Nem-markovi nyitott kvantumrendszerek

Diósi Lajos

Részecske- és Magfizikai Kutató Intézet, H-1525 Budapest 114, POB 49., Hungary

diosi@rmki.kfki.hu

1. Bevezetés: nyitott=redukált

Számtalan fizikai jelenség modellezhető nyitott dinamikai rendszerként. Gyakori eset, hogy maga a tanulmányozandó S rendszer (System) egy R tartállyal (Reservoir) áll kölcsönhatásban és *ettől* lesz dinamikailag nyitott. Dinamikája módosul, általában irreverzibilis, disszipatív, és nem-markovi lesz. A teljes S+R összetett rendszer zárt dinamikai rendszerként kezelhető és ρ_{SR} állapota reverzibilisen fejlődik. Kölcsönhatási képben a ρ_{SR} unitér fejlődését a H_{SR} kölcsönhatási operátor generálja:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_{SR}(t) = -i\left[H_{SR}(t)\;,\rho_{SR}(t)\right]. \tag{1}$$

Ebből származtathatjuk az S rendszer úgynevezett redukált állapotát:

$$\rho_S(t) = \mathrm{tr}_R \rho_{SR}(t), \tag{2}$$

és redukált dinamikáját. Ha a tartály saját dinamikája és csatolása a rendszerhez egyszerű szerkezetű, akkor a redukált dinamika jól számolható lesz. Ha feltételezzük, hogy a kezdeti $t = 0$ időpontban a rendszer és a tartály korrelálatlan volt, akkor a rendszer redukált dinamikája egy homogén nem-markovi mester-egyenlettel írható le [1]:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_S(t) = \int_0^t \mathrm{d}t'\mathcal{K}(t-t')\rho_S(t'), \tag{3}$$

melyet a rendszer kezdeti $\rho_S(0)$ állapotának ismeretében – elvileg – meg is oldhatunk. A $\mathcal{K}(t-t')$ memóriafüggvény alakját azonban csak speciális esetekben lehet zárt analitikus alakban felírni. Ha a rendszer saját dinamikája lassú a fenti memória karakterisztikus idejéhez képest, akkor az úgynevezett markovi közelítésben a mester-egyenlet sokkal egyszerűbb alakot vesz fel:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_S(t) = \mathcal{L}\rho_S(t). \tag{4}$$

Ez jelentős határeset. Alkalmazták klasszikusan Brown-mozgásra, majd kvantum-fizikában atomi spontán emisszióra, mag-spin relaxációra, transzportjelenségekre, szinte a teljes kvantumoptikára, kvantum-elektronikától a molekula-fizikáig és mondhatni mindenütt, ahol termális disszipáció (vagy újabb megközelítésben: dekoherencia) éri a kvantum-rendszert [2].

2. Kell mester-egyenlet?

A rendszer-tartály paradigmával modellezhető jelenségek száma és irodalma beláthatatlan. Jól látható azonban az a tendencia, hogy a redukált dinamika és a (3,4) mászter-egyenletek explicithasználatát a legtöbb alkalmazás elkerüli, és helyette közvetlenül a leírandó jelenségre koncentrál. Tipikus példa erre a válaszfüggvények Kubo-elmélete, az optika input-output formalizmusa, a sokfelé használt szóráselmélet, a Green-függvényes technikák. Ezek vélhetően az adott jelenség leírásának legmegfelelőbb technikái. De a fenti technikák közös nevezője a redukált dinamika, tehát a rendszer $\rho_S(t)$ állapotát fejlesztő mester-egyenlet. Ennek kifejezett felmutatása elmélyíti a fenti technikák megértését és emlékeztet a közös nevezőre. Segíti a különböző alkalmazások közötti átjárást. Segíthet új felfedezést.

Vegyük például az elektromos vezetés példáját fémben. Az elektron klasszikus fázistér-eloszlásának (4) markovi mester-egyenlete klasszikus Boltzmann-Fokker-Planck-egyenlet. Ha ismerjük az egyenletet és megoldását külső elektromos térben, levezethetjük az Ohm-törvényt és a vezetőképességet. Másrészt az elterjedt modern tárgyalás alapja a Kubo-egyenlet. Ez a külső tér és a keltett áram között létesít kapcsolatot, a vezetőképességet pedig közvetlenül az áram egyensúlyi korrelációs függvényéből származtatja. Megkerüli a redukált dinamika meghatározását és csak a szóbanforgó jelenség, az elektromos vezetés leírására koncentrál. Néhol azért találkozunk a Boltzmann- és Kubo-egyenletek tudatos egymásmellé-helyezésével is [3].

