Письма в ЖЭТФ, том 78, вып. 2, с. 103 – 107

Стохастическое представление квантовых взаимодействий и двухуровневые системы

Ю. Е. Кузовлев[1)]

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины, 83114 Донецк, Украина

Поступила в редакцию 5 мая 2003 г.

После переработки 16 июня 2003 г.

Сформулировано стохастическое представление взаимодействия двух квантовых систем, позволяющее заменить одну из них эквивалентными коммутативными случайными источниками. Предложенный метод применен к двухуровневым системам, контактирующим с термостатом. Рассмотрены эффекты сильной связи и долгоживущие флуктуации суммарного отклика двух систем в общем термостате.

PACS: 05.60.Gg, 72.70.+m

1. Для чистой и прикладной квантовой статистической физики типичны задачи о взаимодействии той или иной микроскопической "динамической системы" (ДС) и ее макроскопического окружения ("термостата"). Обычно гамильтониан взаимодействия имеет билинейный вид (или приводится к нему):

$$H_{int} = \sum_j B_j * D_j \,, \qquad (1)$$

где операторы D_j и B_j действуют в различных линейных (гильбертовых) пространствах D и B (ДС и термостата, соответственно). В гейзенберговском представлении $B_j(t) \equiv \exp(iH_b t) B_j \exp(-iH_b t)$ (H_b – гамильтониан автономного термостата) выступают в качестве источников случайного возмущения ДС. Но, в отличие от классических ланжевеновских источников, они операторнозначны и некоммутативны, выводя эволюцию ДС в прямое произведение пространств $D \otimes B$.

Задача могла бы стать проще, если заменить $B_j(t)$ на эквивалентные, с точки зрения результатов, коммутативные случайные источники, так что эволюция ДС формально оставалась бы в D. Эквивалентность означает точное воспроизведение роли температуры термостата и эффектов самодействия ДС через термостат, включая диссипацию.

Вариант такой замены был предложен в [1]. Пусть $H_d(t)$ – гамильтониан автономной ДС,

$$H(B,t) = H_d(t) + \sum_j B_j(t) D_j \,, \qquad (2)$$

и пусть ведется измерение некоторых наблюдаемых ДС J_k. Тогда статистический оператор $R(t)$ полной системы "ДС (наблюдаемая извне) плюс термостат" подчиняется уравнению

$$\dot{R} = v(t) J \circ R + i\,\{RH(B,t) - H(B,t)R\} \,, \qquad (3)$$

где $v(t)J \equiv \sum v_k(t) J_k$, $v_k(t)$ – пробные функции измерения, а $\circ$ – символ симметризованного произведения. При $v_k(t) = 0$ это обычное уравнение Неймана для совместной матрицы плотности, иначе же шпур $R(t)$ в $D \otimes B$ дает [1] характеристический функционал наблюдаемых $\Xi(t, v)$:

$$\mathrm{Tr}_D \mathrm{Tr}_B\, R = \mathrm{Tr}_D \mathrm{Tr}_B \overrightarrow{\exp} \left[\frac{1}{2} \int v(t') J(t') dt' \right] \times$$

$$\times \overleftarrow{\exp} \left[\frac{1}{2} \int v(t') J(t') dt' \right] R_{in} = \Xi(t, v). \qquad (4)$$

Здесь $J_k(t)$ – операторы в гейзенберговском представлении, стрелка влево (вправо) означает хронологическое (антихронологическое) упорядочение, интегралы берутся по $t' < t$ (t – текущий момент), и $R_{in} = R(-\infty)$. Поставим на место операторов $B(t)$ в гамильтониане (2) коммутативные (подобные С – числам) переменные $\xi(t) = x(t) + iy(t)/2$ или $\eta(t) = x(t) - iy(t)/2$ и рассмотрим взамен (3) уравнение

$$\dot{\rho}(t) = v(t) J \circ \rho(t) + L(t) \rho(t) \,, \qquad (5)$$

$$L(t)\rho \equiv i\,\{\rho H(\eta, t) - H(\xi, t)\rho\} =$$

$$= \sum_j y_j(t) D_j \circ \rho + i[\rho, H(x,t)] \,, \qquad (6)$$

трактуя все $\eta(t)$, $\xi(t)$, $x(t)$ и $y(t)$ как случайные процессы, отражающие влияние термостата. Допустим, что R_{in} факторизуется: $R_{in} = \rho(-\infty)\rho_b$,

