Открытые двухуровневые системы

Побойко Игорь

11 марта 2017

Spin-Boson model

Задача данного семинара — на *микроскопическом* уровне изучить динамику открытой системы, взаимодействующей с окружением. В качестве такой системы возьмём простейшую квантомеханическую систему — двухуровневую систему (s), описываемую на языке спина-1/2. В качестве окружающей среды (e) (иногда её называют *баней*) рассмотрим большое количество (в пределе — континуум) осцилляторов, слабо связанных с двухуровневой системой. Такая модель носит название *спин-бозонной* (*spin-boson model*), и является самой простой нетривиальной моделью открытой системы:

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_n \omega_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n}_{\hat{H}_0^{(e)}} + \underbrace{\frac{\Delta}{2}\hat{\sigma}_z}_{\hat{H}_0^{(s)}} + \underbrace{\hat{\sigma}_x \sum_n \lambda_n X_n}_{\hat{V}}, \quad \hat{X}_n = a_n + a_n^\dagger \tag{1}$$

Мы будем интересоваться динамикой редуцированной матрицы плотности двухуровневой системы $\hat{\rho}_s(t) = \mathrm{Tr}_e \hat{\rho}(t)$. Мы также будем предполагать величины λ_n в каком-то смысле маленькими (*слабая связь*) и попробуем построить теорию возмущений по взаимодействию $\hat{V}$.

Представление взаимодействия

Удобный аппарат для построения такой теории возмущений — это представление взаимодействия. Давайте построим представление взаимодействия для нашей задачи:

$$\frac{d\hat{a}_n}{dt} = i[\hat{H}_0^{(e)}, \hat{a}_n] = i[\omega_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n, \hat{a}_n] = -i\omega_n \hat{a}_n \Rightarrow \hat{a}_n(t) = \hat{a}_n e^{-i\omega_n t}, \quad \hat{a}_n^\dagger(t) = \hat{a}_n^\dagger e^{i\omega_n t} \tag{2}$$

$$\frac{d\hat{\sigma}^\pm}{dt} = i[\hat{H}_0^{(s)}, \hat{\sigma}^\pm] = \pm i\Delta\hat{\sigma}^\pm \Rightarrow \hat{\sigma}^\pm(t) = \hat{\sigma}^\pm e^{\pm i\Delta t} \tag{3}$$

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_x(t) &= \frac{1}{2}(\hat{\sigma}^+ e^{i\Delta t} + \hat{\sigma}^- e^{-i\Delta t}) = \hat{\sigma}_x \cos\Delta t - \hat{\sigma}_y \sin\Delta t = \begin{pmatrix} 0 & e^{it\Delta} \\ e^{-it\Delta} & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{\sigma}_y(t) &= \frac{1}{2i}(\hat{\sigma}^+ e^{i\Delta t} - \hat{\sigma}^- e^{-i\Delta t}) = \hat{\sigma}_x \sin\Delta t + \hat{\sigma}_y \cos\Delta t = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{it\Delta} \\ ie^{-it\Delta} & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{\sigma}_z(t) &= \hat{\sigma}_z \end{cases} \tag{4}$$

Такая «тривиальная» невозмущённая эволюция тем самым описывает просто прецессию спина с угловой скоростью Δ вокруг направления «магнитного поля» z (напомним, что *физически* мы не обязательно имеем дело со спином!). В контексте спинов, такое представление также часто называют *приближением вращающейся волны* (*rotating wave approximation*); это связано с тем, что в каком-то смысле оно эквивалентно «переходу во вращающуюся систему отсчёта».

