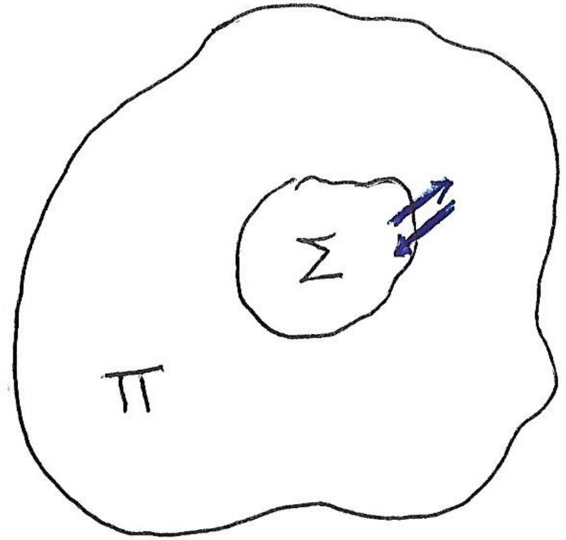
Σύγχρονη Κβαντική Μηχανική
και εφαρμογές

Ανοικτά κβαντικά συστήματα

Βιβλιογραφία: H.-P. Breuer and F. Petruccione
"The theory of open quantum systems"
Oxford University Press
New York 2002

Φ. Κ. Διάκονος

Ανοικτά συστήματα



$\Pi + \Sigma$: κλειστό, Σ : ανοικτό

Η ενέργεια του Σ μεταβάλλεται λόγω αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον (Π).

$\Downarrow$

Μερική άγνοια ιδιοτήτων του Π

$\Downarrow$

Στοχαστικές ιδιότητες στη μεταβολή της ενέργειας $\Rightarrow$
- στοχαστικές διακυμάνσεις στις καταστατικές μεταβλητές του Σ
- Εμφάνιση τριβής στο Σ

  $\Downarrow$

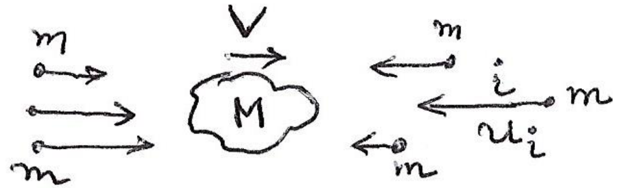
  Ροή ενέργειας από $\Sigma \rightarrow \Pi$

Υπόθεση: $E_\Sigma << E_\pi$

με $E_{\Sigma(\Pi)}$ <u>εκτατικό</u> μέγεθος που χαρακτηρίζει το Σ (Π).

Απλό μοντέλο ανοικτού συστήματος

Σωμάτιο μάζης M σε περιβάλλον σωματιδίων μάζης m



Για απλότητα θα θεωρήσουμε την 1-D περίπτωση

Το σύστημα Σ είναι το σωμάτιο μάζης M

Το περιβάλλον αποτελείται από $N_\pi \gg 1$ σωμάτια μάζης m

Δυναμική του συστήματος

$\Downarrow$

Ελαστικές κρούσεις με τα σωμάτια του Π

Διατήρηση ορμής-ενέργειας

$$\left.\begin{aligned} MV + mu &= MV' + mu' \\ \frac{1}{2}MV^2 + \frac{1}{2}mu^2 &= \frac{1}{2}MV'^2 + \frac{1}{2}mu'^2 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \quad \begin{aligned} V' &= \frac{M-m}{M+m}V + \frac{2m}{M+m}u \\ u' &= \frac{m-M}{M+m}u + \frac{2M}{M+m}V \end{aligned}$$

Σ: M, V

Π: $\{m, u\}$

Παραδοχές: $|V| \ll |u|$, $M \gg m$

Brownian δυναμική: μεγάλο και αργό σωμάτιο σε περιβάλλον από μικρά και γρήγορα σωμάτια

