

УДК 535.14

## КВАНТОВАЯ НЕМАРКОВСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В СИСТЕМЕ ДВУХУРОВНЕВЫХ АТОМОВ

*В.В. Семин, А.В. Горохов*

### Аннотация

В статье рассмотрена система двух взаимодействующих двухуровневых атомов. В приближении короткой памяти получено немарковское операторно-кинетическое уравнение, на основе решения которого построен контур линии излучения для рассматриваемой системы.

**Ключевые слова:** операторно-кинетическое уравнение, немарковская релаксация, система двухуровневых атомов, контур линии излучения.

---

### Введение

Явления декогеренции и диссипации в динамике открытых квантовых систем часто моделируются с помощью стандартной техники теории квантовых марковских процессов, в которых матрица плотности открытой системы управляется операторным кинетическим уравнением с линдбладовской структурой [1]. Однако при описании сложных квантово-механических систем во многих важных случаях мы сталкиваемся со сложным немарковским поведением, такие системы не могут быть описаны посредством стандартных методов.

Классическим примером марковского процесса является броуновское движение малых частиц, взвешенных в жидкости или газе. Действительно, для достаточно длительного времени наблюдения координаты и скорость броуновской частицы не зависят от значения координат и скорости в предыдущий момент времени. Однако при уменьшении времени наблюдения становятся заметными процессы ускорения и торможения частицы [2], что свидетельствует о немарковости процесса броуновского движения для коротких времен наблюдения.

Целью настоящей работы является получение немарковского кинетического уравнения двух идентичных диполь-дипольно взаимодействующих двухуровневых атомов в приближении короткой памяти.

На основе решения полученного уравнения строится контур спектральной линии для системы двух идентичных диполь-дипольно взаимодействующих двухуровневых атомов.

Традиционно для вывода кинетических задач используют подход квантовой теории открытых систем [3], при этом ключевым является предположение о марковости процесса взаимодействия атомов со своим окружением, то есть пренебрежение эффектами памяти. Известные из литературы немарковские кинетические уравнения не лишены недостатков, наиболее общее уравнение Накашима – Цванцига [4] представляет, скорее, формальный интерес, поскольку его невозможно разрешить, уравнения же других типов являются либо справедливыми лишь для очень узкого класса процессов [5], либо феноменологическими [6], эффекты памяти в которых описываются введением дополнительных множителей в уравнение Линдблада [1].

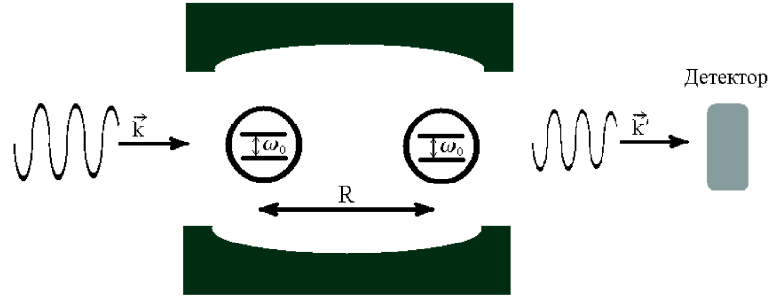


Рис. 1. Модель двух двухуровневых атомов в термостате

### 1. Модель и операторно-кинетическое уравнение

В рамках квантовой теории релаксации [7] рассматриваемую квантовую систему делят на две взаимодействующие подсистемы: большую (диссипативную) и малую (динамическую). Диссипативная система (термостат) моделируется бесконечным набором невзаимодействующих гармонических осцилляторов, находящихся в термодинамическом равновесии, характеризуемом температурой  $T$ . С помощью подходящей процедуры «исключения» переменных термостата получают уравнения для переменных динамической подсистемы, в которых влияние окружения учитывается через средние значения переменных термостата по соответствующему равновесному распределению.