[1)]e-mail: kuzovlev@kinetic.ac.donetsk.ua

где $\rho_b = \mathrm{Tr}_D\, R(-\infty)$ – статистический оператор термостата. Зададим характеристический функционал случайных источников $x(t)$ и $y(t)$ соотношением

$$\left\langle \exp \int [g(t)x(t) + f(t)y(t)]dt \right\rangle =$$

$$= \mathrm{Tr}_B \overrightarrow{\exp} \left\{ \frac{1}{2} \int g(t) B(t,f) dt \right\} \times$$

$$\times \overleftarrow{\exp} \left\{ \frac{1}{2} \int g(t) B(t,f) dt \right\} \rho_b \tag{7}$$

(индексы не выписаны для краткости), в котором операторы $B_j(t,f)$ определяются как

$$\begin{aligned} B_j(t,f) = U^{+}(t,f) B_j U(t,f)\,, \\ \dot{U}(t,f) = -i\{H_b + \textstyle\sum_j f_j(t) B_j\} U(t,f)\,, \end{aligned} \tag{8}$$

то есть характеризуют неавтономное поведение термостата. В (7) слева $g(t)$ и $f(t)$ – пробные функции для источников $x(t)$ и $y(t)$. Справа же, согласно (7) и (8), $g(t)$ суть пробные функции для наблюдаемых термостата $B(t)$, тогда как $f_j(t)$ – сопряженные с $B_j(t)$ классические силы, возмущающие термостат.

Как показано в [1], если статистика случайных источников в (5), (6) определяется выражениями (7), (8), то они в точности имитируют квантовый термостат. А именно,

$$\langle \rho(t) \rangle = \mathrm{Tr}_B\, R(t)\,, \tag{9}$$

$$\mathrm{Tr}_D\, \langle \rho(t) \rangle = \Xi(t,v)\,, \tag{10}$$

где скобка $\langle ... \rangle$ обозначает усреднение по $x(t)$ и $y(t)$ (или $\eta(t)$ и $\xi(t)$) в соответствии с (7), (8). Желаемая замена достигнута ценой удвоения числа источников: на месте одной вещественной наблюдаемой (эрмитова оператора) $B_j(t)$ появляется пара формально вещественных переменных $x_j(t)$ и $y_j(t)$ либо пара комплексно сопряженных (η_j и $\xi_j = \eta_j^*$).

Из (5), (6) видно, что $x_j(t)$ играют роль собственно случайных сил (потенциалов), но $y_j(t)$ – роль пробных функций наблюдения (измерения) ДС термостатом (аналогично $v_k(t)$ в (3)). Под влиянием одной только случайной накачки $x_j(t)$ (в отсутствие $y_j(t)$) энтропия и энергия ДС росли бы насколько возможно. Но, как в любом процессе измерения, слагаемые с $y_j(t)$ в "стохастическом операторе Лиувилля" (6) нарушают унитарность эволюции оператора $\rho(t)$, уменьшая фазовый объем (энтропию) ДС. Одновременно $y_j(t)$ отвечают за отток энергии обратно в термостат, то есть за диссипацию, а значит, и за неравномерное (тепловое) вероятностное распределение энергии ДС. Подчеркнем, что в среднем, согласно (9), (10), унитарность выполняется.

