ЛЕКЦИЯ #15
ТЕОРИЯ РЕЛАКСАЦИИ

§ 15.1 Матрица плотности

◆ Во многих случаях при построении модели квантовой системы S, взаимодействующей с электромагнитным полем, необходимо также учитывать ее взаимодействие с окружением E, которое рассматривается как система с неопределенно большим числом степеней свободы. Поскольку в общем случае ВФ системы $S+E$ не распадается на произведение ВФ подсистем S и E, приписать подсистеме S состояние как вектор гильбертова пространства невозможно. Для формулировки замкнутого описания эволюции системы, взаимодействующей с окружением, необходимо использовать формализм матрицы плотности.

◆ *Матрицей плотности* $\hat{\rho}$ замкнутой квантовой системы в счетном базисе $\{\varphi_n\}$ называется эрмитова матрица с элементами ρ_{mn}, обладающая свойствами

$$\mathrm{Sp}\,\hat{\rho} \equiv \sum_n \rho_{nn} = 1, \quad \rho_{nn} \geq 0 \quad (\forall n). \tag{1}$$

Последнее свойство должно выполняться в любом базисе, что влечет неравенство

$$|\rho_{mn}|^2 \leq \rho_{mm}\rho_{nn} \quad (\forall m,n). \tag{2}$$

Если $\hat{Z}$ - произвольный оператор, имеющий в базисе $\{\varphi_n\}$ матричные элементы Z_{mn}, то среднее значение физической величины Z в состоянии с матрицей плотности $\hat{\rho}$ дается формулой

$$\overline{Z} = \sum_{m,n} Z_{mn}\rho_{nm} \equiv \mathrm{Sp}\left(\hat{Z}\hat{\rho}\right). \tag{3}$$

Эта величина не зависит от выбора базиса.

◆ Состояния, в которых матрица плотности удовлетворяет соотношению

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}, \tag{4}$$

называются *чистыми*; таким состояниям может быть сопоставлена ВФ. Компоненты P, Q и R вектора Блоха двухуровневой системы (см. §11.3) связаны с элементами матрицы плотности чистого состояния соотношениями

$$\rho_{11} = \frac{1+R}{2}, \quad \rho_{12} = \frac{P+iQ}{2}, \quad \rho_{22} = \frac{1-R}{2} \tag{5}$$

Эти соотношения мы будем в дальнейшем использовать как определения компонент вектора Блоха двухуровневой системы и в смешанных состояниях.

◆ Для описания эволюции системы следует принять, что уравнение движения для матрицы плотности системы с гамильтонианом $\hat{H}$ имеет вид

$$i\hbar\frac{d\hat{\rho}}{dt}=\left[\hat{H},\hat{\rho}\right]. \tag{6}$$

Если в качестве базиса $\{\varphi_n\}$ используются собственные функции гамильтониана $\hat{H}$, (матрица гамильтониана диагональна), то уравнение $(\dot{\rho})$ решается элементарно:

$$\rho_{mn}(t)=\rho_{mn}(0)\exp(-i\omega_{nm}t). \tag{7}$$

В частности, диагональные матричные элементы, определяющие вероятности найти систему в состоянии φ_n, постоянны.

☆ Пусть на двухуровневую систему $\hat{H}$ наложено постоянное возмущение $\hat{V}$, так что матрица гамильтониана в базисе $\{\varphi_n\}$ имеет вид

$$\hat{H}=\begin{vmatrix}\omega_1 & V\\ V & \omega_2\end{vmatrix}.$$

Найти для этой системы зависимость $\rho_{mn}(t)$.

§ 15.2 *Усреднение закона движения матрицы плотности: неоднородное уширение*

◆ Формализм матрицы плотности открывает путь к вычислению законов эволюции наблюдаемых подсистемы. Следует решить уравнения для матрицы плотности $\rho(t)$ для системы $S+E$ и усреднить найденное решение по переменным, относящимся к подсистеме E. Оставшееся выражение для $\rho_S(t)$ позволяет вычислить все наблюдаемые величины, относящиеся к подсистеме S. Такая программа может быть реализована только в самых простых случаях.