A redukált dinamikák markovi közelítése és annak (4) mászter-egyenlete jól ismert mind a matematikai szerkezet [4], mind a neki megfelelő fizika [2], mind a megoldási módszerek tekintetében. A markovi közelítésnek minden esetben a mester-egyenletes tárgyalás a legvilágosabb szemléleti alapja, ott is, ahol a gyakorlatban egyéb, célszerű technikát használnak. Ha azonban a markovi közelítés nem alkalmazható, akkor ilyen kategorikus kijelentés sem tehető a mester-egyenlet érdemeiről. A nem-markovi (3) mester-egyenletek struktúrája nincs kimerítőleg feltárva. A legtöbb nem-markovi mester-egyenlet bonyolult és gyakorlatban nem megoldható. Nem állítható tehát, hogy a redukált dinamikák kifejezett használata mindig előnyökre vezet a nem-markovi jelenségek leírásának eseti technikáihoz képest. Az előadás korlátozott célja, hogy ezen a nehéz területen felvillantson egy különösen ötletes módszert egyes nem-markovi redukált dinamikák mester-egyenletes kezelésére.

3. Nem-markovi

Álljon az R tartály $D(\omega)$ spektrális sűrűségű harmonikus módusokból, $b_\omega^\dagger, b_\omega$ keltő és eltüntető operátorokkal, és csatolódjon lineárisan az S rendszer valamely V mennyiségéhez:

$$H_{SR} = \int g_\omega \left(V^\dagger b_\omega + V b_\omega^\dagger\right) D(\omega) \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}. \tag{5}$$

A kezdeti állapot legyen korrelálatlan:

$$\rho_{SR}(0) = \rho_S(0)\rho_R(0), \tag{6}$$

ahol a rendszer kiinduló állapota tetszőleges, a tartályé viszont általában egyensúlyi kanonikus Gibbs-állapot. Az egyszerűség kedvéért a zérus hőmérsékletű esetet követjük végig. Keressük az $\rho_S(t)$-t fejlesztő redukált dinamikát illetve a vonatkozó egzakt mester-egyenletet. Tekintsük a tartály $F = \int g_\omega b_\omega D(\omega)\mathrm{d}\omega/2\pi$ terét, azt, amely lineárisan csatolódik a rendszer V mennyiségéhez. Kölcsönhatási képben ez a tér:

$$F(t) = \int g_\omega b_\omega e^{-i\omega t} D(\omega) \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}. \tag{7}$$

A tér várható értéke a tartály kezdeti állapotában eltűnik. Viszont az alábbi korrelációs függvénynek döntő szerep jut:

$$\alpha(\tau - s) = tr_R\left(F(\tau)F^\dagger(s)\rho_R(0)\right). \tag{8}$$

Ismeretes, hogy a *redukált dinamika kölcsönhatási képben csak ettől a korrelációs függvénytől függ*! Megjegyezhetjük, hogy ez a korrelációs függvény pedig a tartály csatolási erősséggel súlyozott $g_\omega^2 D(\omega)$ spektrális sűrűségének Fourier-transzformáltja.

A fenti korrelációs függvény általában bonyolult, és csak közelítő módszerekkel kezelhető módon határozza meg a keresett (3) redukált dinamikát. Kivétel, ha maga az S rendszer egyszerű, például kétállapotú, vagy maga is egy harmonikus oszcillátor. Ilyen esetekben a (3) mester-egyenlet kezelhető analitikus formát vesz fel. Természetesen a legfontosabb speciális eset a markovi.

4. Markovi

Gyakran az S rendszer releváns átmeneti frekvenciáihoz képest az R tartály spektruma széles, sima és egyenletes. Más megfogalmazásban: a tartály (8) korrelációs függvényét egy memóriaidő jellemzi, és ez sokkal rövidebb, mint a rendszer saját dinamikájának karakterisztikus idői. Ez a markovi határeset. Ebben az esetben tehát a tartály csatolással súlyozott spektrumát egyenletesnek, a tér korrelációs függvényét pedig delta-függvénynek vesszük:

$$g_\omega^2 D(\omega) = f^2 = \mathrm{const}, \qquad \alpha(\tau - s) = f^2\delta(\tau - s). \tag{9}$$