Борновское приближение для матрицы плотности

Полная матрица плотности в представлении взаимодействия удовлетворяет следующему уравнению:

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = i[\hat{\rho}(t), \hat{V}(t)] \tag{5}$$

В качестве начального условия к этому уравнению предлагается взять следующее: двухуровневая система пусть описывалась какой-то произвольной матрицей плотности $\hat{\rho}_s(0)$; а термостат пусть находился в состоянии термодинамического равновесия $\hat{\rho}_e(0) = \frac{1}{Z}e^{-\beta \hat{H}_0^{(e)}}$; полная матрица плотности при этом $\hat{\rho} = \hat{\rho}_s \otimes \hat{\rho}_e$. В силу слабости связи и большого количества степеней свободы термостата, разумным допущением будет считать, что влияние двухуровневой системы пренебрежимо мало, и $\hat{\rho}_e(t) \equiv \hat{\rho}_e(0)$ (в этом и заключается *Борновское приближение*).

Если следать такое приближение и взять след по степеням свободы бани, мы вообще говоря получим уравнение на редуцированную матрицу плотности. Но в данном приближении в правой части мы получим ноль: частичный след будет устроен как $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_e \hat{X}_n(t)) \equiv 0$ в силу симметрии каждого отдельного осциллятора. Поэтому необходимо рассмотреть второе приближение, которое можно получить, проинтегрировав уравнение на матрицу плотности по времени от момента времени t_0 до t, а затем подставив полученное выражение в это же уравнение[1]:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(t_0) + i\int_{t_0}^{t} dt' [\hat{\rho}(t'), \hat{V}(t')] \tag{6}$$

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = i[\hat{\rho}(t_0), \hat{V}(t)] - \int_{t_0}^{t} dt' [[\hat{\rho}(t'), \hat{V}(t')], \hat{V}(t)] \tag{7}$$

В этом уравнении уже можно провести Борновское приближение и взять след по степеням свободы бани. Первый член выпадет, и уравнение записывается следующим образом:

$$\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = -\int_{t_0}^{t} dt' \mathrm{Tr}_e\left([[\hat{\rho}_s(t')\hat{\rho}_e, \hat{V}(t')], \hat{V}(t)]\right) = -\int_0^{t-t_0} d\tau \mathrm{Tr}_e\left([[\hat{\rho}_s(t-\tau)\hat{\rho}_e, \hat{V}(t-\tau)], \hat{V}(t)]\right) \tag{8}$$

Следующее предположение, которое можно сделать для того, чтобы продвинуться в решении задачи — это *Марковское приближение*. Оно говорит о том, что влияние окружающей среды коротко-скоррелировано, что эквивалентно утверждению о том, что окружающая среда не обладает *памятью*; более точно, времена корреляции окружающей среды должны быть сильно меньше характерных времён, на которых меняется матрица плотности (впоследствии это утверждение полезно будет проверить). Тем самым, основной вклад в интеграл проходит с области $t' \approx t$ или $\tau \approx 0$, что позволяет заменить аргумент матрицы плотности на t и распространить пределы интегрирование на бесконечность:

$$\boxed{\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = -\int_0^{\infty} d\tau \mathrm{Tr}_e\left([[\hat{\rho}_s(t)\hat{\rho}_e, \hat{V}(t-\tau)], \hat{V}(t)]\right)} \tag{9}$$

В таком приближении это уже обыкновенная система дифференциальных уравнений — правая часть зависит только от $\hat{\rho}_s(t)$; можно записать её в виде $\mathcal{L}\hat{\rho}_s(t)$ (оператор Линблада). С этим выражением мы и будем дальше работать.

Выкладка

Сперва нужно взять след по степеням свободы осциллятора. Для этого необходимо подставить явный вид возмущения и расписать коммутаторы:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = -\sum_{n,m}\lambda_n\lambda_m\int_0^{\infty} d\tau \mathrm{Tr}_e\Bigg(&\hat{\rho}_s(t)\underline{\hat{\rho}_e}\hat{\sigma}_x(t-\tau)\underline{\hat{X}_n(t-\tau)}\hat{\sigma}_x(t)\underline{\hat{X}_m(t)} - \hat{\sigma}_x(t-\tau)\underline{\hat{X}_n(t-\tau)}\hat{\rho}_s(t)\underline{\hat{\rho}_e}\hat{\sigma}_x(t)\underline{\hat{X}_m(t)} - \\ &- \hat{\sigma}_x(t)\underline{\hat{X}_m(t)}\hat{\rho}_s(t)\underline{\hat{\rho}_e}\hat{\sigma}_x(t-\tau)\underline{\hat{X}_n(t-\tau)} + \hat{\sigma}_x(t)\underline{\hat{X}_m(t)}\hat{\sigma}_x(t-\tau)\underline{\hat{X}_n(t-\tau)}\hat{\rho}_s(t)\underline{\hat{\rho}_e}\Bigg).\end{aligned} \tag{10}$$

