

Модель Калдейры-Леггетта

Антоненко Даниил

28 февраля 2018

Подавление туннелирования в двухуровневой системе

Пертурбативное рассмотрение

На прошлом семинаре исследовалась спин-бозонная модель, простейшая модель для изучения диссипации в квантовой механике:

$$\hat{H} = \sum_n \omega_n a_n^\dagger a_n + \frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_x \sum_n \lambda_n X_n, \quad X_n = a_n + a_n^\dagger \quad (1)$$

С помощью приближения Борна-Маркова (то есть в рамках теории возмущений) были получены следующие уравнения, описывающие динамику спина:

$$\begin{cases} \frac{d\sigma_x}{dt} = -\Delta \sigma_y \\ \frac{d\sigma_y}{dt} = (\Delta - 2\delta) \sigma_x - \frac{\sigma_y}{T_2/2} \\ \frac{d\sigma_z}{dt} = -\frac{\sigma_z(t) - \sigma_z^{eq}}{T_1} \end{cases} \quad (2)$$

Мы также обсудили роль члена $T_1^{-1} = J(\Delta) \coth \frac{\beta\Delta}{2}$, отвечающего за релаксацию; роль члена $T_2^{-1} = \frac{1}{2}T_1^{-1}$, отвечающего за дефазировку, а также роль члена Δ , соответствующего попросту Ларморовской прецессии спина в постоянном магнитном поле в системе без взаимодействия с термостатом.

Единственный член, на который мы практически не обратили внимания — это «Лэмбовский сдвиг» частоты прецессии δ , из-за которого возникает «эффективная» (*перенормированная*) частота вращения спина $\Delta_{\text{eff}} = \Delta - \delta$. Им-то мы сейчас и займёмся. Для удобства, рассмотрим чисто квантовый случай нуля температур $T = 0$, что соответствует $\coth = 1$; кроме того, мы ограничимся рассмотрением омической бани:

$$J(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \pi \sum_n \lambda_n^2 \delta(\omega - \omega_n) = \pi \alpha \omega \theta(\omega_c - \omega) \quad (3)$$

Имея всё это в виду, мы можем явно сосчитать сдвиг частоты δ :

$$\delta = \text{v.p.} \int_0^{\omega_c} \frac{d\omega}{2\pi} \pi \alpha \omega \frac{4\Delta}{\omega^2 - \Delta^2} \underset{\omega_c \gg \Delta}{\approx} 2\alpha \Delta \ln \frac{\omega_c}{\Delta} \quad (4)$$

Мы получили логарифмический интеграл, который набирается на всех масштабах, начиная от Δ и заканчивая ультрафиолетовой обрезкой на больших частотах ω_c (в отличие от всех предыдущих членов, которые определялись резонансным поведением — осцилляторами с частотами $\omega \approx \Delta$). Это значит, что несмотря на малость величины α , сам ответ δ вполне может оказаться сравним с Δ !

Теперь вспомним, что «спин», который мы рассматривали, в действительности может являться также моделью произвольной двухуровневой системы. Ранее мы встречали примеры (молекула аммиака, двухъямный потенциал), в которых два классически эквивалентных (или близких) состояния расщеплялись по энергии благодаря квантовомеханическому туннелированию. Тогда Δ в гамильтониане (1) отвечает амплитуде туннелирования; а вращение спина соответствует осцилляциям Раби между этими состояниями. Таким образом член δ , в действительности, очень важен — он отвечает за *подавление туннелирования*!

Наконец, в старших порядках теории возмущений, вообще говоря, могут возникать такие же большие члены $(\alpha \ln \frac{\omega_c}{\Delta})^n$; и если логарифм достаточно большой, то, по-хорошему, такие члены нужно учитывать все. Систематический способ учёта логарифмических расходимостей в рамках теории возмущений вплоть до бесконечных порядков возможен, и составляет суть метода *ренормгруппы*. С ним вы ознакомитесь позже, а здесь мы ограничимся более простым и физически наглядным способом, который приводит к такому же результату.

Адиабатическое рассмотрение

Итак, мы получили логарифмическую поправку, которая приходит из широкого диапазона частот. Подавляющий вклад дают «быстрые» степени свободы бани с частотами $\omega_c \gg \omega \gg \Delta$. К счастью, когда имеется разделение быстрых и медленных степеней свободы, на помощь приходит адиабатическое приближение, которым можно воспользоваться и в этой задаче.