В силу (7), (8),

$$\left\langle \prod_{j,m} x(t_j) y(t'_m) \right\rangle = \left[\prod_m \frac{\delta}{\delta f(t'_m)} \left\langle \prod_j B(t_j, f) \right\rangle \right]_{f=0} . \tag{11}$$

Отсюда ясно, что $\langle y(t) \rangle = 0$, $\langle y(t) y(t') \rangle = 0$ и все высшие корреляторы $y(t)$ с самими собой тоже равны нулю. Однако перекрестные корреляторы $y(t)$ с $x(t)$ отличны от нуля, представляя отклик термостата на возмущение. Таким образом, $y(t)$ не есть С-числа в буквальном смысле. Но на деле необычность их статистических свойств только облегчает вычисления. Важно, что $y(t)$ могут иметь корреляции только с более поздними значениями $x(t' > t)$, в соответствие с принципом причинности.

В случае гауссова равновесного термостата все функции (11) выражаются через парные корреляторы

$$\langle x_j(\tau) x_m(0) \rangle = \int_0^\infty \cos(\omega\tau) S_{jm}(\omega) \frac{d\omega}{\pi}\,, \tag{12}$$

$$\langle x_j(\tau) y_m(0) \rangle = 2\vartheta(\tau) \int_0^\infty \sin(\omega\tau) \tanh\left(\frac{\omega}{2T}\right) S_{jm}(\omega) \frac{d\omega}{\pi}.$$

Здесь T – температура, $\vartheta(\tau)$ – функция Хевисайда, а $S_{jm}(\omega)$ – неотрицательно определенная спектральная матрица. Формулы (12) показывают, что пренебрежение $y(t)$-компонентой случайных источников в (5), (6) означало бы по существу бесконечность температуры термостата.

В (9), (10) фигурирует лишь среднее значение "стохастической матрицы плотности ДС" $\rho(t)$. Естественно, ее высшие статистические моменты

$$\langle \rho(t) \otimes ... \otimes \rho(t) \rangle \tag{13}$$

описывают несколько копий ДС, взаимодействующих с одним общим термостатом. Неразличимость копий требует конкретизировать их квантовую статистику. В [1] рассмотрено, как случай ферми-статистики сводится к анализу моментов (13). При этом дополнительное прямое (например, кулоновское) взаимодействие между экземплярами ДС может быть включено как взаимодействие через второй (гауссов) термостат (дополнительные пары источников $x(t)$, $y(t)$).

2. Применим данный формализм к двухуровневой ДС (ДУС), взаимодействующей с гауссовым термостатом. Можно положить

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \; D = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (14)$$

и $H_d(t) = u(t)J/2$. Здесь $u(t)$ – разность энергий состояний, возможно, зависящая от времени в результате внешнего воздействия на ДУС. Оператор D отвечает за контакт с термостатом, который вынуждает случайные переключения ДУС между ее состояниями. Оператор J соответствует наблюдению состояния, например, ориентации спина, или скорости квантовой частицы в простейшей модели одномерного броуновского движения. На данной модели иллюстрируем роль $y(t)$ – компоненты случайного источника, то есть "диссипативного" слагаемого $y(t)D \circ \rho(t)$ в (5), (6).

Вначале пусть состояния свободной ДУС имеют одинаковые энергии: $u(t) \equiv 0$. Дифференциальное стохастическое уравнение (5), (6) интегрируется явным образом. В частности, для шпура

$$\theta(t, v) \equiv \mathrm{Tr}_D\, \rho(t) = \rho_{11} + \rho_{22}$$

получается рекуррентное уравнение

$$\theta(t, v) = Y(t, -\infty) + \qquad (15)$$

$$+ \int\limits_{t>t_1>t_2} Y(t, t_1) v(t_1) X(t_1, t_2) v(t_2) \theta(t_2, v) dt_1 dt_2 \,,$$

$$X(t_1, t_2) \equiv \cos\left[2\int\limits_{t_2}^{t_1} x(t')dt'\right],$$

$$Y(t_1, t_2) \equiv \cosh\left[\int\limits_{t_2}^{t_1} y(t')dt'\right],$$

при этом $\Xi(t, v) = \langle \theta(t, v) \rangle$.