В предыдущем выражении подчёркнуты те операторы, которые действуют на степени свободы среды, и которые участвуют во взятии следа. Сами следы устроены следующим образом:

$$\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_e\hat{X}_n(t)\hat{X}_m(t')) \equiv \left\langle \hat{X}_n(t)\hat{X}_m(t')\right\rangle = \delta_{nm}S(\omega_n|t-t') \tag{11}$$

полученный тут объект представляет собой *корреляционную функцию среды*. В нашем случае она диагональна по осцилляторам, а кроме того, в силу однородности среды по времени — отсутствии явной зависимости $\hat{H}_0^{(e)}$ от времени — эти корреляционные функции зависят только от разности времён. Вычислим мы их ниже, а пока приведём уравнение:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = -\sum_n \lambda_n^2\int_0^{\infty} d\tau\Big(&S(\omega_n|-\tau)\cdot\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\sigma}_x(t) - S(\omega_n|\tau)\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_x(t) - \\ &- S(\omega_n|-\tau)\hat{\sigma}_x(t)\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_x(t-\tau) + S(\omega_n|\tau)\hat{\sigma}_x(t)\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\rho}_s(t)\Big).\end{aligned} \tag{12}$$

Наконец, можно ввести характеристику окружающей среды — *спектральную плотность* $J(\omega) = \pi\sum_n \lambda_n^2\delta(\omega-\omega_n)$. Предел континуума для окружающей среды теперь будет просто заменяться на замену $J(\omega)$ на некоторую непрерывную функцию частоты ω; какую именно — это зависит от характеристик резервуара. После введения такой характеристики, мы можем избавиться от суммы и перейти к интегралу (заметим, что все $\omega_n > 0$), введя обозначение

$$S(t) \equiv \int_0^{\infty}\frac{d\omega}{\pi}J(\omega)S(\omega|t) \tag{13}$$

[1]В таком виде это тождественное преобразование!

$$\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = -\int_0^\infty d\tau \left(S(-\tau)\cdot\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\sigma}_x(t) - S(\tau)\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_x(t) - S(-\tau)\hat{\sigma}_x(t)\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_x(t-\tau) + S(\tau)\hat{\sigma}_x(t)\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\rho}_s(t)\right). \tag{14}$$

Корреляционные функции среды

Полезно вычислить корреляционную функцию для одного осциллятора:

$$S(\omega|t) = \langle X(t)X(0)\rangle = \left\langle (\hat{a}e^{-i\omega t} + \hat{a}^\dagger e^{i\omega t})(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)\right\rangle_{env} = (n_B(\omega)+1)e^{-i\omega t} + n_B(\omega)e^{i\omega t}, \tag{15}$$

а также Фурье-компоненты полной корреляционной функции:

$$S(\omega) \equiv \int d\tau e^{i\omega\tau}\int_0^\infty \frac{d\omega'}{\pi}J(\omega')S(\omega'|\tau) = 2J(\omega)(n_B(\omega)+1) + 2J(-\omega)n_B(-\omega) \tag{16}$$

где $n_B(\omega) = (e^{\beta\omega}-1)^{-1}$ — бозонная функция распределения. Стоит учитывать, что $J(\omega<0)=0$.

