Известия НАН Армении, Физика, т.42, №1, с.3-8 (2007)

УДК 535.14

ЭРГОДИЧНОСТЬ В КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ КВАНТОВЫХ ДИССИПАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ

А.О. АДАМЯН[1], Т.В. ГЕВОРГЯН[2], Г.Ю. КРЮЧКЯН[1,2]

[1]Институт физических исследований НАН Армении

[2]Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 29 апреля 2006 г.)

Принцип эргодичности квантовой теории использован для разработки нового метода квантовых траекторий, который используется для численного моделирования квантовых диссипативных систем. С этой целью матрица плотности квантовой системы представлена в виде суммирования по ансамблю квантовых состояний временных интервалов. Метод использован для численных расчетов квантового ангармонического осциллятора.

1. Введение

Квантовые открытые системы, как правило, описываются с помощью матрицы плотности, но не в рамках уравнения Шредингера для вектора состояния. Основным уравнением в таком подходе является уравнение для редуцированной матрицы плотности $\rho(t)$, т.е. матрицы плотности открытой системы, которая усреднена по переменным резервуара. В марковском приближении такое уравнение имеет следующий вид:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{h}\left[H,\rho\right] + \sum_i \left(L_i \rho L_i^+ - \frac{1}{2} L_i^+ L_i \rho - \frac{1}{2} \rho L_i^+ L_i \right) , \qquad (1)$$

где H является гамильтонианом системы и L_i представляют операторы Линд- блада, которые описывают взаимодействие системы с резервуаром [1]. В большинстве случаев не удается найти аналитические решения уравнения (1), и поэтому используются численные методы. Обычно при численных вычислениях матрица плотности записывается через базисные квантовые состояния в гильбертовом пространстве. Такой метод является удобным, когда число базисных состояний m достаточно мало, и не является практичным для больших m, т.к. число элементов матрицы плотности растет как m^2. Тем не менее, при решении большинства квантово-механических проблем мы вынуждены оперировать с большим числом базисных состояний. В таких случаях очень эффективным оказывается представление матрицы плотности в форме статистического среднего по ансамблю квантовых траекторий. Такой подход оказывается намного более экономичным в компьютерных вычислениях как с точки зрения объема записи данных, так и компьютерного времени вычислений. В последние

годы развиты два численных метода вычисления матрицы плотности через среднее по ансамблю квантовых траекторий: метод квантовых скачков, или метод Монте-Карло для вектора состояния, и метод диффузии квантового состояния (ДКС) [2,3]. Если взаимодействие квантовой системы с окружением является достаточно сильным, чтобы привести к эффекту локализации динамических переменных системы, то предпочтительным является другой метод – диффузии квантовых состояний с движущимся базисом [4]. В настоящей работе предложена модификация метода ДКС, которая позволяет существенно сэкономить вычислительные ресурсы в приложениях к исследованию диссипативных квантовых систем.

2. Использование принципа эргодичности в методе ДКС

Основная идея, использованная в предложенном подходе состоит в комбинировании принципа эргодичности в квантовой теории с ДКС-методом квантовых траекторий. Как известно, в методе ДКС используется ансамбль стохастических векторов состояний систем $\left|\Psi_\xi(t)\right\rangle$, а матрица плотности представляется в следующем виде:

$$\rho(t) = M\left(\left|\Psi_\xi(t)\right\rangle\left\langle\Psi_\xi(t)\right|\right) = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{\xi}^{N}\left|\Psi_\xi(t)\right\rangle\left\langle\Psi_\xi(t)\right|. \qquad (2)$$

Здесь M означает усреднение по ансамблю, а состояния ансамбля удовлетворяют следующему уравнению для квантовых траекторий:

$$\begin{aligned}\left|d\Psi_\xi\right\rangle = \frac{i}{\hbar}H\left|\Psi_\xi\right\rangle dt - \frac{1}{2}\sum_j\left(L_j^+L_j + \left\langle L_j^+\right\rangle\left\langle L_j\right\rangle - 2\left\langle L_j^+\right\rangle L_j\right)\left|\Psi_\xi\right\rangle dt + \\ + \sum_j\left(L_j - \left\langle L_j\right\rangle\right)\left|\Psi_\xi\right\rangle d\xi_j\,,\end{aligned} \qquad (3)$$

где $\left\langle L_j\right\rangle = \left\langle\Psi_\xi(t)\right|L_j\left|\Psi_\xi(t)\right\rangle$ и $d\xi_j$ являются независимыми комплексными случайными переменными, удовлетворяющими условиям

$$M\left(d\xi_j\right) = M\left(d\xi_j d\xi_k\right) = 0\,, \qquad M\left(d\xi_j d\xi_k^*\right) = \delta_{jk}dt\,. \qquad (4)$$