◆ Рассмотрим простейший пример - двухуровневую подсистему S, находящуюся в контакте с окружением E, взаимодействие с которым имеет только диагональные матричные элементы, изменяющие частоту перехода ω_{21}. Уравнения движения для элементов матрицы плотности имеют вид

$$i\frac{d\rho_{11}}{dt}=0,\quad i\frac{d\rho_{22}}{dt}=0, \tag{8}$$

$$i\frac{d\rho_{12}}{dt}=\omega_{12}\rho_{12}+\Delta_N\rho_{12}.$$

Величина сдвига уровней $\Delta_N = V_{11,N} - V_{22,N}$ зависит от того, в каком состоянии Ψ_N находится окружение E. Уравнения для медленных компонент вектора Блоха имеют вид

$$\dot{u} = -\Delta v, \quad \dot{v} = \Delta u, \quad \dot{w} = 0. \tag{9}$$

Их решения

$$u = u_0 \cos\Delta t - v_0 \sin\Delta t, \quad v = v_0 \cos\Delta t + u_0 \sin\Delta t, \quad w = w_0. \tag{10}$$

Пусть распределение $g(\Delta)$ можно считать непрерывным (это важно!) и заданным, например, функцией

$$g(\Delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\delta^2}} \exp\left(-\frac{\Delta^2}{2\delta^2}\right). \tag{11}$$

Усредняя решение $u(\Delta, t)$ по распределению $g(\Delta)$, получаем

$$\overline{u}(t) = u_0 \exp\left(-\frac{\delta^2 t^2}{2}\right). \tag{12}$$

Таким образом, средний по ансамблю вектор поляризации системы убывает со временем. Закон убывания зависит от деталей формы распределения $g(\Delta)$, но в целом скорость релаксации Γ примерно равна ширине спектрального распределения $g(\Delta)$. Воздействие окружения на нулевой частоте (заданное постоянными матричными элементами) ведет к затуханию средних значений недиагональных компонент матрицы плотности, связанных с поперечными компонентами вектора Блоха. Это явление называется *поперечной релаксацией*.

★ Рассмотренная выше модель применима к описанию доплеровского уширения линий в газах, если в качестве "окружения" рассматривать поступательные степени свободы излучающих атомов (молекул). Распределение частот имеет гауссов вид с шириной

$$\delta_D = \omega_{21} \sqrt{\frac{kT}{Mc^2}}$$

где M - масса атома. Для комнатной температуры ($T = 300$ K, $kT = 4.14 \cdot 10^{-14}$ эрг) и $M = 40 m_p$ имеем $\delta_D = 4.4 \cdot 10^{-6} \omega_{21}$. В оптическом диапазоне ($\omega_{21} \sim 3 \cdot 10^{15}$ с$^{-1}$) доплеровская ширина линии $\delta_D \sim 10^{10}$ с$^{-1}$.

§ 15.3 Построение уравнений для матрицы плотности подсистемы: общая схема

◆ Практически рецепт усреднения закона движения матрицы плотности системы по состояниям окружения, использованный в § 15.2, мало эффективен. В гамильтониане системы может быть порядка 10^{23} переменных, и решить уравнения для матрицы плотности не удастся. Более эффективным является способ получения приближенных уравнений для элементов матрицы плотности подсистемы, в которой взаимодействие с окружением учтено некоторыми эффективными константами.

★ Это переносит в квантовую теорию хорошо известные в классической механике методы построения уравнений эволюции систем с диссипацией: простейший пример - линейный осциллятор с вязким трением с уравнением движения

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0.$$

◆ Опишем вкратце схему получения уравнений для матрицы плотности подсистемы. Далее мы полагаем $\hbar \equiv 1$. Пусть исходная система имеет гамильтониан

$$\hat{H} = \hat{H}_S(q) + \hat{H}_E(Q) + \hat{U}_{SE}(q,Q). \tag{13}$$

Для нее можно ввести матрицу плотности $\hat{\sigma} = \sigma_{ik,MN}$ (малые индексы нумеруют состояния базиса S, большие - E). Если в качестве базиса взять стационарные состояния гамильтонианов подсистем S и E, то удобно работать в представлении взаимодействия:

$$\tilde{\sigma} = \exp i(H_S + H_E)t \cdot \hat{\sigma} \cdot \exp - i(H_S + H_E)t. \tag{14}$$