Рассмотрим корреляционную функцию флуктуаций спина (или скорости броуновской частицы, или тому подобного) $K(\tau) = \langle J(\tau)J(0) \rangle$ и коэффициент диффузии $\Delta = \int_0^\infty K(\tau)d\tau$. Прежде всего любопытен случай, когда шум термостата – "белый", в том смысле, что $S(\omega) = \mathrm{const}$ в (12) (подчеркнем, впрочем, что оба коррелятора (12) одновременно не могут обратиться в δ-функции, и в этом смысле квантовый шум никогда не является белым). Разворачивая (15), усредняя с учетом (12) и дифференцируя по пробной функции, находим:

$$K(\tau) = \mathrm{e}^{-2S\tau} \cos\left\{ \frac{2S}{\pi} \int\limits_0^\tau \ln\tanh\left(\frac{\pi T \tau'}{2}\right) d\tau' \right\}. \quad (16)$$

Рис.1 демонстрирует, что с ростом порядка безразмерной интенсивности шума S/T монотонная релак-

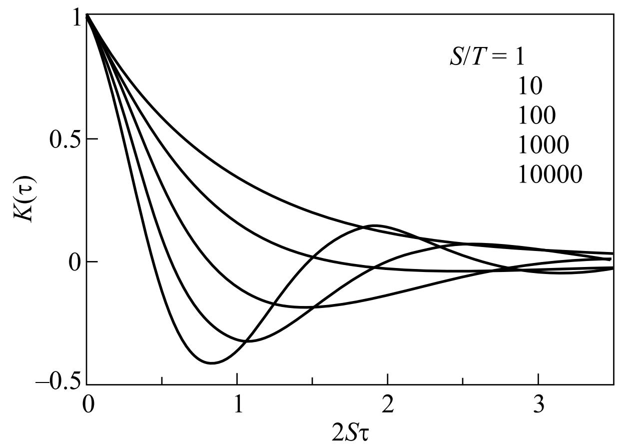

Рис.1. Корреляционная функция состояния ДУС при пяти различных по порядку величины значениях (указаны на графике) относительной интенсивности белого шума термостата

сация сменяется все более осциллирующей. С формальной точки зрения, это как раз и есть эффект $y(t)$-компоненты, то есть обратного влияния ДУС на термостат (в отсутствие $y(t)$ корреляция была бы чисто экспоненциальной при любой S/T).

Однако практически правильнее может оказаться противоположное приближение:

$$S(\omega) = S/[1 + (\tau_0\omega)^2], \; \tau_0 T >> 1 \,, \qquad (17)$$

в котором достаточно большое время корреляции шума (реакции термостата) τ_0 исключает высокие частоты. Тогда удобно ввести энергию связи ϵ посредством $S(0) = 2\epsilon^2\tau_0$. Вычисляя корреляционную функцию в предположениях (17), получаем, что при слабой связи ($\epsilon/T < 1$) имеет место монотонная (близкая к экспоненциальной) релаксация, а при $\epsilon/T > 1$ (сильная связь)

$$K(\tau) \approx \exp(-2\epsilon^2\tau^2)\cos(\epsilon^2\tau/T) \,, \qquad (18)$$

то есть снова появляются и умножаются осцилляции.

Понятно, что осцилляции релаксации означают дополнительное уменьшение коэффициента диффузии Δ (спектральной плотности $J(t)$ на нулевой частоте) по сравнению с его значением Δ_0, которое имело бы место в отсутствие $y(t)$. На рис.2 показана зависимость этого эффекта от $S/T \equiv S(0)/T$ для белого

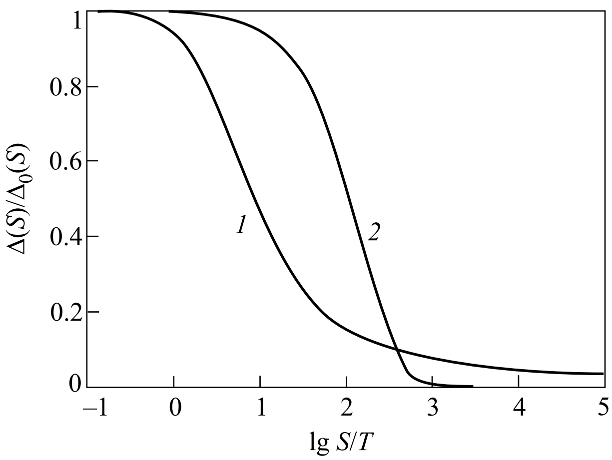

Рис.2. Отношение коэффициентов диффузии, вычисленных с учетом (Δ) и без учета (Δ_0) диссипативной реакции термостата, в зависимости от относительной интенсивности его шума, в случаях (1) белого шума и (2) низкочастотного лоренцева шума с $\tau_0 T = 10$