С точки зрения быстрых осцилляторов, удобно работать в базисе собственных состояний оператора $\hat{\sigma}_x$, соответствующих «частице в левой яме» $|\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$, $\sigma_x = -1$ и «частице в правой яме» $|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\sigma_x = +1$ (в терминах аналогии двухуровневой системы с двухъямным потенциалом). Для анализа поведения системы, перепишем гамильтониан осцилляторов обратно в терминах операторов координаты $\hat{X} = \hat{a} + \hat{a}^\dagger$ и импульса $\hat{P} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{2i}$, так что $[\hat{X}, \hat{P}] = i$ и

$$\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n = \left(\frac{\hat{X}_n}{2} - i\hat{P}_n \right) \left(\frac{\hat{X}_n}{2} + i\hat{P}_n \right) = \hat{P}_n^2 + \frac{1}{4}\hat{X}_n^2 + \text{const} \quad (5)$$

В таком случае, с точки зрения «быстрых» осцилляторов, нахождение частицы в левой или правой яме соответствует попросту сдвигу центра осциллятора:

$$\hat{H}_n \simeq \omega_n \left(\hat{P}_n^2 + \frac{1}{4}\hat{X}_n^2 \mp \frac{\lambda_n}{\omega_n} \hat{X}_n \right) = \omega_n \left(\hat{P}_n^2 + \frac{1}{4} \left[\hat{X}_n \mp 2\frac{\lambda_n}{\omega_n} \right]^2 \right) + \text{const} \quad (6)$$

и основное состояние такого «сдвинутого» осциллятора устроено как $e^{\pm i\hat{P}_n \cdot 2\frac{\lambda_n}{\omega_n}} |0_n\rangle$ (применили оператор трансляции). Поскольку быстрые осцилляторы «подстраиваются» под движение медленной двухуровневой подсистемы, с точки зрения «быстрых» осцилляторов полная волновая функция системы при этом соответствует следующей:

$$|\leftarrow\rangle_{tot} = |\leftarrow\rangle \otimes \prod_{\omega_n \gg \Delta} e^{2i\frac{\lambda_n}{\omega_n} \hat{P}_n} |0_n\rangle, \quad |\rightarrow\rangle_{tot} = |\rightarrow\rangle \otimes \prod_{\omega_n \gg \Delta} e^{-2i\frac{\lambda_n}{\omega_n} \hat{P}_n} |0_n\rangle, \quad (7)$$

где тензорное произведение берётся по всем осцилляторам бани.

Из-за смещения осцилляторов из «бани», меняется также и эффективный матричный элемент, определяющий динамику двухуровневой системы: $\frac{\Delta_{\text{eff}}}{2} = \langle \leftarrow | \hat{H}_{\text{spin}} | \rightarrow \rangle = \frac{\Delta}{2} \cdot \prod_{\omega_n \gg \Delta} \left\langle e^{-4i\frac{\lambda_n}{\omega_n} \hat{P}_n} \right\rangle_n$. Последнее произведение несложно вычислить (включая усреднение по основному состоянию осциллятора¹), и получить:

$$\Delta_{\text{eff}} = \Delta \cdot \exp \left(-2 \sum_{\omega_n \gg \Delta} \frac{\lambda_n^2}{\omega_n^2} \right) = \Delta \cdot \exp \left(-\frac{2}{\pi} \int_{\omega \gg \Delta} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \right) \simeq \Delta \cdot \exp \left(-2\alpha \ln \frac{\omega_c}{\Delta} \right) \quad (8)$$

В первом приближении это выражение совпадает с пертурбативным результатом (в пределе малых α), однако в этом выводе мы не накладывали никаких ограничений на α . Кроме того, заметим, что в действительности нижняя обрезка полученного логарифмического интеграла выбиралась из условия адиабатичности; поскольку *реальная* динамика двухуровневой подсистемы определяется именно Δ_{eff} , а не Δ , то это выражение нужно исправить и взять в качестве нижней обрезки именно Δ_{eff} . Это позволяет записать следующее уравнение самосогласования:

$$\Delta_{\text{eff}} = \Delta \left(\frac{\Delta_{\text{eff}}}{\omega_c} \right)^{2\alpha} \Rightarrow \Delta_{\text{eff}} = \Delta \cdot \left(\frac{\Delta}{\omega_c} \right)^{\frac{2\alpha}{1-2\alpha}} \quad (9)$$

