Моделирование немарковской динамики диполь-дипольно взаимодействующих атомов

В.В. Семин[1], А.В. Павельев[1]

[1]Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

Аннотация. В работе исследуется динамика системы двух диполь-дипольно взаимодействующих атомов в марковском и немарковском приближениях с помощью численного решения стохастического уравнения Шредингера (СУШ). Показано существенное влияние немарковских шумов на динамику системы в виде осцилляций вероятностей обнаружить систему во втором и третьем энергетическом состоянии.

1. Введение

Модели открытых квантовых систем могут быть разделены на два класса: марковские и немарковские [1]. Марковское приближение характеризуется тем, что динамика системы в конкретный момент времени зависит только от своего состояния в предшествующий момент времени. Немарковское же приближение определяется тем, что существует зависимость динамики системы от ее состояний в прошлом. Марковское приближени связано с исчезающе малым временем релаксации окружения. В данном случае считается, что состояние окружения всегда одинаково. В немарковском случае время релаксации окружения не считается малым и им нельзя пренебречь. В подобных сценариях может наблюдаться значительное изменение всей эволюции системы [2].

Большой интерес представляет исследование динамики системы, состоящей из двух атомов, которые диполь-дипольно взаимодействуют друг с другом. Однако в немарковском случае решение операторно-кинетического уравнения для этой системы представляет определенные трудности. В связи с этим, для решения применяются либо теория возмущений, либо непертурбативные, но асимптотические методы, как в статье [3].

В данной работе мы предлагаем описание эволюции этой системы с помощью модификации стохастического уравнения Шредингера, а также представляем результаты численного моделирования динамики в марковском и немарковском приближении и обсуждаем разницу между ними.

2. Модель

Рассмотрим гамильтониан системы из двух двухуровневых атомов в несвязанных термостатах:

$$H = \hbar\omega_0 \sum_p \sigma_p^z + \hbar \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \hbar \sum_{k,p} \left(g_{kp} b_k \sigma_p^+ g_k p^* b_k^\dagger \sigma_p^- \right) + \sum_{p \neq p'} V_{pp'} \sigma_p^+ \sigma_p^-, \tag{1}$$

где ω_0 — частота переходов в атоме, σ_p^z — диагональный генератор группы энергетического спина, ω_k — частота k-ого фотона $b_k^\dagger, b_k+$ — операторы рождения и уничтожения k-ого фотона, g_{kp} — константа взаимодействия атома и термостата, $\sigma_p^\mp$ — понижающие и повышающие операторы, $V_{pp'}$ — некоторая постоянная диполь-дипольного взаимодействия.

После перехода в представление взаимодействия и подстановки гамильтониана в квантовое уравнение Лиувилля, а также после отбрасывания члена, отвечающего за лэмбовский сдвиг, получаем следующее операторное кинетическое уравнение [4]:

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\imath\Omega\left[\sigma_1^+\sigma_2^- + \sigma_2^+\sigma_1^-, \rho\right] - \frac{\gamma_0}{2}\left(\sigma_1^+\sigma_1^-\rho - 2\sigma_1^-\rho\sigma_1^+ + \rho\sigma_1^+\sigma_1^-\right) \\ -\frac{\gamma_0}{2}\left(\sigma_2^+\sigma_2^-\rho - 2\sigma_2^-\rho\sigma_2^+ + \rho\sigma_2^+\sigma_2^-\right), \tag{2}$$

где Ω — параметр характеризующий диполь-дипольное взаимодействие атомов, γ_0 — скорость затухания, ρ — искомая матрица плотности размерности 4×4. Операторы вида σ_x^+, σ_x^- имеют следующий явный вид:

$$\sigma_1^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_1^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_2^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_2^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Два двухуровневых атома в сумме имеют четыре энергетических уровня. Уровень системы, который соотвествует нахождению обоих атомов в возбужденном состоянии будем дальше называть верхним, или первым; уровень, который соответсвует стационарным состояниям атомов — нижним или основным; второй и третий уровни отвечают за случай, когда один атом возбужден, а другой нет.