Рассмотрим два идентичных диполь-дипольно взаимодействующих двухуровневых атома в тепловом резервуаре на расстоянии  $R$  друг от друга (см. рис. 1). На систему падает волна накачки с волновым вектором  $\mathbf{k}$ , которая индуцирует дипольные моменты у атомов и атомы начинают взаимодействовать диполь-дипольным образом, после чего волна накачки затухает. Нас интересуют спектральные свойства света излученного системой.

Гамильтониан такой системы запишем в виде:

$$H = H_A + H_T + H_{\text{int}} + H_{AA} + H_{AF}. \quad (1)$$

Здесь

$H_A = \hbar\omega_0 \sum_p \sigma_p^z$  – гамильтониан свободных атомов,  $\omega_0$  – частота переходов в атоме,  $\sigma_p^z$  – диагональный генератор группы  $SU(2)$  – группы энергетического спина;

$H_T = \hbar \sum_k \omega_k b_k^+ b_k$  – гамильтониан термостата (теплового резервуара),  $\omega_k$  – частота  $k$ -го фотона,  $b_k^+$  и  $b_k$  – операторы рождения и уничтожения  $k$ -го фотона;

$H_{\text{int}} = \hbar \sum_{k,p} (g_{kp} b_k \sigma_p^+ \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_p) + \text{h.c.})$  – гамильтониан взаимодействия атома и термостата,  $g_{kp}$  – константа взаимодействия атома с термостатом,  $\sigma_p^\pm$  – повышающий и понижающий атомные операторы,  $\mathbf{R}_p$  – радиус-вектор  $p$ -го атома.

$H_{AA} = \sum_{p \neq p'} V_{pp'} \sigma_p^+ \sigma_{p'}^-$  – гамильтониан диполь-дипольного взаимодействия,  $V_{pp'}$  – константа диполь-дипольного взаимодействия.

$H_{AF} = \hbar \sum_p (\xi_p(t) \sigma_p^+ + \text{h.c.})$  – гамильтониан взаимодействия атома и поля, где  $\xi_p(t) = \xi_0 \exp(i\mathbf{R}_p \mathbf{k} - i\omega t)$  пропорциональна амплитуде поля и определяет частоту Раби  $2\xi_0$  для атомного перехода.

Путем итерирования по константам взаимодействия атомов и термостата из квантового уравнения Лиувилля с гамильтонианом (1) легко получается следующее интегро-дифференциальное уравнение [8]

$$\frac{\partial \rho_{AT}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H_{AA}(t), \rho_{AT}(t)] - \frac{i}{\hbar}[H^I(t), \rho_{AT}(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t [H^I(t), [H^I(t-t'), \rho_{AT}(t-t')]] dt', \quad (2)$$

где  $H^I(t)$  – гамильтониан взаимодействия, в котором мы перешли в представление взаимодействия,  $\rho_{AT}$  – матрица плотности атома и термостата.

Поскольку мы интересуемся динамикой только атомной подсистемы, возьмем след по переменным термостата; будем предполагать, что состояния термостата распределены по некоррелированной тепловой смеси состояний, тогда средние значения переменных термостата будут [8]

$$\begin{aligned} \langle b_j \rangle &= \langle b_j^+ \rangle = 0, \\ \langle b_j b_{j'}^+ \rangle &= (N+1)\delta_{jj'}, \\ \langle b_j^+ b_{j'} \rangle &= N\delta_{jj'}, \\ \langle b_j^+ b_{j'}^+ \rangle &= \langle b_j b_{j'} \rangle = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $N = \left[ \exp\left(\frac{\hbar\omega_j}{k_b T}\right) - 1 \right]^{-1}$  – среднее число бозонов в резервуаре на частоте  $\omega_j$  при температуре  $T$ ,  $k_b$  – постоянная Больцмана.

Так как термостат является протяженной системой со множеством степеней свободы, можно предположить, что никакие изменения, происходящие с динамической подсистемой, не могут заметным образом изменить состояние термостата (приближением необратимости для матрицы плотности), то есть  $\rho_{AT}(t') = \rho_A(t') \otimes \rho_T(0)$ . Уравнение (2) совместно с (3) сводится к уравнению, которое описывает только динамическую систему, влияние термостата учитывается через средние значения (3).