Мы получили замечательный непертурбативный результат: в данной системе имеется *квантовый фазовый переход* при $\alpha = \frac{1}{2}$. При $\alpha < \frac{1}{2}$, система ведёт себя как квантовая двухуровневая система, в ней наблюдается туннелирование и осцилляции Раби (с перенормированной частотой Δ_{eff}). Однако при достаточно сильной связи с окружающей средой, а именно, при $\alpha > \frac{1}{2}$, единственное решение уравнений самосогласования — это $\Delta_{\text{eff}} = 0$. Это означает полное подавление квантового туннелирования; с точки зрения двухъямного потенциала, частица, «посаженная» в одну из ям, там и остаётся. Данный результат является сам по себе очень важным, поскольку он демонстрирует на конкретной модели то, как квантовая механика переходит в классическую физику.

Модель Калдейры-Леггетта

На этом семинаре мы обсудим микроскопическую модель диссипативной квантовой механики, предложенную Калдейрой и Леггеттом. Заметим, что каким-нибудь тривиальным образом включить трение в квантовую механику не получится —

¹Например, можно взять волновую функцию основного состояния в импульсном представлении и сосчитать гауссов интеграл. Для вычисления этого среднего при произвольной температуре удобно использовать общую формулу $\langle e^{\alpha a + \beta a^\dagger} \rangle = e^{\frac{1}{2}(\alpha a + \beta a^\dagger)^2}$, которая работает и для усреднения по температурной матрице плотности.

гамильтонов формализм требует сохранения энергии и фазового объема. Но оказывается, что диссипативная механика получается естественным образом в системе частица-бани, как *эффективная* теория для частицы, полученная исключением степеней свободы бани². При этом неизбежно возникает и второй компонент эффективного описания — *случайная сила*, действующая на частицу, характеристики которой, как мы увидим ниже, жёстко связаны с диссипативной частью.

Пусть имеется квантовомеханическая частица массы M , движущаяся в произвольном потенциале $V(x)$, так что она описывается следующим гамильтонианом:

$$\hat{H}_p = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(\hat{X}) \quad (10)$$

Частица взаимодействует с баней из макроскопического числа осцилляторов массы m_n и частотами ω_n :

$$\hat{H}_{\text{bath}} = \sum_n \left(\frac{\hat{p}_n^2}{2m_n} + \frac{m_n \omega_n^2 \hat{x}_n^2}{2} \right) \quad (11)$$

и взаимодействие рассматривается в самой простой — билинейной — форме:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_n c_n \hat{x}_n \hat{X} \quad (12)$$

Таким образом, отклонение любого из осцилляторов из положения равновесия вызывает дополнительную силу, действующую на исходную частицу. Мы интересуемся движением частицы, и хотим не следить за степенями свободы бани. В принципе, можно было бы попытаться вывести уравнение на редуцированную матрицу плотности частицы — матрицу плотности $\rho(x, x') = \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle$, что делается более или менее аналогично выводу из предыдущего семинара. Вместо этого мы будем исследовать операторные уравнения движения для частицы и осцилляторов — уравнения Гейзенберга. Они имеют следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{d\hat{X}}{dt} = \frac{\hat{P}}{M} \\ \frac{d\hat{P}}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial X}(\hat{X}) + \sum_n c_n \hat{x}_n \end{cases}, \quad \begin{cases} \frac{d\hat{x}_n}{dt} = \frac{\hat{p}_n}{m_n} \\ \frac{d\hat{p}_n}{dt} = -m_n \omega_n^2 \hat{x}_n + c_n \hat{X} \end{cases} \quad (13)$$

или, исключая импульсы:

$$M \frac{d^2 \hat{X}}{dt^2} + \frac{\partial V}{\partial X}(\hat{X}) - \sum_n c_n \hat{x}_n(t) = 0, \quad \frac{d^2 \hat{x}_n}{dt^2} + \omega_n^2 \hat{x}_n(t) = \frac{c_n}{m_n} \hat{X}(t) \quad (14)$$

Наша задача — исключить степени свободы бани (осцилляторы) — и получить уравнения, описывающие движение только частицы. Это делается более или менее прямолинейно — уравнения движения среды линейны, и их можно решить с использованием классической функции Грина простого гармонического осциллятора $G_n(t) = \theta(t) \cdot \sin \omega_n t / \omega_n$:

$$\hat{x}_n(t) = \hat{x}_n \dot{G}_n(t) + \frac{\hat{p}_n}{m_n} G_n(t) + \frac{c_n}{m_n} \int_0^t d\tau G_n(t - \tau) \hat{X}(\tau) \quad (15)$$