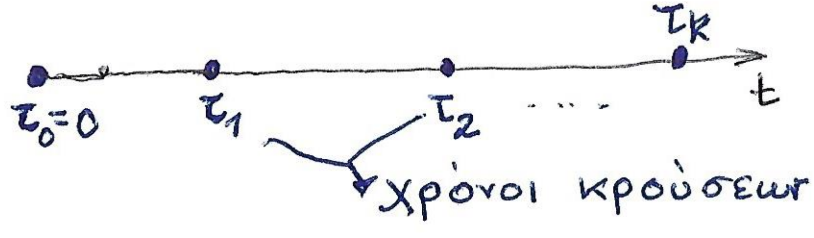
Αραιό περιβάλλον: δυναμική απλής κρούσης (ένα σωμάτιο του Π συγκρούεται με το Σ)

Έστω T χρονικό διάστημα στο οποίο:

- γίνονται πολλές κρούσεις του Σ με σωμάτια του Π
- η μεταβολή του $|V|$ είναι μικρή

Έχουμε: $\langle V^2 \rangle_T = \dfrac{1}{T}\displaystyle\int_0^T dt\, V^2(t)$, $\langle V \rangle_T = \dfrac{1}{T}\displaystyle\int_0^T dt\, V(t) \approx 0$

$V(t) =$ κατά τμήματα σταθερή συνάρτηση



Στο διάστημα $[\tau_i, \tau_{i+1})$

$t_i = \tau_{i+1} - \tau_i$

$V(t) = V_i$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} \langle V^2 \rangle &= \frac{1}{T}\sum_{i=0}^{N-1} t_i V_i^2 \\ T &= \sum_{i=0}^{N-1} t_i \end{aligned}}$$

$N =$ αριθμός κρούσεων στο $[0, T]$

Μπορούμε να γράψουμε: $t_i = \bar{t} + \Delta t_i$ με $\sum_{i=0}^{N-1} \Delta t_i = 0$

και $\bar{t} = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} t_i$

Θα κάνουμε μια επιπλέον παραδοχή:

$$|\Delta t_i| << \frac{T}{N} \ (= \bar{t})$$

$\Rightarrow$ ομοιογένεια των χρονικών διαστημάτων μεταξύ κρούσεων (καλή προσέγγιση όταν το σωμάτιο μάζης M είναι αργό σε σχέση με τα σωμάτια του Π)

$\Downarrow$

$$\overbrace{\langle V^2 \rangle_T}^{\text{Χρονική μέση τιμή}} = \frac{1}{\underbrace{N\bar{t}}_{T}} \sum_{i=0}^{N-1} \bar{t}\, V_i^2$$

$$= \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} V_i^2}_{\overline{V^2}}$$

$\overline{V^2}$: μέση τιμή στις κρούσεις

Υπάρχει στάσιμη κατάσταση;

Αν ναι τότε για $T \to \infty$ θα πρέπει να ισχύει:

$$\boxed{\overline{V^2} = \overline{V'^2}}$$

Συνθήκη στάσιμης κατάστασης του Σ

Η συνθήκη στασιμότητας για το Σ δίνει:

$$\overline{V^2} = \underbrace{\overline{\left(\frac{M-m}{M+m}V + \frac{2m}{M+m}u\right)^2}}_{\overline{V'^2}} = \left(\frac{M-m}{M+m}\right)^2 \overline{V^2} + \frac{4m(M-m)}{(M+m)^2}\overline{Vu} + \left(\frac{2m}{M+m}\right)^2 \overline{u^2}$$

Όμως τα V και u είναι σε καλή προσέγγιση ανεξάρτητα μεταξύ τους (πολλά σωμάτια στο Π, απώλεια μνήμης, V και u σε διαφορετικές κλίμακες) οπότε: $\underbrace{\overline{Vu} = \bar{V}\,\bar{u}}_{\text{μηδενίζεται!}}$ (με $\bar{V}=0, \bar{u}=0$)

Οπότε: $\underbrace{\overline{V^2} = \frac{m}{M}\overline{u^2}}_{\text{Συνθήκη για ύπαρξη στάσιμης κατάστασης του } \Sigma}$ ή αλλοιώς: $\underbrace{\frac{1}{2}M\overline{V^2} = \frac{1}{2}m\overline{u^2}}_{\text{Ισοκατανομή ενέργειας}}$

$\Downarrow$

Θερμική ισορροπία!

