколькими уровнями и резервуарами

Утверждение. Пусть $|\tilde{\psi}(t)\rangle \in \mathbb{C}^M$ (в нашем случае $M = (K+1)N$) удовлетворяет уравнению Шрёдингера

$$\frac{d}{dt}|\tilde{\psi}(t)\rangle = -iH_{\mathrm{eff}}|\tilde{\psi}(t)\rangle,$$

то $M+1$-мерная матрица плотности

$$\tilde{\rho}(t) = \begin{pmatrix} 1 - ||\tilde{\psi}(t)||^2 & c_0\langle\tilde{\psi}(t)| \\ c_0^*|\tilde{\psi}(t)\rangle & |\tilde{\psi}(t)\rangle\langle\tilde{\psi}(t)| \end{pmatrix},$$

где $|c_0|^2 + ||\tilde{\psi}(0)||^2 = 1$, удовлетворяет уравнению ГКСЛ

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) = -i[H, \tilde{\rho}(t)] + \sum_{l=1}^{M}\left(L_l\tilde{\rho}(t)L_l^\dagger - \frac{1}{2}L_l^\dagger L_l\tilde{\rho}(t) - \frac{1}{2}\tilde{\rho}(t)L_l^\dagger L_l\right),$$

где $H = 0 \oplus \frac{1}{2}(H_{\mathrm{eff}}^\dagger + H_{\mathrm{eff}})$, $L_l = \sqrt{\gamma_l}|0\rangle\langle\tilde{l}|$.

Омическая спектральная плотность

Омическая спектральная плотность

$$\mathcal{J}_{\text{Ohmic}}(\omega) = \eta\omega, \quad \eta > 0.$$

Омическая спектральная плотность с экспоненциальным обрезанием ($\Omega \to +\infty$)

$$\mathcal{J}_{\Omega}(\omega) = \eta\omega e^{-\frac{|\omega|}{\Omega}}, \qquad G_{\Omega}(t) = -i\eta\frac{2t\Omega^3}{\pi(1 + (\Omega t)^2)}.$$

Гамильтониан системы с контр-членом

$$H_S(\Omega) = H_S^{(r)} + \frac{\eta\Omega}{\pi}.$$

Омическая спектральная плотность

Утверждение. Пусть $|\psi_\Omega(t)\rangle$ — решение

$$\frac{d}{dt}|\psi_I(t)\rangle = -\int_0^t ds\, G(t-s)e^{iH_S(t-s)}|\psi_I(s)\rangle$$

с начальным условием $|\psi_\Omega(0)\rangle = |\psi_I(0)\rangle$, где $G(t) = G_\Omega(t) + G_c(t)$. Тогда предел (если существует) $\lim_{\Omega\to+\infty} e^{-i\frac{\eta\Omega}{\pi}t}|\psi_\Omega(t)\rangle = |\psi^{(r)}(t)\rangle$ является решением уравнения

$$\frac{d}{dt}|\psi^{(r)}(t)\rangle = -\frac{\frac{\eta}{2}}{1+i\frac{\eta}{2}}H_S^{(r)}|\psi^{(r)}(t)\rangle - \int_0^t ds\, \frac{1}{1+i\frac{\eta}{2}}G_c(t-s)e^{iH_S^{(r)}(t-s)}|\psi^{(r)}(s)\rangle$$

с начальным условием $|\psi^{(r)}(0)\rangle = \frac{1}{1+i\frac{\eta}{2}}|\psi_I(0)\rangle$.

Омическая спектральная плотность

Пусть $G_c(t) = G_{\mathrm{Lorentz}}(t)$, тогда $(K+1)N$-мерный вектор

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle \equiv |\psi(t)\rangle \oplus \oplus_{j=1}^{K} |\varphi_j(t)\rangle \in \oplus^{K+1}\mathbb{C}^N,$$

удовлетворяет уравнению Шрёдингера с неэрмитовым гамильтонианом.