2.1. Марковская динамика

Стандартная процедура распутывания (unravelling) для уравнения 2 приводит к стохастическому уравнению Шредингера следующего вида:

$$\mathrm{d}\left|\psi\right\rangle = -\imath\Omega\sigma_1^+\sigma_2^-\left|\psi\right\rangle\mathrm{d}t - \imath\Omega\sigma_2^+\sigma_1^-\left|\psi\right\rangle\mathrm{d}t - \frac{\gamma_0}{2}\sigma_1^+\sigma_1^-\left|\psi\right\rangle\mathrm{d}t - \frac{\gamma_0}{2}\sigma_2^+\sigma_2^-\left|\psi\right\rangle\mathrm{d}t \\ +\imath\sqrt{\gamma_0}\sigma_1^-\left|\psi\right\rangle\mathrm{d}W_1 + \imath\sqrt{\gamma_0}\sigma_2^-\left|\psi\right\rangle\mathrm{d}W_2, \tag{4}$$

где $\left|\psi\right\rangle$ — четырехкомпонентный вектор состояний, который связан с матрицей плотности следующим образом $\rho = \mathbb{E}\left(\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|\right)$, где $\mathbb{E}$ обозначает стохастическое усреднение по множеству реализаций; $\mathrm{d}W_i$ — инкремент стандартного винеровского процесса. Можно переписать это уравнение в более простом виде, объединяя все члены при $\mathrm{d}t$ и $\mathrm{d}W_i$:

$$\mathrm{d}\left|\psi\right\rangle = A\left|\psi\right\rangle\mathrm{d}t + B\left|\psi\right\rangle\mathrm{d}W_1 + C\left|\psi\right\rangle\mathrm{d}W_2. \tag{5}$$

2.2. Немарковская динамика

Для построения немарковской эволюции системы, А. Барчелли в работе [5] предложил заменить марковские винеровские процессы $\mathrm{d}W_i$ на немарковские шумы. Для описания немарковской релаксации хорошо подходит процесс Орнштейна-Уленбека, который удовлетворяет следующему стохастическому уравнению:

$$\mathrm{d}X = -kX + \mathrm{d}W, \tag{6}$$

где k — постоянная, отвечающая за характерное время релаксации окружения. После подстановки выражения 6 в уравнение 5, получаем уравнение для немарковского процесса:

$$\mathrm{d}\left|\hat{\psi}\right\rangle = A\left|\hat{\psi}\right\rangle \mathrm{d}t + B\left|\hat{\psi}\right\rangle(-k_1X_1)\,\mathrm{d}t + B\left|\hat{\psi}\right\rangle dW_1 + C\left|\hat{\psi}\right\rangle(-k_2X_2)\,\mathrm{d}t + C\left|\hat{\psi}\right\rangle dW_2. \quad (7)$$

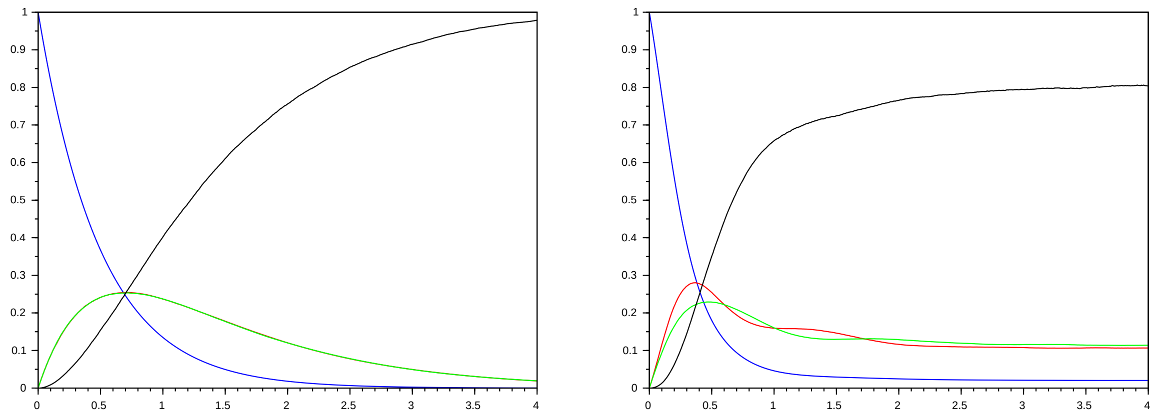
Однако, это уравнение необходимо несколько модифицировать, поскольку оно не является мартингалом и, следовательно, не сохраняет нормировку. После модификации окончательное уравнение для немарковского процесса будет иметь вид:

$$\mathrm{d}\left|\hat{\psi}\right\rangle = A\left|\hat{\psi}\right\rangle \mathrm{d}t + \left(B + B^{\dagger}\right)\left|\hat{\psi}\right\rangle(-k_1X_1)\,\mathrm{d}t + B\left|\hat{\psi}\right\rangle dW_1 + \left(C + C^{\dagger}\right)\left|\hat{\psi}\right\rangle(-k_2X_2)\,\mathrm{d}t + C\left|\hat{\psi}\right\rangle dW_2. \quad (8)$$

Также очевидно, что $\rho = \mathbb{E}\left(|\psi\rangle\langle\psi|\right)$ является полностью положительным оператором, что является одним из главных достоинств метода описания динамики квантовой системы с помощью стохастического уравнения Шредингера.