Για να μελετήσουμε τη πορεία προς την ισορροπία χρειαζόμαστε **δυναμική εξίσωση αποκλειστικά για το Σ!**

Για $M >> m$ ισχύουν:

$$\frac{M-m}{M+m} \simeq 1 - \frac{2m}{M} + O\left(\left(\frac{m}{M}\right)^2\right)$$

$$\frac{M}{M+m} \simeq 1 - \frac{m}{M} + O\left(\left(\frac{m}{M}\right)^2\right)$$

$$\frac{m}{M+m} \simeq \frac{m}{M} + O\left(\left(\frac{m}{M}\right)^2\right)$$

Σε τάξη $\frac{m}{M}$ η δυναμική του Σ γράφεται:

$$V' = \left(1 - \frac{2m}{M}\right) V + \frac{2m}{M} u$$

$$\Rightarrow \underbrace{V' - V}_{\Delta V} = -\frac{2m}{M} V + \frac{2m}{M} u$$

$$\Rightarrow \underbrace{M \Delta V}_{\Delta P} = -2mV + \underbrace{2mu}_{\text{διακυμαίνεται με } \bar{u} = 0}$$

Μελέτη της μεταβολής ΔP σε χρονικό διάστημα Δt τέτοιο ώστε:

- ΔP πολύ μικρό στο Δt
- Πολλές κρούσεις $N >> 1$ στο Δt

$\xRightarrow[\text{ως προς κρούσεις}]{\text{μέση τιμή}}$

$$\Delta P_N = 2m \sum_{i=0}^{N-1} u_i - 2m \sum_{i=0}^{N-1} V_i$$

Επειδή το V μεταβάλλεται πολύ λίγο στο Δt μπορούμε να θέσουμε $2m \sum_{i=0}^{N-1} V_i \simeq 2mVN$ όπου $N = \underbrace{n}\cdot \Delta t$

n = αριθμός κρούσεων ανά μονάδα χρόνου

Οπότε: $\Delta P_N = 2m \sum_{i=0}^{N-1} u_i - 2mVn\Delta t \Rightarrow$

$$\frac{\Delta P_N}{\Delta t} = -2mnV + \frac{2m}{\Delta t} \sum_{i=0}^{N-1} u_i$$

Επειδή στο διάστημα Δt το P μεταβάλλεται απειροστά μπορούμε να θεωρήσουμε ότι σε αυτή τη χρονική κλίμακα $\frac{\Delta P_N}{\Delta t} \approx \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta P_N}{\Delta t} = \frac{dP}{dt}$

Ο όρος $\lim_{\Delta t \to 0} \frac{2m}{\Delta t} \sum_{i=0}^{N-1} u_i$ αφορά το Π και την επιρροή του στη δυναμική του Σ $\Rightarrow$ έχοντας στοχαστικά χαρακτηριστικά: στοχαστική δύναμη $F(t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{2m}{\Delta t} \sum_{i=0}^{N-1} u_i$

$$\boxed{\frac{dP}{dt} = M\frac{dV}{dt} = F(t) - \gamma V}$$

εξίσωση Langevin

$\gamma = 2mn$ (συντελεστής τριβής)

Η δυναμική του Σ περιγράφεται από την εξίσωση Langevin:

$$\frac{dV}{dt} + \underbrace{\underbrace{\frac{\gamma}{M} V}_{\text{τριβή}} = \underbrace{\frac{F(t)}{M}}_{\text{στοχαστική δύναμη}}}_{\substack{\text{Επίδραση του } \Pi \text{ στο } \Sigma \\ \text{και απόκριση}}}$$

Επίδραση του Π στο Σ και απόκριση $\Big\}$ συνδέονται;

Επίλυση με συνάρτηση Green:

$$\underbrace{\frac{dG(t,t')}{dt} + \frac{\gamma}{M} G(t,t') = \delta(t-t')}_{}$$

$$G(t,t') = e^{-\frac{\gamma}{M}(t-t')}\,\theta(t-t')$$

$$\Leftarrow$$

$$V(t) = \int_0^t d\tau\, e^{-\frac{\gamma}{M}(t-\tau)} F(\tau) + V_h(t)$$

με $V_h(t) = V_0\, e^{-\frac{\gamma}{M} t}$

Ας υπολογίσουμε το $\langle V^2(t)\rangle_\pi$ θεωρώντας το $F(t)$ ως στοχαστική διαδικασία και θέτοντας $\tilde{F}(t)=\frac{F(t)}{M}$:

$$V^2(t)=\left(V_h(t)+\int_0^t d\tau\, e^{-\frac{\gamma}{M}(t-\tau)}\tilde{F}(\tau)\right)^2 = V_h^2(t) + 2V_h(t)\int_0^t d\tau\, e^{-\frac{\gamma}{M}(t-\tau)}\tilde{F}(\tau) + \underbrace{\left[\int_0^t d\tau\, e^{-\frac{\gamma}{M}(t-\tau)}\tilde{F}(\tau)\right]^2}$$