Уравнения Блоха

Вообще говоря, уже на этом этапе можно подставлять зависимости $\hat{\sigma}_x(t)$, брать интегралы по τ и выписывать уравнения на различные компоненты матрицы плотности. Однако более наглядным будет иная параметризация. Вспомним, что всякую матрицу плотности двухуровневой системы можно параметризовать с помощью *Блоховской параметризации*: $\hat{\rho}(t) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \boldsymbol{P}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})$; и трёхмерный вектор $\boldsymbol{P} = \langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}\rangle$. Таким образом, уравнение на матрицу плотности в действительности эквивалентно системе уравнений на средние значения спина. Такие уравнения называются *уравнениями Блоха*.

С учётом того, что матрица плотности у нас записана в представлении взаимодействия, физические наблюдаемые выражаются через её элементы следующим образом:

$$\begin{cases} \sigma_x(t) &= \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_x(t)) = \rho_{12}e^{-i\Delta t} + \rho_{21}e^{i\Delta t} \\ \sigma_y(t) &= \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_y(t)) = i(\rho_{12}e^{-i\Delta t} - e^{i\Delta t}\rho_{21}) \\ \sigma_z(t) &= \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_z(t)) = \rho_{11} - \rho_{22} \end{cases} \tag{17}$$

Уравнения же имеют вид:

$$\frac{d\sigma_\alpha}{dt} = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}_s\frac{d\hat{\sigma}_\alpha(t)}{dt}\right) + \mathrm{Tr}\left(\frac{d\hat{\rho}_s}{dt}\hat{\sigma}_\alpha(t)\right) \tag{18}$$

и первый член описывает тривиальную динамику за счёт гамильтониана $\hat{H}_0$ и того, что мы работаем в представлении взаимодействия, а второй представляет собой «диссипативный» член, возникающий за счёт взаимодействия с окружающей средой. Давайте исследовать эти уравнения покомпонентно.

Уравнение на σ_z После небольшого вычисления можно получить, что след имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\left(\frac{d\hat{\rho}_s}{dt}\hat{\sigma}_z\right) &= -2\int_0^\infty d\tau\left[(\rho_{11}-\rho_{22})(S(\tau)+S(-\tau))\cos\Delta\tau + i(\rho_{11}+\rho_{22})(S(\tau)-S(-\tau))\sin\Delta\tau\right] = \\ &= -\sigma_z(t)\cdot 2\int_0^\infty d\tau(S(\tau)+S(-\tau))\cos\Delta\tau - 2i\int_0^\infty d\tau(S(\tau)-S(-\tau))\sin\Delta\tau \end{aligned} \tag{19}$$

В силу чётности обоих интегралов, можно распространить пределы на бесконечные и заметить, что интегралы в таком случае просто дают компоненту Фурье:

$$2\int_0^\infty d\tau(S(\tau)+S(-\tau))\cos\Delta\tau = S(\Delta)+S(-\Delta) = 2J(\Delta)(2n_B(\Delta)+1) \equiv 2J(\Delta)\coth\frac{\beta\Delta}{2} \tag{20}$$

$$2i\int_0^\infty d\tau(S(\tau)-S(-\tau))\sin\Delta\tau = S(\Delta)-S(-\Delta) \equiv 2J(\Delta) \tag{21}$$

Это позволяет нам переписать уравнение в следующем виде:

$$\boxed{\frac{d\sigma_z(t)}{dt} = -\frac{\sigma_z(t)-\sigma_z^{eq}}{T_1}, \quad \sigma_z^{(eq)} = -\tanh\frac{\beta\Delta}{2}, \quad T_1^{-1} = 2J(\Delta)\coth\frac{\beta\Delta}{2}} \tag{22}$$

Это уравнение показывает две вещи. Во-первых, величина σ_z в пределе $t\to\infty$ выходит на значение $\sigma_z^{(eq)}$, которое совпадает с *равновесным* значением σ_z, вычисленным с равновесной же матрицей плотности $\hat{\rho}_s^{(eq)} = \frac{1}{Z_s}e^{-\beta\hat{H}_0^{(s)}}$ (что несложно проверить). Само по себе это совершенно естественно с точки зрения термодинамики — будучи приведённой в контакт с резервуаром температуры T, система сама через определённое время приходит в равновесие с той-же температурой. Тем не менее, получить такой результат *микроскопически*, даже на примере самой простой модели — достаточно поучительно.