Предположим [9], что  $t' \ll t$ , то есть время наблюдения за системой значительно больше, чем характерный временной интервал памяти. Тогда мы можем разложить в ряд матрицу плотности под интегралом и ограничимся только двумя членами:

$$\rho(t-t') = \rho(t) - \frac{\partial \rho}{\partial t} t'. \quad (4)$$

Первое слагаемое в этом разложении соответствует марковскому приближению, уравнение для которого хорошо известно [10], второе слагаемое учитывает появление кратковременной памяти.

Подставляя (4) в уравнение (2), с учетом всего вышесказанного после достаточно громоздких преобразований для  $N = 0$  получим следующее операторно-кинетическое уравнение:

$$\dot{\rho} = i[H_{AA}, \rho(t)] + \widehat{L}_M \rho(t) + \widehat{L}_{NM} \frac{\partial \rho}{\partial t}, \quad (5)$$

где  $\widehat{L}_M$  и  $\widehat{L}_{NM}$  – супероператоры, описывающие марковскую и немарковскую релаксацию соответственно.

К сожалению, методы отыскания аналитических решений данного уравнения не известны, поэтому в работе [9] было предложено заменить производную в правой части марковским членом, что является подобием TCL-метода проекционного оператора [5]. В результате получаем:

$$\begin{aligned} \dot{\rho} = & i \sum_{p \neq p'} [\sigma_p^+ \sigma_{p'}^-, \rho(t)] g_{pp'} - \sum_{pp'} \frac{\gamma_{pp'}}{2} (\rho \sigma_p^+ \sigma_{p'}^- + \sigma_p^+ \sigma_{p'}^- \rho - \sigma_{p'}^- \rho \sigma_p^+) + \\ & + \frac{i}{4} \sum_{ii'pp'} \gamma_{ii'} \frac{\partial \gamma_{pp'}}{\partial \omega} \left( -2(\sigma_{p'}^+ \sigma_p^- \sigma_{i'}^- \rho \sigma_{i'}^+ - \sigma_{i'}^- \rho \sigma_{p'}^+ \sigma_p^+ \sigma_{i'}^-) + [\sigma_{i'}^+ \sigma_{i'}^- \sigma_p^+ \sigma_p^-, \rho] \right), \quad (6) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} g_{12} = g_{21} = & \frac{3\gamma_0}{4} \left\{ -[\mathbf{m}_1 \mathbf{m}_2 - (\mathbf{m}_1 \mathbf{e}_R)(\mathbf{m}_2 \mathbf{e}_R)] \frac{\cos(kR)}{kR} + \right. \\ & \left. + [\mathbf{m}_1 \mathbf{m}_2 - 3(\mathbf{m}_1 \mathbf{e}_R)(\mathbf{m}_2 \mathbf{e}_R)] \left( \frac{\sin(kR)}{(kR)^2} + \frac{\cos(kR)}{(kR)^3} \right) \right\}, \\ \gamma_{11} = \gamma_{22} = & \gamma_0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \gamma_{12} = \gamma_{21} = & \gamma_0 \cdot \frac{3}{2} \left\{ [\mathbf{m}_1 \mathbf{m}_2 - (\mathbf{m}_1 \mathbf{e}_R)(\mathbf{m}_2 \mathbf{e}_R)] \frac{\sin(kR)}{kR} + \right. \\ & \left. + [\mathbf{m}_1 \mathbf{m}_2 - 3(\mathbf{m}_1 \mathbf{e}_R)(\mathbf{m}_2 \mathbf{e}_R)] \left( \frac{\cos(kR)}{(kR)^2} - \frac{\sin(kR)}{(kR)^3} \right) \right\} = \gamma_0 \cdot \phi, \end{aligned}$$

Здесь  $\gamma_0 = \frac{4\mu^2 \omega_0^3}{3c^3 \hbar}$  — стандартная константа релаксации, которая получается в теории одного атома,  $R$  — расстояние между атомами,  $\mathbf{m}_p$  — единичный вектор дипольного момента  $p$ -го атома,  $\mathbf{e}_R$  — единичный вектор в направлении  $\mathbf{R}$ .