γράφεται ως: $\int_0^t d\tau_1\, e^{-\frac{\gamma}{M}(t-\tau_1)}\tilde{F}(\tau_1)\int_0^t d\tau_2\, e^{-\frac{\gamma}{M}(t-\tau_2)}\tilde{F}(\tau_2)$

1ος όρος:

$$V_h^2(t)=V_0^2 e^{-\frac{2\gamma}{M}t}$$

δεν εξαρτάται από την "υλοποίηση" του περιβάλλοντος

$$\Downarrow$$

$$\langle V_h^2(t)\rangle_\pi = V_h^2(t) = V_0^2 e^{-\frac{2\gamma}{M}t}$$

2ος όρος:

$$\left\langle 2V_h(t)\int_0^t d\tau\, e^{-\frac{\gamma}{M}(t-\tau)}\tilde{F}(\tau)\right\rangle_\pi = 2V_0 e^{-\frac{\gamma}{M}t}\int_0^t d\tau\, e^{-\frac{\gamma}{M}(t-\tau)}\langle\tilde{F}(\tau)\rangle_\pi$$

3ος όρος:

$$\left\langle\left[\int_0^t d\tau\, e^{-\frac{\gamma}{M}(t-\tau)}F(\tau)\right]^2\right\rangle_\pi = \int_0^t d\tau_1\int_0^t d\tau_2\, e^{-\frac{2\gamma}{M}t}\, e^{\frac{\gamma}{M}(\tau_1+\tau_2)}\cdot\langle\tilde{F}(\tau_1)\tilde{F}(\tau_2)\rangle_\pi$$

Για να υπολογίσουμε το $\langle V^2(t)\rangle_\pi$ χρειαζόμαστε τα:

$$\underbrace{\langle\tilde{F}(\tau)\rangle_\pi \quad \text{και} \quad \langle\tilde{F}(\tau_1)\tilde{F}(\tau_2)\rangle_\pi}_{\text{χαρακτηρίζουν την στοχαστική διαδικασία}}$$

Αν υποθέσουμε περιβάλλον χωρίς "μνήμη" τότε:

$$\langle \tilde{F}(\tau_1)\tilde{F}(\tau_2)\rangle_\pi = \frac{C}{M^2}\delta(\tau_1-\tau_2)$$

ενώ, χωρίς βλάβη της γενικότητας, θέτουμε: $\langle \tilde{F}(\tau)\rangle_\pi = \emptyset$

Έτσι παίρνουμε τελικά: $\langle v(t)^2\rangle_\pi = V_0^2 e^{-\frac{2\gamma}{M}t} + \underbrace{\frac{C}{M^2}\int_0^t d\tau_1\int_0^t d\tau_2\, e^{-\frac{2\gamma}{M}t} e^{\frac{\gamma}{M}(\tau_1+\tau_2)}\delta(\tau_1-\tau_2)}_{=\frac{C}{M^2}e^{-\frac{2\gamma}{M}t}\int_0^t d\tau_1\, e^{\frac{2\gamma}{M}\tau_1} = \frac{C}{2\gamma M}\left(1-e^{-\frac{2\gamma}{M}t}\right)}$

Οπότε: $$\boxed{\langle v(t)^2\rangle_\pi = V_0^2 e^{-\frac{2\gamma}{M}t} + \frac{C}{2\gamma M}\left(1-e^{-\frac{2\gamma}{M}t}\right)}$$

$\Downarrow$

στάσιμη κατάσταση για $t\to\infty$ $\left(t \gg \frac{M}{2\gamma}\right)$ με $\lim_{t\to\infty}\langle v(t)^2\rangle_\pi = \frac{C}{2\gamma M}$

