

01

## Динамика квантового гармонического осциллятора в диссипативном окружении

© В.Ю. Голышев

Институт радиотехники и электроники РАН, Фрязино  
E-mail: vyug@mail.ru

Поступило в Редакцию 24 августа 2001 г.

Исследована временная эволюция полной матрицы плотности квантовой системы, состоящей из гармонического осциллятора и диссипативного окружения, описываемого набором осцилляторов. Задача решена в случае частотно-независимой омической диссипации и для основного состояния осциллятора в начальный момент времени.

Наиболее важный аспект динамики квантовой макроскопической системы — это взаимодействие с диссипативным окружением. Примером такой квантовой системы может быть суммарный спин мезоскопической магнитной частицы, взаимодействующей с акустическими фононами [1]. Взаимодействие макроскопической переменной с окружением и его влияние на квантовые свойства системы изучались на основе различных моделей. Наиболее полное описание подобных эффектов можно получить при помощи матрицы плотности, динамика которой вычисляется в функционально-интегральном приближении, использующем функционалы влияния Фейнмана–Вернона [2]. В работе Калдеиры и Леггетта [3] было представлено детальное изучение квантового гармонического осциллятора и свободной частицы в случае частотно-независимой омической диссипации. Граберт, Шрамм и Ингольд [4] обобщили и развили их результаты для различных начальных условий и характера диссипации. Однако динамика матрицы плотности системы не была полностью изучена, в частности для случая, когда осциллятор не связан с термостатом.

**Формулировка задачи.** Гамильтониан полной системы, состоящей из гармонического осциллятора и диссипативного окружения, имеет вид

$$H = H_0 + H_R + H_{0R}, \quad (1)$$

где  $H_0 = p^2/2M + M\omega_0^2 q^2/2$  — гамильтониан невозмущенного гармонического осциллятора,  $H_R = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} (p_n^2/m_n + m_n \omega_n^2 x_n^2)$  описывает резервуар  $N$  гармонических осцилляторов (в дальнейшем будет сделан предельный переход  $N \rightarrow \infty$ ), и  $H_{0R} = -q \sum_{n=1}^N c_n x_n + q^2 \sum_{n=1}^N c_n^2 / 2m_n \omega_n^2$  вводит взаимодействие. Последний член в  $H_{0R}$  компенсирует изменение потенциала невозмущенного гармонического осциллятора, вызванное взаимодействием с осцилляторами окружения.

Предполагается, что в начальный момент времени  $t = 0$  гармонический осциллятор и резервуар не взаимодействуют. Взаимодействие включается в момент времени  $t > 0$ . Резервуар окружения связан с термостатом, задающим температуру  $T$ , в то время как гармонический осциллятор с указанным термостатом не взаимодействует. В этом случае интересно проследить динамику поведения усеченной матрицы плотности осциллятора  $\rho(t) = tr_R W(t)$ , где  $W(t)$  — матрица плотности полной системы, состоящей из осциллятора и бассейна окружения, и  $tr_R$  — след по координатам резервуара. Начальная матрица плотности полной системы  $W_0$  записывается как произведение матриц плотности независимых подсистем:  $W_0 = \rho_0 W_R$ , где  $\rho_0$  — матрица плотности осциллятора,  $W_R = Z_R^{-1} \exp(-\beta H_R)$  — каноническая матрица плотности невозмущенного бассейна окружения при обратной температуре  $\beta = 1/k_B T$ . Эволюция матрицы плотности системы задается уравнением

$$\rho(t) = tr_R \exp \left[ -\frac{iHt}{\hbar} \right] \rho_0 W_R \exp \left[ \frac{iHt}{\hbar} \right]. \quad (2)$$

Полагаем, что в начальный момент времени  $t = 0$  осциллятор находится в основном состоянии с матрицей плотности

$$\rho_0(q, q') = \left( \frac{M\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \exp \left[ -\frac{M\omega_0}{2\hbar} (q^2 + q'^2) \right]. \quad (3)$$

Равновесная усеченная матрица плотности осциллятора, который так же, как и диссипативное окружение, находится в тепловом равновесии