Во-вторых, мы также научились находить время T_1 — время *релаксации* системы; время, за которое устанавливается термодинамическое равновесие. Оно определяется Фурье-компонентой спектральной плотности на частоте Δ (что естественно: ведь именно такой квант необходимо поглотить или испустить, чтобы перевернуть спин — а релаксация происходит именно за счёт таких процессов).

Часто модельно рассматривают так называемую *омическую баню* с зависимостью $J(\omega) = \alpha\omega\theta(\omega_c - \omega)$ (ω_c — «критическая» частота, выше которой спектр обрывается; а $\alpha \ll 1$ — безразмерный параметр связи). В таком случае, для достаточно высоких температур $T \gg \Delta$ мы получаем оценку $T_1^{-1} \approx 2\alpha T$.

Уравнение на σ_x Это уравнение — самое простое, поскольку оно не содержит «диссипативного» члена. В этом можно убедиться, заметив, что коммутатор зануляется $[\hat{\sigma}_x, \hat{V}] = 0$, и поэтому в полном представлении Гейзенберга динамика σ_x будет происходить только за счёт невозмущённого гамильтониана $\hat{H}_0^{(s)}$. Можно также убедиться и явным вычислением, взяв соответствующий след $\mathrm{Tr}(\frac{d\hat{\rho}_s(t)}{dt}\hat{\sigma}_x(t)) = 0$. Таким образом, уравнение имеет следующий вид:

$$\boxed{\frac{d\sigma_x}{dt} = -\Delta\sigma_y} \tag{23}$$

Это уравнение — часть обычной «Ларморовской» прецессии спина вокруг магнитного поля — оси z.

Уравнение на σ_y Давайте рассмотрим «диссипативный» вклад:

$$\mathrm{Tr}\left(\frac{d\hat{\rho}_s}{dt}\hat{\sigma}_y(t)\right) = -2i\int_0^\infty d\tau (S(-\tau) + S(\tau))\left(\rho_{12}e^{-i\Delta t}e^{i\Delta\tau} - \rho_{21}e^{i\Delta t}e^{-i\Delta\tau}\right) =$$
$$= \sigma_x \cdot 2\int_0^\infty d\tau (S(-\tau) + S(\tau))\sin\Delta\tau - \sigma_y(t)\cdot 2\int_0^\infty d\tau (S(-\tau) + S(\tau))\cos\Delta\tau \tag{24}$$

Второй интеграл мы уже считали, он равен $J(\Delta)\coth\frac{\beta\Delta}{2}$. Первый же — что-то новенькое, потому что он не сводится к преобразованию Фурье. Можно попытаться его тем не менее вычислить:

$$2\int_0^\infty d\tau (S(-\tau) + S(\tau))\sin\Delta\tau = 2\int_0^\infty d\tau \sin\Delta\tau \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega)\left[(n_B(\omega)+1)e^{-i\omega\tau} + n_B(\omega)e^{i\omega\tau}\right] \tag{25}$$

Стоящие тут интегралы по времени, конечно, расходятся, но экспоненциально регуляризуются, вводя множитель $e^{-\alpha\tau}$, и дальнейший результат расписать по формуле Сохоцкого:

$$\int_0^\infty d\tau \sin\Delta\tau e^{\pm i\omega\tau} = \frac{\Delta}{\Delta^2 - (\omega \pm i\alpha)^2} = \mathcal{P}\frac{\Delta}{\Delta^2 - \omega^2} \pm \frac{1}{2}i\pi(\delta(\Delta - \omega) - \delta(\Delta + \omega)) \tag{26}$$