шума (кривая *1*) и для лоренцева шума при $T\tau_0 = 10$ (кривая *2*). Во втором случае коэффициент диффузии может стать аномально малым, приводя к локализации броуновской частицы.

Колебательная релаксация означает, что отклик ДУС на периодическое стороннее воздействие может приобрести "резонансный" характер, будучи максимальным при ненулевой частоте воздействия (если же частота задана, то он максимален при ненулевом уровне шума термостата). Подобные явления известны под названием стохастического резонанса (см., например, обзор [2]).

Отметим еще, что колебательная релаксация относится к роду немарковских эффектов, которые не могли бы быть адекватно рассмотрены в рамках теории марковских квантовых динамических полугрупп, то есть локальных по времени кинетических уравнений (об этой теории, восходящей к работе Линдблада [3], см., например, сс.5–12 в [4]; выражаясь ее терминами, мы рассмотрели стохастическое "расширение" полугруппы, немарковской настолько, насколько коррелятор $x(\tau)y(0)$, определяющий осцилляции в (16), отличается от δ-функции).

3. Благодаря симметрии (вырождению) состояний шпур (15) содержит только четные степени $v(t)$. Если $u(t) \neq 0$, то симметрия нарушается. Определим интегральные операторы $\hat{I}$, $\hat{C}$ и $\hat{S}$ формулами

$$\hat{I} f(t) = \int_{-\infty}^{t} f(t')dt' ,$$

$$\hat{C}, \hat{S}\, f(t) = \int_{-\infty}^{t} \cos, \sin \left\{ \int_{t'}^{t} u(t'')dt'' \right\} f(t')dt' .$$

При $u(t) \neq 0$ вместо (15) можно вывести уравнение

$$\theta = 1 + \hat{I} y \hat{C} y \theta +$$

$$+ \hat{I}(v + 2y\hat{S}x)[1 + 4\hat{I}x\hat{C}x]^{-1}\hat{I}(v + 2x\hat{S}y)\theta. \qquad (19)$$

Теперь в разложении θ по $v(t)$,

$$\theta(t,v) = \theta_0(t) + \int_{-\infty}^{t} \widetilde{J}(t_o)v(t_o)dt_o +$$

$$+ \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{t}\int_{-\infty}^{t} \widetilde{K}(t_1,t_2)v(t_1)v(t_2)dt_1dt_2 + \dots ,$$

появляется первая степень (как и прочие нечетные). Для простоты рассмотрим этот вклад в пределе "горячего" термостата: $S/T << 1, T\tau_0 >> 1$, когда, в соответствии с (12), лишняя степень $y(t)$ вносит дополнительный порядок малости. Еще предположим возмущение $u(t)$ бесконечно слабым. Оставляя лишь низшие степени $y(t)$ и $u(t)$, можно получить

$$\widetilde{J}(t_o) = J_+(t_o) + J_-(t_o) , \qquad (20)$$

$$J_+ = \int_{-\infty}^{t_o} \sin\left\{ 2\int_{t_1}^{t_o} x(t')dt' \right\} u(t_1) \int_{-\infty}^{t_1} y(t_2)dt_2dt_1 ,$$

$$J_- = \int_{t_o}^{t} \sin\left\{ 2\int_{t_o}^{t_1} x(t')dt' \right\} u(t_1) \int_{t_1}^{t} y(t_2)dt_2dt_1 .$$

Разумеется, момент фактического наблюдения t_o расположен на оси времени раньше формального аргумента t. При этом условии t выпадает из результатов усреднения, поэтому удобно считать $t = \infty$.