Megjegyezzük, hogy szokás az $\omega D(\omega)$ spektrális energiasűrűséget is használni, és a $g_\omega^2 \omega D(\omega) = f^2\omega$ frekvenciában lineáris alakot ohmikus spektrumnak nevezni az elektromos vezetőképesség úttörő elméletére utalva. Ismeretes, hogy a (9) markovi határesetben a (4) mester-egyenlet így néz ki:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_S = f^2\left(V\rho_S V^\dagger - \tfrac{1}{2}V^\dagger V\rho_S - \tfrac{1}{2}\rho_S V^\dagger V\right). \tag{10}$$

Egy ilyen egyenletnek a megoldása sok esetben analitikusan is lehetséges. Ha ez nem megy, akkor pedig egy különleges, kifejezetten a markovi mester-egyenletek megoldásaira szolgáló Monte-Carlo szimuláció használható [5].

Vegyünk egy markovi iskola-példát, melyre alább szükségünk lesz. Legyen maga az S rendszer egy ω_0 frekvenciájú A harmonikus oszcillátor, és csatolódjon a $V = a$ keltő-operátora egy markovi (ohmikus) tartályhoz. Ha a csatolás erőssége f, akkor a csillapított oszcillátor mester-egyenlete kölcsönhatási képben az alábbi formát veszi fel:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_A = f^2\left(a\rho_S a^\dagger - \tfrac{1}{2}a^\dagger a\rho_S - \tfrac{1}{2}\rho_S a^\dagger a\right). \tag{11}$$

A $\rho_A = |0; A\rangle\langle 0; A|$ alapállapot stacioner állapot. Ebben az állapotban a keltő- és eltüntető operátorok várható értéke zérus. Kiszámíthatjuk $a(t)$ és $a^\dagger(t)$ alapállapoti korrelációs függvényét kölcsönhatási képben. Csak az eredményt közlöm:

$$\exp[-i\omega_0(\tau - s) - \tfrac{1}{2}f^2|\tau - s|]. \tag{12}$$

5. Nem-markovi visszavezetése markovi-ra

Szakadjunk most el a markovi határesettől, és tekinsünk egy határozottan nem-markovi esetet, amely azonban bensőséges kapcsolatban áll a markovival. Legyen a spektrum Lorentz-típusú:

$$g_\omega^2 D(\omega) = g^2 \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2} \,. \tag{13}$$

Az ennek megfelelő korrelációs függvény exponenciálisan csillapodik:

$$\alpha(\tau - s) = g^2 \exp[-i\omega_0(\tau - s) - \tfrac{1}{2}\gamma|\tau - s|]. \tag{14}$$

Megmutatható, hogy ebben a lorentzi tartályban az S rendszer redukált dinamikája egzaktul megegyezik egy hipotetikus rendszer redukált dinamikájával egy megfelelő markovi tartályban [6].

Tekintsünk először egy hipotetikus tartályt, amely egyetlen ω_0 frekvenciájú A szolga-oszcillátorból (Ancilla) áll. Tegyük fel, hogy a lorentzi tartály helyett ez az egyetlen szolga-oszcillátor csatolódik az S rendszerhez:

$$H_{SA} = g\left(V^\dagger a + V a^\dagger\right). \tag{15}$$

Ez is egy rendszer-tartály kapcsolat, de most a tartály csak egyetlen oszcillátor, egyébként mindent úgy csinálhatunk, mint az S+R esetben tettük, de most az S+A jelölést használjuk. A (7) csatolt tér most egyszerűen $F = ga$. Kölcsönhatási képben kiszámoljuk a tér (8) korrelációs függvényét, amely triviális:

$$\langle 0; A|F(\tau)F^\dagger(s)|0; A\rangle = g^2 e^{-i\omega_0(\tau-s)}. \tag{16}$$

Ha ez a korrelációs függvény azonos *lenne* a (14) lorentzi csillapított korrelációs függvénnyel, akkor a korábban mondottak szerint a $\mathrm{tr}_A \rho_{SA}(t)$ redukált dinamika is azonos *lenne* a lorentzi tartályban keletkező redukált dinamikával. Az A szolga korrelációs függvénye azonban nem azonos a lorentzi-vel. De könnyen azonossá tehető! Hiszen láttuk, hogy ha a szolga-oszcillátort ohmikus tartályba rakjuk, akkor $f^2 = \gamma$ választással a korrelációs függvény éppen a kívánt exponenciális csillapító faktorral bővül (12). Világos tehát, hogy a lorentzi tartály hatása az S rendszerre egzaktul helyettesíthető egy markovi (ohmikus) tartályban csillapított szolga-oszcillátor hatásával.