Уравнение движения для матрицы плотности системы принимает вид

$$\frac{d\tilde{\sigma}}{dt} = -i\left[\tilde{U}, \tilde{\sigma}\right], \tag{15}$$

где $\tilde{U}$ есть оператор взаимодействия подсистем S и E, взятый в представлении взаимодействия. Превращение этого уравнения в уравнение движения для матрицы плотности $\hat{\rho}$ подсистемы S ($\hat{\rho}_{ik} = \mathrm{Sp}_E \hat{\sigma}$) составляет основу первого приближения теории релаксации. Ниже излагается общая схема такого вывода: детали расчетов приведены в [Ф72, с.123-136; А77, с.190-200].

🕮 [Ф72] - Файн В.М. Квантовая радиофизика. Том 1. Фотоны и нелинейная оптика. - М.: "Сов. Радио", 1972. - 472 с.

🕮 [А77] - Апанасевич П.А. Основы теории взаимодействия света с веществом. - Минск, "Наука и техника", 1977. - 496 с.

◆ При рассмотрении релаксации мы не учитываем влияние внешнего поля F_1, предполагая, что его можно добавить непосредственно в усредненные уравнения. Такой подход оправдан, если влияние внешнего поля на систему достаточно мало в том смысле, что слабо сказывается на взаимодействии системы с термостатом.

◆ Основные этапы преобразования таковы.

❶. Уравнение для эволюции в представлении взаимодействия представляется в интегральной форме,

$$\tilde{\sigma} = -i\int\left[\tilde{U}(t'),\tilde{\sigma}(t')\right]dt', \qquad (16)$$

Это выражение подставляется в правую часть уравнения движения для матрицы плотности системы:

$$\frac{d\tilde{\sigma}}{dt} = -\int\left[\tilde{U}(t),\left[\tilde{U}(t'),\tilde{\sigma}(t')\right]\right]dt. \qquad (17)$$

В результате под интегралом возникают билинейные по матричным элементам оператора взаимодействия $\tilde{U}$ члены, которые удобно оценивать и усреднять.

❷. Проводится факторизация матрицы плотности системы на произведение матриц плотности подсистемы и окружения: $\tilde{\sigma} = \tilde{\rho}\cdot\tilde{P}$. Вводится постулат о том, что матрица плотности окружения - термостата $\tilde{P}$ известна, не зависит от состояния рассматриваемой подсистемы S и имеет диагональную форму:

$$P_{MN} = w_N \delta_{MN}. \qquad (18)$$

❸. Проводится усреднение интегро-дифференциального уравнения по состояниям термостата $(\hat{\rho}_{ik} = \mathrm{Sp}_E\hat{\sigma})$.

❹. Вводится приближение случайных фаз: в правой части под интегралом сохраняются только члены с “авторезонансными” экспонентами.

❺. Принимается, что корреляции матричных элементов оператора взаимодействия затухают быстро в сравнении со скоростью изменения матричных элементов матрицы плотности. Это позволяет превратить интегро - дифференциальное уравнение в дифференциальное с постоянными коэффициентами.

★ Напоминание из нелинейной динамики. Система с памятью о прошлом обладает бесконечным числом степеней свободы. Именно в этом месте происходит редукция системы с неопределенно большим числом степеней свободы к системе с конечным их числом (типа двухуровневой).

★ Рассмотрим пример. Если в качестве термостата выступает фононная подсистема (колебания решетки кристалла), то время затухания корреляций можно оценить как период колебаний с максимальной - дебаевской - частотой: $\tau \sim \omega_D^{-1} \sim 10^{-13}$ с. Характерную скорость изменения матричных элементов можно оценить частотой Раби: $\dot{\rho}/\rho \sim \Omega_s \sim 10^{12}$ с$^{-1}$. Таким образом, в стандартных условиях неравенство $\tau(\dot{\rho}/\rho) << 1$ выполняется, но с небольшим запасом.

EOL ☯