## 2. Контур спектральной линии

Как было показано в статье [11], контур линии излучения определяется формулой

$$\begin{aligned} S(\omega, \Delta \mathbf{k}) = & \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^\infty (\langle \sigma_1^+(t) \sigma_1^-(0) \rangle + \langle \sigma_2^+(t) \sigma_2^-(0) \rangle) e^{-i\omega t} dt + \right. \\ & \left. + \cos(\Delta \mathbf{k} \mathbf{R}) \int_0^\infty (\langle \sigma_2^+(t) \sigma_1^-(0) \rangle + \langle \sigma_1^+(t) \sigma_2^-(0) \rangle) e^{-i\omega t} dt \right\}, \end{aligned}$$

где  $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  разность волновых векторов падающей и излученной волн,  $\mathbf{R}$  — вектор, направленный от одного атома к другому (его модуль равен расстоянию между атомами). Слагаемые, пропорциональные  $\cos(\Delta \mathbf{k} \mathbf{R})$ , описывают интерференцию излучения, исходящего от разных атомов.

Используя квантовую теорему регрессии [12], из решения уравнения (6) можно найти контур линии излучения, который имеет вид:

$$\begin{aligned} S(\omega) = \operatorname{Re} \left( \frac{8i((D - 4\omega_c)\rho_{ss} + (C - 4\omega_c)\rho_{uu}) \cos^2(\alpha)}{\pi(A - 4g_{12} - 2i\gamma_0(\phi + 1) + 4\omega_c)(-B + 4g_{12} - 2i\gamma_0(\phi + 3) + 4\omega_c)} - \right. \\ \left. - \frac{8i \sin^2(\alpha) \rho_{sa}}{\pi(A - 4g_{12} - 2i\gamma_0(\phi - 1) - 4\omega_c)} \right), \end{aligned}$$

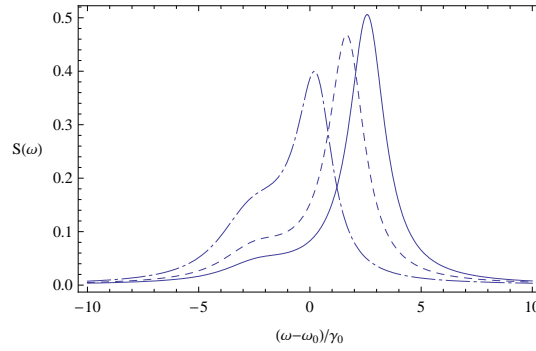


Рис. 2. Контур линии излучения взаимодействующих двухуровневых атомов в немарковском случае. Параметры в системе  $kR = \pi/5$ ,  $\gamma_0 = 1$ ,  $\Delta \mathbf{kR} = \pi/6$ ,  $\rho_{ss} = 0.8$ ,  $\rho_{uu} = 0.1$ ,  $\rho_{aa} = 0.1$ ,  $\rho_{as} = 0$ . Сплошная кривая –  $\gamma_0 \frac{\partial \gamma_0}{\partial \omega} = 0$  (марковский случай), штрих-пунктирная кривая –  $\gamma_0 \frac{\partial \gamma_0}{\partial \omega} = 5$ , пунктирная кривая –  $\gamma_0 \frac{\partial \gamma_0}{\partial \omega} = 2$

где

$$\begin{aligned} A &= \gamma_0 \partial_\omega \gamma_0 + \gamma_{12} \partial_\omega \gamma_{12}, & B &= -\gamma_0 \partial_\omega \gamma_0 + \gamma_{12} \partial_\omega \gamma_{12}, \\ C &= A + 2\gamma_0 \partial_\omega \gamma_{12} + 2\gamma_{12} \partial_\omega \gamma_0 + 4g_{12} - 6i(\gamma_0 - \gamma_{12}), \\ D &= B - 4g_{12} + 2i(3\gamma_0 + \gamma_{12}), & \alpha &= \Delta \mathbf{kR}/2, & \omega_c &= \omega - \omega_0. \end{aligned}$$

Соответствующие графики представлены на рис. 2.