При таком подходе среднее значение произвольного оператора представляется как квантовомеханическое среднее <...> по состоянию $\left|\Psi_\xi(t)\right\rangle$ и усреднению по ансамблю траекторий:

$$\bar{F}(t) = M\left\langle\Psi_\xi(t)\right|\hat{F}\left|\Psi_\xi(t)\right\rangle. \qquad (5)$$

Такой подход является очень эффективным при численном моделировании квантовых открытых систем. Некоторые примеры в области квантовой оптики приведены в работах [5-7]. В настоящей работе показывается, что произвольное среднее значение можно представить как среднее по одной из траекторий, однако вычисленной для различных временных интервалов. Действительно, рассмотрим стохастическое состояние $\left|\Psi_\xi(t)\right\rangle$ для случайной последовательности временных интервалов, которые для определенности представим в виде возрастающей последовательности $t_1 < t_2 < .... < t_n$. Используя последовательность квантовых состояний $\left|\Psi_\xi(t+t_n)\right\rangle$, запишем матрицу плотности в следуюшем виде:

$$\rho(t) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{n}^{N} \left|\Psi_{\xi}(t+t_n)\right\rangle \left\langle \Psi_{\xi}(t+t_n)\right| . \qquad (6)$$

Нетрудно непосредственно проверить, что если квантовые состояния $\left|\Psi_{\xi}(t)\right\rangle$ удовлетворяют уравнению (3), то матрица плотности в форме (5) удовлетворяет уравнению (1). Отличие между результатами (2) и (6) состоит в том, что выражение (6) содержит суммирование по случайным временным интервалам одной из квантовых траекторий стохастического процесса ξ вместо суммирования по ансамблю траекторий, как в формуле (2). Такое заключение является следствием эргодичности квантовой теории, сформулированной для ДКС метода. Иллюстрация метода приводится на рис.1 и 2. Ниже также приводятся применения этого метода к двум диссипативным квантовым системам, которые описываются не зависящим от времени гамильтонианом, а также гамильтонианом, периодическим по времени.

3. Квантовые вычисления для диссипативного нелинейного осциллятора

Хотя приведенные ниже результаты имеют общий характер, для конкретности будет рассмотрен квантовый ангармонический осцилятор под действием вынуждающей силы [5-7]. Квантовая динамика системы описывается уравнением (1) для редуцированной матрицы плотности в представлении взаимодействия, где гамильтониан имеет следующий вид:

$$H = \hbar\Delta a^{+}a + \hbar\left(f(t)a^{+} + f^{*}(t)a\right) + \hbar\chi\left(a^{+}a\right)^{2} . \qquad (7)$$

Здесь a^{+}, a – операторы рождения и уничтожения, $\Delta = \omega_0 - \omega$ есть расстройка резонанса от собственной частоты осциллятора ω_0 и χ является параметром ангармоничности. В качестве возмущения рассмотрен сигнал на несущей частоте ω и с модулированной амплитудой в следующей форме:

$$f(t) = \Omega_1 + \Omega_2 \exp(-i\delta t) , \qquad (8)$$

где δ есть модуляционная частота, $\delta << \omega$. Данная система взаимодействует с резервуаром, что приводит к диссипации осцилляторных состояний. Эти эффекты описываются последними членами в уравнении (1), где операторы Линдблада в этом случае равны: $L_1 = \sqrt{(N_R+1)\gamma}a$, $L_2 = \sqrt{N_R\gamma}a^{+}$, причем, γ является параметром затухания и N_R обозначает среднее число квантов резервуара. Отметим, что эта модель соответствует модифицированной модели осциллятора Дюфинга и для случая $\Omega_2 = 0$ преобразуется в обычную модель ангармонического осциллятора под действием монохроматического возмущения.

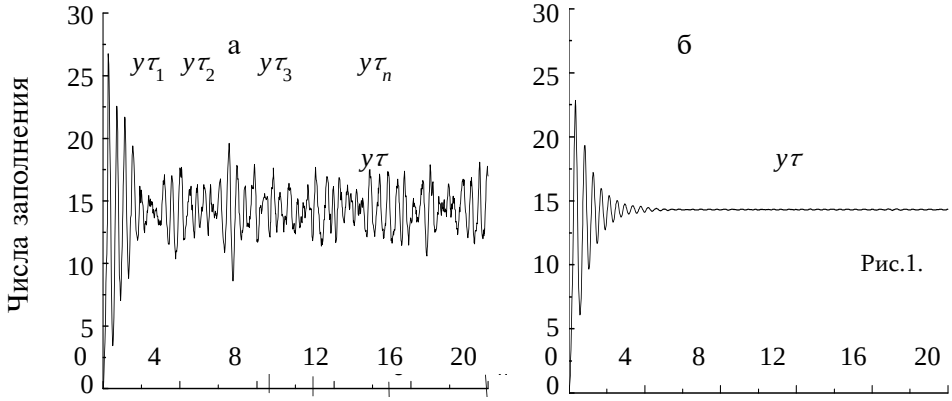
3.1. Случай стационарного гамильтониана

Эта ситуация может быть реализована, в частности, в приведенной модели осциллятора при отсутствии модуляции, $\Omega_2 = 0$. В этом случае гамильтониан (7) не зависит от времени и выражение (6) может быть представлено в более простой, интегральной форме. Для этого в выражении (6) выбираем временные интервалы как $t_n = t_0 + n\Delta t$ и переходим к пределу $\Delta t \to 0$, $n \to \infty$ при условии, что $T = N\Delta t$ является конечным. Таким образом, пе-