$$H_{\mathrm{eff}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{1+i\frac{\eta}{2}} H_S^{(r)} & \frac{g_1}{1+i\frac{\eta}{2}} I_N & \frac{g_2}{1+i\frac{\eta}{2}} I_N & \cdots & \frac{g_K}{1+i\frac{\eta}{2}} I_N \\ g_1 I_N & \left(\varepsilon_1 - i\frac{\gamma_1}{2}\right) I_N & 0 & \cdots & 0 \\ g_2 I_N & 0 & \left(\varepsilon_2 - i\frac{\gamma_2}{2}\right) I_N & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ g_K I_N & 0 & 0 & 0 & \left(\varepsilon_K - i\frac{\gamma_K}{2}\right) I_N \end{pmatrix} - $$
$$- H_S^{(r)} \otimes I_{K+1}.$$

Омическая спектральная плотность

Оператор iH_{eff} — аккретивный (и, следовательно, ГКСЛ-расширение существует) тогда и только тогда, когда

$$H_S^{(r)} \geqslant \left(\frac{\eta}{4} \sum_{j=1}^{K} \frac{g_j^2}{\gamma_j} \right) I_N.$$

Если эти условия нарушаются, то предел $\lim_{\Omega \to +\infty} e^{-i\frac{\eta\Omega}{\pi}t} |\psi_\Omega(t)\rangle$ не существует.
Кроме того, отметим, что если использовать реугуляризацию отличную от $\mathcal{J}_\Omega(\omega) = \eta\omega e^{-\frac{|\omega|}{\Omega}}$, то ответ будет от неё зависеть.

Модель Калдейры-Легетта

Гильбертово пространство

$$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathfrak{F}_b(\mathcal{L}^2(\mathbb{R}))$$

Коммутационные соотношения

$$[x,p] = i, \qquad [b_k, b_{k'}^\dagger] = \delta(k - k')$$

Гамилтониан

$$H = H_S + H_B + H_I$$

$$H_S = \frac{p^2}{2m} + V(x), \qquad H_B = \int dk \omega_k b_k^\dagger b_k,$$

$$H_I = -xB, \qquad B = \int dk g_k (b_k + b_k^\dagger), \qquad g_k \in \mathbb{R}$$

Модель Калдейры-Легетта

Утверждение. Пусть

$$B(t) \equiv e^{iH_Bt} B e^{-iH_Bt} = \int dk g_k (e^{-i\omega_k t} b_k + e^{i\omega_k t} b_k^\dagger)$$

— свободная эволюция B, а

$$x(t) \equiv e^{iHt} x e^{-iHt}$$

— гейзенбергоская эволюцию кооридинаты x, тогда

$$m\ddot{x}(t) + V'(x(t)) - \int_0^t D(t-s) x(s) = B(t),$$

где

$$D(t) = 2 \int dk g_k^2 \sin \omega_k t$$

Модель Калдейры-Легетта

Доказательство. Уравнения Гейзенберг

$$\dot{p}(t) = i[H, p(t)] = -V'(x(t)) + \int dk g_k (b_k(t) + b_k^\dagger(t))$$

$$\dot{x}(t) = i[H, x(t)] = \frac{p(t)}{m}$$

$$\dot{b}_k(t) = i[H, b_k(t)] = -i\omega_k b_k(t) + i g_k x(t)$$

$$b_k(t) = e^{-i\omega_k t} b_k + i g_k \int_0^t e^{-i\omega_k (t-s)} x(s)$$

Модель Калдейры-Легетта

$$\int dk g_k(b_k(t) + b_k^\dagger(t)) = \int dk g_k(e^{-i\omega_k t} b_k + e^{i\omega_k t} b_k^\dagger) +$$

$$+ i \int dk g_k^2 \int_0^t (e^{-i\omega_k (t-s)} - e^{i\omega_k (t-s)}) x(s) =$$

$$= B(t) + \int_0^t \underbrace{2 \int dk g_k^2 \sin \omega_k (t-s)}_{D(t-s)} x(s)$$

$\square$

Модель Калдейры-Легетта

Упражнение. Выразите $-i[B(t), B(s)]$ в терминах $D(t)$.

Модель Калдейры-Легетта

Упражнение. Выразите $-i[B(t), B(s)]$ в терминах $D(t)$.

Упражнение. В равновесном случае, то есть при усреднении $\langle\cdot\rangle$ по равновесному состоянию $\rho_B = \frac{e^{-\beta H_B}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_B}}$, выразите $\langle\{B(t), B(s)\}\rangle$ в терминах

$$D_{\mathrm{th}}(t) = 2\int dk g_k^2 \,\mathrm{cth}\, \frac{\beta\omega_k}{2} \cos\omega_k t$$