Μπορούμε να ορίσουμε θερμοκρασία T για το σύστημα μέσω της σχέσης:

$$\overline{V^2} = \frac{k_B T}{M} \quad \text{(Θερμική ισορροπία)}$$

Θα πρέπει να ισχύει: $\overline{V^2} = \frac{k_B T}{M} = \frac{C}{2\gamma M} \Rightarrow \boxed{C = 2\gamma k_B T} \Rightarrow$ Θεώρημα διακυμάνσεων-ανάλωσης (fluctuation-dissipation theorem)

Προσομοιώνοντας το περιβάλλον με αρμονικούς ταλαντωτές

Αναζητούμε μοντέλο ανοικτού συστήματος με κβαντικό ανάλογο που είναι διαχειρίσιμο:

$$H_{\Sigma\text{-}\Pi} = H_{\Sigma} + H_{\pi} + H_{\alpha\lambda.}$$

Μένουμε για απλότητα σε 1-D:

$$H_{\Sigma} = \frac{P^2}{2M} + V(X)$$

(X, P): συντεταγμένες χώρου φάσεων του Σ

Αρμονική

Γραμμική προσέγγιση για το περιβάλλον:

Ομοιογένεια: ίδιο m

$$H_{\pi} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{p_\alpha^2}{2m} + \frac{1}{2}m \sum_{\alpha=1}^{N} \omega_\alpha^2 x_\alpha^2$$

(x_α, p_α): συντεταγμένες χώρου φάσεων για το Π, $\alpha=1,..,N$

Αλληλεπίδραση Π-Σ στην απλούστερη εκδοχή της:

$$H_{\alpha\lambda.} = \sum_{\alpha=1}^{N} \lambda_\alpha x_\alpha X$$

(x_α, X εμφανίζονται γραμμικά)

Η Χαμιλτονιανή $H_{ΣΠ}$ μπορεί να γραφτεί:

$$H_{ΣΠ} = \frac{P^2}{2M} + V(X) + \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{p_\alpha^2}{2m} + \underbrace{\frac{1}{2} m \sum_{\alpha=1}^{N} \omega_a^2 x_a^2 + \sum_{\alpha=1}^{N} \lambda_a x_\alpha X}_{\frac{1}{2} m \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\omega_a x_a + \frac{\lambda_a}{m\omega_a} X\right)^2 - \frac{1}{2m} \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\frac{\lambda_a}{\omega_a}\right)^2 X^2}$$

Θα απαιτήσουμε επί πλέον το περιβάλλον Π να "ακολουθεί" το σύστημα Σ ⇒ ο όρος $\frac{1}{2} m \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\omega_a x_\alpha + \frac{\lambda_a}{m\omega_a} X\right)^2$ να μένει αναλλοίωτος στον μετασχηματισμό: $x_a' = x_a + \varepsilon$, $X' = X + \varepsilon$ $\forall\, \varepsilon \in \mathbb{R}$

Αυτό σημαίνει: $\left(\omega_a + \frac{\lambda_a}{m\omega_a}\right)\varepsilon = 0 \Rightarrow \lambda_a = -m\omega_a^2$

Θέτοντας $\tilde{V}(X) = V(X) - \frac{1}{2} m \sum_{\alpha=1}^{N} \omega_a^2 X^2$ η $H_{ΣΠ}$ γράφεται:

$$\boxed{H_{ΣΠ} = \frac{P^2}{2M} + \tilde{V}(X) + \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{p_a^2}{2m} + \frac{1}{2} m \sum_{\alpha=1}^{N} \omega_a^2 (x_a - X)^2}$$

Στο σύνθετο σύστημα Σ-Π μπορεί να μελετηθεί η χρονική εξέλιξη. Μας ενδιαφέρει κυρίως η εξέλιξη του Σ παρουσία του Π!

Δυναμική του Σ

(εξισώσεις για (X, P))

$$\frac{dX}{dt} = \frac{P}{M} \Rightarrow \frac{dP}{dt} = M\frac{d^2X}{dt^2}$$

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial \tilde{V}}{\partial X} - m\sum_{a=1}^{N}\omega_a^2(X - x_a)$$

Μπορούμε χωρίς βλάβη γενικότητας να θέσουμε $\tilde{V}(X) \to V(X)$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{M\frac{d^2X}{dt^2} + \frac{\partial V}{\partial X} = -m\sum_{\alpha=1}^{N}\omega_a^2(X - x_a)}$$