Это означает, что в интеграл есть вещественный и мнимый вклады:

$$\boxed{\delta = \mathrm{Re}(\dots) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega)\coth\frac{\beta\omega}{2}\mathcal{P}\frac{2\Delta}{\Delta^2 - \omega^2}} \tag{27}$$

$$\boxed{\gamma = -\mathrm{Im}(\dots) = \frac{1}{4}J(\Delta)} \tag{28}$$

Собирая всё вместе (включая «тривиальный» динамический член), мы получаем:

$$\boxed{\frac{d\sigma_y(t)}{dt} = (\Delta + \delta - i\gamma)\sigma_x - \frac{\sigma_y}{T_2/2}, \quad T_2^{-1} = \frac{1}{2}T_1^{-1} = \frac{1}{2}J(\Delta)\coth\frac{\beta\Delta}{2}} \tag{29}$$

(появление двойки связано с тем, что при таком выборе наблюдаемые σ_x и σ_y будут затухать по закону e^{-t/T_2}). Изучим смысл полученных членов. Величина δ представляет собой *перенормировку Ларморовской частоты* — поправку, вызванную взаимодействием с баней. Она носит название *Лэмбовского сдвига*[2]. Величины γ и T_2 носят диссипативный

[2]Вообще говоря, вы наверняка уже слышали про Лэмбовский сдвиг, но в другом контексте. Исходно так называется расщепление между $^2S_{1/2}$ и $^2P_{1/2}$ уровнями энергии атома водорода, которое имеет порядок α^3 ($\alpha \approx 1/137$ — постоянная тонкой структуры) и вызванное релятивистскими эффектами — петлевыми поправками КЭД, за счёт рассмотрения виртуальных процессов рождения и уничтожения фотонов в старших порядках теории возмущений.

Можно на это смотреть и с точки зрения динамики открытых систем: Лэмбовский сдвиг возникает за счёт взаимодействия с нулевыми колебаниями фотонной «бани». Поэтому, как это ни странно, Лэмбовский сдвиг в КЭД и в нашей задаче имеют весьма схожую природу.

Тот факт, что он определяется не только степенями свободы бани, что находятся в резонансе — на частоте Δ — а интегралом по всем частотам, говорит о том, что он имеет природу поправки, связанной с виртуальными процессами. Скорее всего, эту формулу (скажем, при $T = 0$) можно получить исходя из стандартной формулы для второго порядка теории возмущений.

характер (из-за них, как и из-за релаксационного члена T_1, длина вектора $|\boldsymbol{\sigma}|$ уменьшается); они описывают процессы *дефазировки* (время T_2 носит название времени дефазировки). На примере спина-$1/2$, дефазировка сводится к «убиванию» когерентной Ларморовской прецессии, в результате чего она полностью затухает и спин начинает смотреть вдоль оси z (где он релаксирует к своему равновесному значению $\sigma_z^{(eq)}$). Физически, дефазировка и релаксация — различные процессы, и поэтому в случае общего положения времена T_1 и T_2 будут, вообще говоря, различны. Тот факт, что они оказались столь похожими (отличие на константу) — это особенности данной конкретной модели.

Имеется наглядный способ представить себе дефазировку. Давайте рассмотрим ансамбль спинов, вращающихся *когерентно* (*синфазно*) вокруг оси z с одинаковой частотой Δ. Однако, из-за взаимодействия с «шумом», индуцированным окружающей средой, частота каждого из этих спинов чуть «дрожжит», из-за чего каждый из них начинает вращаться с чуть изменённой частотой. Хотя на малых временах эта поправка будет незаметна, и динамика будет оставаться когерентной — однако спустя какое-то время спины окажутся совершенно случайным образом разбросаны в плоскости, и среднее значение проекции спина на плоскость xy выйдёт на нулевое значение. Это время и есть T_2, и по физическому смыслу оно существенно отличается от времени T_1 — времени, за которое происходит релаксация к равновесному состоянию.