с термостатом, имеет вид (см. [2])

$$\rho_\beta(x, r) = \left( \frac{M}{2\pi\hbar\Lambda} \right)^{1/2} \exp \left[ -\frac{M}{\hbar} \left( \frac{1}{2\Lambda} r^2 + \frac{\Omega}{2} x^2 \right) \right], \quad (4)$$

где

$$\Lambda = \gamma\pi^{-1} \int_0^{\omega_c} d\omega \cdot \omega [(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (\gamma\omega)^2]^{-1} \operatorname{cth} \left( \frac{1}{2} \omega\hbar\beta \right),$$

$$\Omega = \gamma\pi^{-1} \int_0^{\omega_c} d\omega \cdot \omega^3 [(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (\gamma\omega)^2]^{-1} \operatorname{cth} \left( \frac{1}{2} \omega\hbar\beta \right),$$

$\omega_c$  — частота осечки спектральной функции диссипативного окружения,  $x = q - q'$  — разность и  $r = (q + q')/2$  — сумма координат гармонического осциллятора,  $\gamma$  — параметр омической диссипации, при которой классическое уравнение движения осциллятора приобретает наиболее простую форму:  $\ddot{q} + \gamma\dot{q} + \omega_0^2 q = 0$ .

В пределе слабого взаимодействия  $\gamma \ll \omega_0$  выражение (4) преобразуется к виду

$$\rho_\beta(x, r) = \left( \frac{M\omega_0\hbar\left(\frac{1}{2}\omega_0\hbar\beta\right)}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \times \exp \left[ -\frac{M\omega_0}{2\hbar} \left( 2\hbar\left(\frac{1}{2}\omega_0\hbar\beta\right)r^2 + \frac{1}{2}\operatorname{cth}\left(\frac{1}{2}\omega_0\hbar\beta\right)x^2 \right) \right]. \quad (5)$$

В статической термодинамике [5] показано, что бассейн осцилляторов окружения при  $N \rightarrow \infty$  является термостатом для взаимодействующей с ним подсистемы и задает ей распределение Гиббса по энергиям. Это утверждение можно доказать не прибегая к конкретной модели термостата, если рассматривать данную систему как подсистему большой системы той же природы. Это было сделано Крутковым для классического и обобщено для квантового случая [6]. Заметим, что все вышеуказанные доказательства не конкретизируют характер связи системы с термостатом и вид спектральной функции осцилляторов окружения. Ввиду того что матрица плотности наиболее полно описывает динамику взаимодействия подсистемы с бассейном осцилляторов,

представляет интерес изучить асимптотическое поведение  $\rho(t)$  при  $t \rightarrow \infty$  в случае омической диссипации и сравнить предельное значение с выражением [5].

**Временная эволюция матрицы плотности системы.** Решение уравнения (2) для произвольного момента времени можно записать в виде (см. [4]):

$$\rho(x_f, r_f, t) = \frac{1}{N} \int dx_i dr_i \rho_0(x_i, r_i) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum (x_f, r_f, t, x_i, r_i)\right), \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \sum(x_f, r_f, t, x_i, r_i) = & M(x_f r_f + x_i r_i) \frac{\dot{G}_+(t)}{G_+(t)} \\ & - M\left(x_i r_f \frac{1}{G_+(t)} + x_f r_i \frac{1}{G_+(t)}\right) \\ & + \frac{i}{2} x_i^2 \int_0^t ds \int_0^t du K(s-u) \frac{G_+(t-s)}{G_+(t)} \frac{G_+(t-u)}{G_+(t)} \\ & + i x_i x_f \int_0^t ds \int_0^t du K(s-u) \frac{G_+(t-s)}{G_+(t)} \frac{G_-(u)}{G_-(t)} \\ & + \frac{i}{2} x_f^2 \int_0^t ds \int_0^t du K(s-u) \frac{G_-(s)}{G_-(t)} \frac{G_-(u)}{G_-(t)} \end{aligned} \quad (7)$$

и для случая омической диссипации  $K(s) = M\gamma\pi^{-1} \int_0^{\omega_c} d\omega \cdot \omega \times \times \text{cth}\left(\frac{1}{2}\omega\hbar\beta\right) \cos(\omega s)$ ,  $G_+(t) = \xi^{-1} \sin(\xi t) \exp(-\frac{1}{2}\gamma t)$ ,  $G_-(t) = \xi^{-1} \times \times \sin(\xi t) \exp(\frac{1}{2}\gamma t)$ ,  $\xi = (\omega_0^2 - \frac{1}{4}\gamma^2)^{1/2}$ . Подставляя в (6) выражение (7) и производя интегрирование по  $x_i$  и  $r_i$ , получим  $\rho(x_f, r_f, t)$ .