Очевидно, $\widetilde{J}(t_o)$ исчезает, если пренебречь $y(t)$-компонентой случайного источника. Следовательно, последняя отвечает, наряду с $x(t)$, за отклик ДС на стороннее возмущение. Интегральные операторы, действующие на $u(t)$ в выражениях J_+ и J_-, выступают в качестве случайных функций линейного отклика (случайной восприимчивости или подвижности, или тому подобного), то есть как мультипликативный шум. За ним стоит случайность (зависимость от шума термостата) квантовых вероятностей переходов между состояниями [5]. Формулы (20) наглядно демонстрируют, что в неусредненном виде функции отклика не обладают затуханием и могут связывать произвольно разнесенные во времени события.

4. В заключение рассмотрим две одинаковые ДУС в контакте с одним и тем же термостатом. Положим, что они формально различимы и дают аддитивные вклады в наблюдаемую величину. Тогда вместо (10) для характеристического функционала суммарной наблюдаемой можно написать

$$\Xi(t,v) = \left\langle \theta^2(t,v) \right\rangle . \tag{21}$$

Для ее корреляционной функции, которую обозначим через K_2, в пределе горячего термостата из (21) следует

$$K_2(t_1,t_2) = 2\{\left\langle \widetilde{K}(t_1,t_2)\right\rangle + \langle J_+(t_1)J_-(t_2)\rangle +$$

$$+ \langle J_+(t_1)J_+(t_2)\rangle - 2\langle J_+(t_1)\rangle \langle J_+(t_2)\rangle\} , \tag{22}$$

где $t_1 > t_2$.

Не касаясь первого слагаемого справа в (22), заметим, что последующие слагаемые описывают "избыточный" шум наблюдаемой, пропорциональный квадрату возмущения $u(t)$ и происходящий от (одинаковых в обеих ДУС) флуктуаций случайных функций линейного (формула (20)). Если $t_1 - t_2 >> \tau_c$, где τ_c – время корреляции быстрого шума наблюдаемой (время затухания $K(\tau)$ в отсутствие возмущения), то остается вклад только от второго слагаемого, который зато совсем не затухает. Формальная оценка этой долгоживущей корреляции по порядку величины дает

$$|\langle J_+(\infty)J_-(-\infty)\rangle| \sim (\tau_c^2/\tau_0^2)\left\langle \widetilde{J}\right\rangle^2 .$$

Отношение τ_c/τ_0 зависит от параметра $\epsilon\tau_0$ и может быть как значительно больше единицы (при $\epsilon\tau_0 \ll 1$), так и намного меньше ее (при $\epsilon\tau_0 \gg 1$).

Заметим, что выражение $J_-(t_o)$ в (20) соответствует "реакции прошлого на будущее", так как включает лишь будущие, по отношению к моменту наблюдения, значения всех переменных. Конечно, любой коррелятор, в котором временной аргумент J_- является наиболее поздним, равен нулю, иначе он не имел бы физического смысла. Однако корреляции между J_- и более поздними значениями J_+ не входят в противоречие с принципом причинности. Свойство долгоживучести этих корреляций полностью подобно свойствам флуктуаций квантовых вероятностей, рассматривавшимся в [5]. Их причина – тоже когерентность (унитарность) совместной эволюции ДС и термостата, нарушаемая актами наблюдения ДС, однако сохраняющаяся во все время между ними. Но, в отличие от [5], в данном примере рассмотрение незатухающих корреляций не ограничено какими-либо временными рамками.

1. Yu. E. Kuzovlev, cond-mat/0102171.
2. L. Cammaitoni, P. Hanngi, P. Jung et al., Rev. Mod. Phys. **70**, 223 (1998).
3. G. Lindblad, Comm. Math. Phys. **48**, 119 (1976).
4. Сб. *Квантовые случайные процессы и открытые системы*, составитель А. С. Холево, М.: Мир, 1988.
5. Ю. Е. Кузовлев, Ю. В. Медведев, А. М. Гришин, Письма в ЖЭТФ **72**, 832 (2000) [JETP Lett. **72**, 574 (2000)].