(здесь $\hat{x}_n$ и $\hat{p}_n$ — операторы в момент времени $t = 0$, когда «включилось» взаимодействие с баней). Подставляя это в уравнение движения для нашей частицы, мы можем перегруппировать члены:

$$M \frac{d^2 \hat{X}}{dt^2} + \frac{\partial V}{\partial X}(\hat{X}) - \sum_n \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \int_0^t d\tau \sin \omega_n(t - \tau) \hat{X}(\tau) = \hat{\zeta}(t), \quad \boxed{\hat{\zeta}(t) = \sum_n c_n \left[\hat{x}_n \cos \omega_n t + \frac{\hat{p}_n}{m_n \omega_n} \sin \omega_n t \right]} \quad (16)$$

Величина $\hat{\zeta}(t)$ выглядит как эффективная дополнительная сила, действующая на частицу и определяемая степенями свободы бани — в классической механике такого рода силы называют *Ланжевеновскими*. Проинтегрируем второй член по частям:

$$\sum_n \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \int_0^t d\tau \sin \omega_n(t - \tau) \hat{X}(\tau) = \sum_n \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} \left[\hat{X}(t) - \hat{X}(0) \cos \omega_n(t) - \int_0^t d\tau \cos \omega_n(t - \tau) \frac{d\hat{X}}{d\tau} \right] \quad (17)$$

Введём так называемое «диссипативное ядро» согласно соотношению:

$$\boxed{\gamma(t) = \sum_n \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} \cos \omega_n t} \quad (18)$$

В таком случае первый член равный $-\gamma(0)\hat{X}(t)$ представляет собой перенормировку потенциальной энергии, связанную с взаимодействием с окружающей средой (аналог *Лэмбовского сдвига*); в данном случае он является артефактом

²Калдейра и Леггетт исключали степени свободы бани взятием функционального интеграла; мы же пойдём другим путём.

выбранной конкретной модели взаимодействия с баней, и не несёт глубокого физического смысла — поэтому избавимся от него, введя следующий эффективный потенциал (который, в конечном итоге и определяет динамику частицы, т.е. именно он наблюдается):

$$V_{\text{eff}}(X) = V(X) - \frac{\gamma(0)X^2}{2} \quad (19)$$

Второй член можно перенести в правую часть, рассмотрев его, как перенормировку $\hat{\zeta}(t)$. Данный член тоже не особо интересен, поскольку он является артефактом модельного резкого включения взаимодействия между баней и частицей в момент времени $t = 0$ (что, конечно, на самом деле никогда не происходит) — поэтому избавимся от него соответствующей сдвижкой положений равновесия осцилляторов³, сместив $\hat{x}_n$:

$$\hat{\zeta}_{\text{eff}}(t) = \hat{\zeta}(t) - \gamma(t)\hat{X}(0) = \sum_n c_n \left[\hat{x}_{n,\text{eff}} \cos \omega_n t + \frac{\hat{p}_n \sin \omega_n t}{m_n \omega_n} \right], \quad \hat{x}_{n,\text{eff}} = \hat{x}_n - \frac{c_n}{m_n \omega_n^2} \hat{X}(0). \quad (20)$$

В дальнейшем мы о перенормировках «забудем», и будем опускать индекс «eff». С учётом вышесказанного, операторное уравнение принимает следующий вид:

$$M \frac{d^2 \hat{X}}{dt^2} + \int_0^t d\tau \gamma(t - \tau) \frac{d\hat{X}}{d\tau} + \frac{\partial V(\hat{X})}{\partial X} = \hat{\zeta}(t) \quad (21)$$

Член, зависящий от первой производной, в действительности носит чисто диссипативный характер — он устроен как вязкое трение и приводит к несохранению энергии. Неудивительно, что он имеет нелокальный по времени характер, ведь у среды есть память (хотя мы и предполагали её короткой).