Ввиду того что выражение для матрицы плотности очень громоздкое, приведем окончательный результат в асимптотическом пределе  $t \rightarrow \infty$  и в случае слабого взаимодействия  $\gamma \ll \omega_0$ :

$$\rho(x_f, r_f, t) = \frac{1}{N} \exp\left[-\frac{M}{2\hbar} \left(\frac{1}{\Lambda_t} r^2 + \Omega_t x^2\right)\right], \quad (8)$$

где

$$\Lambda_t = \frac{\text{cth}(\omega_0 \hbar \beta / 2)}{2\omega_0} - \frac{\exp(-\gamma t)}{2\omega_0} [\text{cth}(\omega_0 \hbar \beta / 2) - 1], \quad (9)$$

$$\Omega_t = \Lambda_{eff} \omega_0^2. \quad (10)$$

Величина  $\Lambda_t$  отвечает за среднеквадратичное отклонение координаты осциллятора от положения равновесия и обуславливает поведение волновой функции  $|\psi(q)|^2$ . На рисунке показаны две зависимости величины  $\Lambda_t$  от времени при  $T = 10\hbar\omega_0/k_B$ ,  $\gamma = 0.1\omega_0$ . Непрерывная кривая получена путем компьютерного моделирования и соответствует точному выражению (6) для матрицы плотности, прерывистая линия построена по асимптотической формуле (9). Графики совпадают с хорошей точностью, за исключением быстрых затухающих осцилляций с частотой  $\omega_0$ .

Таким образом, показано, что усеченная матрица плотности системы стремится к своему равновесному значению (5). Отсюда следует, что диссипативный бассейн, являющийся "посредником" между квантовым осциллятором и термостатом, не меняет характера и температуры равновесного распределения. Динамика выхода на равновесное значение носит экспоненциальный характер с характерным временем  $\gamma^{-1}$ .

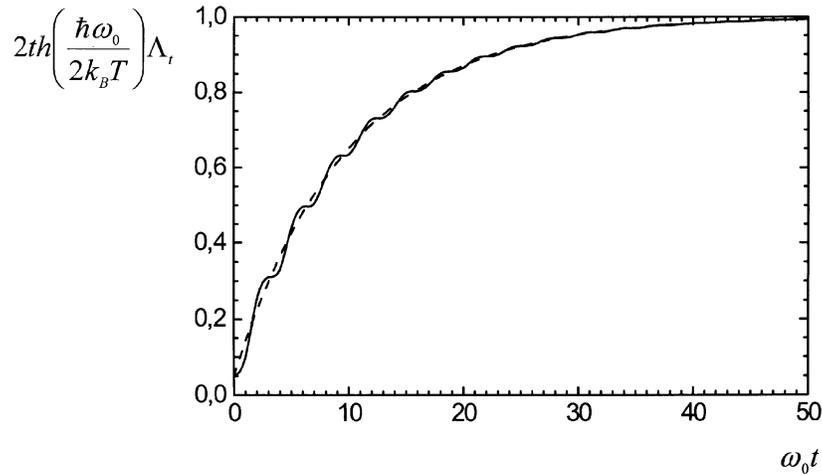


График зависимости величины  $\Lambda_t$  от времени.

## Список литературы

- [1] *Golyshev V.Yu., Popkov A.F.* // Physical Review. B. 1997. V. 56. N 5. P. 2712.
- [2] *Фейнман Р., Хибс А.* // Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир, 1968.
- [3] *Caldeira A.O., Leggett A.J.* // Physica. 1983. V. 121A. P. 587.
- [4] *Grabert H., Schramm P., Ingold G.-L.* // Physics Reports. 1988. V. 168. N 3. P. 115.
- [5] *Фейнман Р.* Статистическая механика. М.: Мир, 1978.
- [6] *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М., 1971.