Foglaljuk össze a módszert. Tekintsük az $S+A$ összetett rendszert és legyenek korrelálatlan kezdőállapotban:

$$\rho_S(0)|0; A\rangle\langle 0; A|. \tag{17}$$

Legyen a köztük levő csatolás H_{SA} (15). Az A szolga-oszcillátort csillapítsa egy ohmikus tartály. Ekkor az $\rho_{SA}(t)$ összetett állapot az alábbi markovi mester-egyenlet szerint fejlődik:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_{SA} = -ig\left[V^\dagger a + V a^\dagger \,,\, \rho_{SA}\right] + \gamma\left(a\rho_{SA}a^\dagger - \tfrac{1}{2}a^\dagger a\rho_{SA} - \tfrac{1}{2}\rho_{SA}a^\dagger a\right), \tag{18}$$

ahol a és V kölcsönhatási képbeli időfüggő operátorok. Ha megoldottuk ezt a kezdetiérték feladatot, akkor az A szolga-oszcillátort kiredukálva megkapjuk az S rendszer mindenkori állapotát:

$$\rho_S(t) = \mathrm{tr}_A \rho_{SA}(t). \tag{19}$$

Ezzel a módszerrel a lorentzi tartály nem-markovi hatását egy markovi (ohmikus) tartályéra vezettük vissza a szolga-oszcillátor közbeiktatásával.

A Lorentz-tartály jelentősége talán nem sokkal megy túl az ohmikus tartály nagyfrekvenciás (Drude-) regularizációján. De a módszert nem csak Lorentz-tartályra javasolták, hanem az úgynevezett fotonikus tiltott sávú anyagokra. Meglepő módon ugyanis a szolga-oszcillátoros módszer kis módosítással a fejjel lefelé vett Lorentz-spektrum, vagyis az ohmikus spektrumban levő Lorentz-alakú tiltott sáv kezelésére is alkalmas.

6. Záró megjegyzés

Az előadó kvantumos alapstruktúrák és jelenségek – mai szóval például a dekoherenca, még modernebben például a kvantuminformáció – kutatása során jutott el a nyitott rendszerekhez és mester-egyenleteikhez. Bevallottan nincs áttekintése ezek hatalmas irodalma fölött. Nem tartotta azt sem célszerűnek, hogy a hallgatóság figyelmét azoknak a módszereknek a felvillantásával szórja szét, amelyeknek kutatásához maga is próbált hozzájárulni. Ehelyett döntött úgy, hogy egyetlen konkrét – és ötletes – nem-markovi módszert kiragad és ismertet. A megadott referenciák is bár kiragadottak, de alkalmasak arra, hogy az érdeklődőt egy-két lépésben elvezessék a nem-markovi nyitott dinamikák további releváns tárgyalásaihoz.

Köszönetnyilvánítás: Geszti Tamás profeszor hívta fel figyelmem a [3] monográfiára. Munkám az OTKA T49384 támogatta.

Hivatkozások

[1] S. Nakajima, Progr. Theor. Phys. **20**, 948 (1958); R. Zwanzig, J. Chem. Phys. **33**, 1388 (1960).

[2] U. Weiss: *Quantum Dissipative Systems*, World Scientific, Singapore, 1999; H. Carmichael: *An Open System Approach to Quantum Optics*, Springer, Berlin, 1991; D. Giulini, E.Joos, C.Kiefer, J.Kupsch, I.-o. Stamatescu, H.D. Zeh: *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, Springer, Berlin, 1996; P. Pechukas, U. Weiss (eds.): *Quantum Dynamics of Open Systems*, Special Issue of Chem. Phys. **268**, 1 (2001); H.-P. Breuer, F. Petruccione: *The theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press, Oxford, 2002.

[3] lásd Chap.7.1. in G.D. Mahan: *Many-Particle Physics*, Plenum, New York, (1981).

[4] G. Lindblad, Commun. Math. Phys. **48**, 119 (1976); V. Gorini, A. Kossakowski, E.C.G. Sudarshan, J. Math. Phys. **17**, 821 (1976).

[5] R.Schack, T.A. Brun, Comp. Phys. Comm. **102**, 210 (1997);

[6] A. Imamoğlu, Phys. Rev. **A50**, 3650 (1994); P. Stenius, A. Imamoğlu, Quant. Semiclass. Opt. **8** 283 (1996); B.M. Garraway, Phys. Rev. **A55**, 2290 (1997); S. Bay, P. Lambropoulos, K. Mølmer, Phys. Rev. **A57**, 3065 (1998).