Спектральный вес и омическая баня

Давайте введём спектральный вес бани согласно следующему определению:

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_n \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \delta(\omega - \omega_n). \quad (22)$$

Случай омической бани, как обычно, соответствует зависимости $J(\omega) = \eta\omega$. Используя полученный спектральный вес можно, например, вычислить и «диссипативное ядро», которое связано с ним тривиальным образом:

$$\gamma(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} J(\omega) \cos \omega t = 2\eta\delta(t) \quad (23)$$

(тем самым перенормировка потенциала, пропорциональная $\gamma(t)$, оказывается ещё и ультрафиолетовой). С другой стороны, другой важной характеристикой бани является корреляционная функция «шума»⁴ $\langle \hat{\zeta}(t)\hat{\zeta}(t') \rangle$, где усреднение производится с начальной матрицей плотности бани, которую мы предполагаем термальной:

$$\hat{\rho}_{\text{bath}}(t = 0) = Z^{-1} \exp(-\beta \hat{H}_{\text{bath}}) \quad (24)$$

В таком случае, с учётом средних значений $\langle \hat{x}_{n,\text{eff}}^2 \rangle = \frac{1}{m_n \omega_n} \frac{1}{2} \coth \frac{\beta \omega}{2}$ и $\langle \hat{p}_n^2 \rangle = m_n \omega_n \frac{1}{2} \coth \frac{\beta \omega}{2}$, мы получаем

$$\langle \hat{\zeta}(t)\hat{\zeta}(t') \rangle = \sum_n c_n^2 \left\langle \left(\hat{x}_n \cos \omega_n t + \frac{\hat{p}_n}{m_n \omega_n} \sin \omega_n t \right) \left(\hat{x}_n \cos \omega_n t' + \frac{\hat{p}_n}{m_n \omega_n} \sin \omega_n t' \right) \right\rangle = \sum_n \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \frac{1}{2} \coth \frac{\beta \omega_n}{2} \cos(\omega_n(t - t')) \quad (25)$$

или, переходя к спектральной плотности:

$$\langle \hat{\zeta}(t)\hat{\zeta}(t') \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth \frac{\beta \omega}{2} \cos(\omega(t - t')) \quad (26)$$

³Смещение осцилляторов не важно по следующей причине. В исходном гамильтониане рассматривались осцилляторы с центром в начале координат, хотя естественнее было бы рассмотреть осцилляторы, равномерно расположенные на оси Ox . Если так сделать, то каждый осциллятор, имеющий сдвиг $x_n^{(0)}$ даст вклад в гамильтониан $-c_n x_n^{(0)} \hat{X}$, отвечающий постоянной силе, действующей на частицу. Суммарно этот вклад занулится, а сдвиг всего массива осцилляторов систему не изменит.

⁴среднее $\langle \zeta(t) \rangle$, естественно, зануляется.

В частности, в высокотемпературном пределе $\coth \frac{\beta\omega}{2} \approx \frac{2T}{\omega}$, и это выражение прямо пропорционально «диссипативному ядру» и температуре: $\langle \hat{\zeta}(t)\hat{\zeta}(t') \rangle \approx T\gamma(t-t')$. В общем случае несложно видеть, что их Фурье-гармоники связаны друг с другом, что выражает собой **флуктуационно-диссипационную теорему** (ФДТ).

В этом приближении, операторное уравнение устроено следующим образом:

$$\boxed{M \frac{d^2 \hat{X}}{dt^2} + \eta \frac{d\hat{X}}{dt} + \frac{\partial V(\hat{X})}{\partial X} = \hat{\zeta}(t)} \quad (27)$$

(член с γ в данном случае оказался эквивалентен обычному вязкому трению; в то время как $\hat{\zeta}(t)$ представляет собой флуктуирующую силу). Для выведения этого соотношения нужно обратить внимание на тонкость: дело в том, что полученный тут интеграл имеет вид $\int_0^t \delta(t)dt = \frac{1}{2}$ — дельта-функция стоит на краю области интегрирования, и поэтому даёт только половину. Если с этим обходиться аккуратнее, то нужно вспомнить, что спектр бани ограничен сверху некоторым числом ω_c , из-за чего эта дельта-функция имеет в действительности маленькую но конечную ширину ω_c^{-1} ; функция $\gamma(t)$ является по определению (18) строго чётной функцией времени; так что появление $1/2$ вполне обосновано.

Данное уравнение является главным результатом семинара. Мы рассмотрели микроскопическую модель квантовомеханической диссипативной системы, и получили операторное уравнение, описывающее динамику частицы. От «бани» пришли две важных части — диссипация, или трение, и флуктуирующая возмущающая коротко коррелированная сила $\hat{\zeta}(t)$, коррелятор которой специальным образом связан с трением.