3. Результаты моделирования

Полученные марковское 5 и немарковское 8 уравнения были решены численно с помощью прямого алгоритма Эйлера [6]. Для марковского уравнения имеем четыре связанных уравнения с четырьмя неизвестными и двумя нескоррелированными шумами, а для немарковского к этим неизвестным добавляется две компоненты $X_{1,2}$ немарковского шума. Такой подход аналогичен подходу, примененному в работах [7] и [8]. Начальные условия выбраны как $\left|\hat{\psi}\right\rangle = (1,0,0,0)^{\mathrm{T}}$, постоянные взаимодействия и затухания $\Omega = 2.3, \gamma_0 = 1, k_1 = 0.8, k_2 = 1.6$. Временной промежуток — 4 с. Усреднение проводилось по 50000 траекториям. Максимальная относительная погрешность составила не более 0.9% На рисунке 1 представлены результаты моделирования марковской (а) и немарковской (б) динамики.



а) б)

Рисунок 1. Результаты численного моделирования

На рисунке 1 синяя линия отвечает верхнему состоянию, черная нижнему, а зеленая и красная — второму и третьему. В марковском случае вероятности найти систему во втором или третьем состоянии в любой момент времени равны. В немарковском случае наблюдаются значительные колебания вероятностей для второго и третьего энергетических уровней, при этом колебания находятся как бы в противофазе. Кроме того, смещаются стационарные состояния для всех четырех компонентов. Это и является следствием немгновенной релаксации окружения. Когда один из термостатов изменяет свое состояние, энергия одного из атомов меняется, и в следствие диполь-дипольного взаимодействия "перекачивается"из атома с большей энергией в атом с меньшей. Амплитуда этих колебаний уменьшается со временем, и система приходит к стационарному состоянию.

4. Заключение

В данной работе были получены стохастические уравнения Шредингера для марковской и немарковской релаксации системы из двух диполь-дипольно взаимодействующих атомов. Было проведено численное моделирование полученный уравнений и сравнение результатов. Показано, что учет немарковости окружения вносит значительные изменения в характер динамики системы и стационарное состояние.

5. Литература

[1] Breuer, HP. The theory of open quantum systems / HP. Breuer, F. Petruccione — Oxford: Oxford University Press, 2002. — 640 p.
[2] Vega, I. Dynamics of non-Markovian open quantum systems / I. Vega, D. Alonso // Rev. Mod. Phys. — 2017. — Vol. 89. — P. 15001.
[3] Li Y. Effect of the dipole-dipole interaction for two atoms with different couplings in a non-Markovian environment / Y. Li, J. Zhou and H. Guo // Phys. Rev. A — 2009. — Vol. 79(1). — P. 012309.
[4] Semin, V. Calculation of the fluorescence spectrum of two interacting atoms in external field / A.V. Gorokhov, V.V. Semin // Optics and Spectroscopy, 2009. — Vol. 107(4). — P. 586.
[5] Barchielli, A. Quantum Trajectories and Measurements in Continuous Time / A. Barchielli, M. Gregoratti — Berlin: Springer, 2009. — 325 p.
[6] Platen, E. Numerical Solution of Stochastic Differential Equations with Jumps in Finance / E. Platen, N. Bruti-Liberati — Berlin: Springer, 2010. — 856 p.
[7] Semina, I. Stochastic Schr?dinger Equations for Markovian and non-Markovian Cases / I. Semina, V. Semin, F. Petruccione, A. Barchielli // Open Systems & Information Dynamics, 2014. — Vol. 21(01n02). — P. 1440008.
[8] Semin, V. Stochastic Non-Markovian Schroedinger equation for a three-level quantum system / V. Semin, A. Pavelev // Proceedings of the Mathematical Modeling Session at the International Conference Information Technology and Nanotechnology (MM-ITNT 2017), 2017. — pp. 263-265.

Simulation of non-Markovian dynamics of dipole-dipole interacting atoms

V.V. Semin[1], A.V. Pavelev[1]

[1]Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

Abstract. Markovian and non-Markovian dynamics of two dipole-dipole interacting atoms is studied with the help of stochastic Schroedinger equation (SSE). It is shown that the non-Markovian effects are appeared in the form of oscillations of probabilities to find the systems in the entanglement states.

Keywords: non-Markovian dynamics, stochastic Schrödinger equation, dipole-dipole interaction.