Хорошо видно, что с ростом параметра немарковости  $\gamma_0 \frac{\partial \gamma_0}{\partial \omega}$  контур деформируется и его максимумы смещаются. Это связано, по всей видимости, с деформацией структуры энергетических уровней, к которым приводят эффекты памяти.

### Заключение

В работе рассмотрены два идентичных диполь-дипольно взаимодействующих двухуровневых атома, которые слабо взаимодействуют со своим окружением. В приближении короткой памяти построено немарковское обобщение операторного кинетического уравнения. Полученное уравнение сохраняет все привлекательные черты соответствующего марковского уравнения, а именно: сохраняет след матрицы плотности, имеет достаточно простую структуру по сравнению с традиционными немарковскими уравнениями, что позволяет получать аналитические решения.

На основе решения полученного уравнения аналитически построен контур линии излучения. Показано, что немарковость приводит к заметным деформациям. Данный факт может наблюдаться в прецизионных экспериментах с атомами в ловушках.

### Summary

V.V. Semin, A.V. Gorokhov. Quantum Non-Markovian Relaxation in a System of Two-Level Atoms.

The article examines the system of two interacting two-level atoms. In a short memory approximation the non-Markovian master equation is obtained. Spectral line shape is determined on the basis of the solution of this equation for the system under study.

**Key words:** master equation, non-Markovian relaxation, system of two-level atoms, spectral line shape.

## Литература

1. *Lindblad G.* On the generators of quantum dynamical semigroups // Commun. Math. Phys. – 1976. – V. 48, No 2. – P. 119–130.
2. *Ван Кампен Н.Г.* Стохастические процессы в физике и химии. – М.: Высш. шк., 1990. – 376 с.
3. *Fain B.* Irreversibilities in Quantum Mechanics. – N. Y.: Kluwer Acad. Publ., 2002. – 224 p.
4. *Zwanzig R.* Ensemble Method in the Theory of Irreversibility // J. Chem. Phys. – 1960. – V. 33, No 5. – P. 1338–1341.
5. *Breuer H.-P., Petruccione F.* The Theory of Open Quantum Systems. – Oxford: Oxford Univ. Press, 2002. – 645 p.
6. *Shabani A., Lidar D.A.* Completely positive post-Markovian master equation via a measurement approach // Phys. Rev. A. – 2005. – V. 71, No 2. – P. 020101(R)-1–020101(R)-4.
7. *Горохов А.В., Михайлов А.В.* Релаксация двухуровневой системы, взаимодействующей с внешним стохастическим полем // Теорет. физика. – 2000. – Т. 1. – С. 54–62.
8. *Скайли М.О., Зубайри М.С.* Квантовая оптика. – М: Физматлит, 2003. – 512 с.
9. *Gangopadhyay G.* Non-Markovian master equation for linear and nonlinear systems // Phys. Rev. A. – 1992. – V. 46, No 3. – P. 1507–1515.
10. *Kurizki G., Ben-Reuven A.* Theory of cooperative fluorescence from products of reactions or collisions: identical neutral atomic fragments // Phys. Rev. A. – 1987. – V. 36. – P. 90–102.
11. *Горохов А.В., Семин В.В.* Расчет спектра флуоресценции для двух взаимодействующих атомов // Оптика и спектроскопия. – 2009. – Т. 107, № 4. – С. 617–622.
12. *Lax M.* Quantum Noise. XI. Multitime correspondence between quantum and classical stochastic processes // Phys. Rev. – 1968. – V. 172. – P. 350–361.

Поступила в редакцию  
23.12.09

---

**Семен Виталий Владимирович** – аспирант кафедры общей и теоретической физики Самарского государственного университета.

**Горохов Александр Викторович** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей и теоретической физики Самарского государственного университета.

E-mail: [gorokhov@ssu.samara.ru](mailto:gorokhov@ssu.samara.ru)