Δυναμική του Π

(εξισώσεις για (x_a, p_a))

$$\frac{dx_a}{dt} = \frac{p_a}{m} \Rightarrow \frac{dp_a}{dt} = m\frac{d^2x_a}{dt^2}$$

$$\frac{dp_a}{dt} = -m\omega_a^2(x_a - X)$$

$$\boxed{\frac{d^2x_a}{dt^2} + \omega_a^2 x_a = \omega_a^2 X}$$

$$\Downarrow$$

Επίλυση με συνάρτηση Green:

$$\frac{d^2G(t,t')}{dt^2} + \omega_a^2 G(t,t') = \delta(t-t')$$

$$\Downarrow$$

$$G(t,t') = \frac{1}{\omega_a}\sin\omega_a(t-t')\,\theta(t-t')$$

Δυναμική του Σ

$$M\frac{d^2X}{dt^2}+\frac{\partial V}{\partial X}=-m\sum_{\alpha=1}^{N}\omega_a^2\left(X-x_a\right)$$

$$\Downarrow$$

$$M\frac{d^2X}{dt^2}+\frac{\partial V}{\partial X}=m\sum_{a=1}^{N}\omega_a^2\left(x_a-X\right)$$

Θέτουμε:

$$F(t)=\sum_{a=1}^{N}m\omega_a^2\left((x_a(0)-X(0))\cos\omega_a t+\frac{p_a(0)}{m\omega_a}\sin\omega_a t\right)$$

και

$$\gamma(t)=m\sum_{a=1}^{N}\omega_a^2\cos\omega_a t$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{M\frac{d^2X}{dt^2}+\frac{\partial V}{\partial X}+\overbrace{\int_0^t d\tau\,\gamma(t-\tau)\frac{dX(\tau)}{d\tau}}^{\text{όρος τριβής}}=F(t)}$$

Γενικευμένη εξίσωση Langevin

Δυναμική του Π

$$x_{a,h}(t)=x_a(0)\cos\omega_a t+\frac{p_a(0)}{m\omega_a}\sin\omega_a t$$

οπότε:

$$x_a(t)=\underbrace{x_a(0)\cos\omega_a t+\frac{p_a(0)}{m\omega_a}\sin\omega_a t}_{x_{a,h}(t)}+\omega_a\int_0^t d\tau\,\sin\omega_a(t-\tau)X(\tau)$$

Ισχύει:

$$\int_0^t d\tau\,\sin\omega_a(t-\tau)X(\tau)=\frac{1}{\omega_a}\left\{\Big[\cos\omega_a(t-\tau)X(\tau)\Big]_0^t-\int_0^t d\tau\cos\omega_a(t-\tau)\frac{dX(\tau)}{d\tau}\right\}$$

$$\Downarrow$$

$$x_a(t)=x_a(0)\cos\omega_a t+\frac{p_a(0)}{m\omega_a}\sin\omega_a t+X(t)-\cos\omega_a t\,X(0)-\int_0^t d\tau\cos\omega_a(t-\tau)\frac{dX(\tau)}{d\tau}$$

$$\Downarrow$$

$$x_a-X=(x_a(0)-X(0))\cos\omega_a t+\frac{p_a(0)}{m\omega_a}\sin\omega_a t-\int_0^t d\tau\cos\omega_a(t-\tau)\frac{dX(\tau)}{d\tau}$$

$F(t)\rightarrow$ στοχαστική δύναμη (άγνοια των $x_a(0), p_a(0), \omega_a$), $\gamma(t)$: διαδότης $\underbrace{\text{μνήμης}}$ πυρήνας

Συνοψίζοντας

- Κλασικά ανοικτά συστήματα εξελίσσονται στο χρόνο με δυναμικούς νόμους που περιέχουν

Συνδέονται μεταξύ τους ⇒ Θεώρημα διακυμάνσεων-ανάλωσης

(α) Όρους τριβής ⇒ απώλεια ενέργειας του Σ
⇓
ασύμφωνη μεταφορά στο Π

(β) Στοχαστική εξωτερική δύναμη ⇒ ασύμφωνη μεταφορά ενέργειας από Π σε Σ

∴ Σε άπειρο χρόνο τα ανοικτά συστήματα μπορούν να προσεγγίσουν στάσιμες καταστάσεις (ισορροπία) (εφικτή ενεργός περιγραφή ως κλειστό σύστημα)