реходя в выражении (6) от усреднения по дискретным временным интервалам к интегрированию по произвольному интервалу T, получаем:

$$\rho(t)=\frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_0+T}\left|\Psi_\xi(t+\tau)\right\rangle\left\langle\Psi_\xi(t+\tau)\right|d\tau\,. \qquad (9)$$

Иллюстрация этого метода на примере вычисления среднего значения чисел заполнения осциллятора $n=\left\langle a^+a\right\rangle$ приведена на рис.1. Здесь сравниваются результаты вычисления отдельной траектории с результатом усреднения ансамбля траекторий по формуле (2).



Числа заполнений ангармонического осциллятора под действием монохроматического возмущения в зависимости от параметра γt: а) временная эволюция одной из траекторий для характерных значений параметров, б) среднее значение чисел заполнения в результате суммирования по ансамблю траекторий для этих же параметров. Приведена иллюстрация процедуры выбора случайных временных интервалов.

Другая наша цель состояла в сравнении вычислений среднего значения чисел заполнения осциллятора по формулам (2) и (9). Вычисления показали, что выражение для матрицы плотности (9) приводит к результатам, совпадающим с приведенными на рис.1б только лишь в области временных интервалов $t>>\gamma^{-1}$, при $t_0, T>>\gamma^{-1}$. Таким образом, можно заключить, что область применения выражения (9) ограничивается временными интервалами, превосходящими переходной режим.

3.2. Случай периодического по времени гамильтониана

Другое интересное представление формулы (6) можно получить для квантовых систем с периодическим по времени гамильтонианом. В этом случае $H(t+T)=H(t)$, поэтому представляется возможным выбрать последовательность временных интервалов следующим образом: $t_n=nT$ (n = 1, 2, ...). Легко проверить, что эта процедура приводит к следующему

результату для матрицы плотности:

$$\rho(t) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}\sum_{n}^{N} \left|\Psi_{\xi}(t+nT)\right\rangle\left\langle\Psi_{\xi}(t+nT)\right|. \qquad (10)$$

Легко видеть, что именно такой случай реализуется для модели ангармонического осциллятора с амплитудной модуляцией, $\Omega_2 \neq 0$, в которой период гамильтониана равен $T = 2\pi/\delta$. Приведем результаты численных расчетов чисел заполнения осциллятора для одной траектории (рис.2а) и среднего значения $n = \langle a^{+}a \rangle$ для ансамбля траекторий, вычисленного по формуле (6) рис.2б. Анализ показывает, что представление матрицы плотности в форме усреднения по различным участкам траектории (9) действительно приводит к результатам рис.2б для временного интервала $t \geq 4\gamma^{-1}$, превосходящего переходной режим.

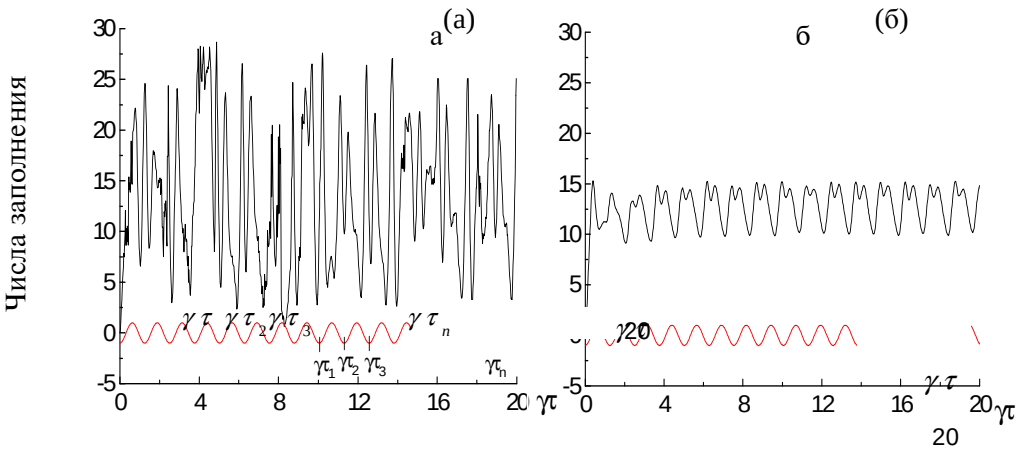


Рис.2. Численные расчеты для чисел заполнения ангармонического осцилятора под действием возмущения с амплитудной модуляцией для характерных значений параметров: а) временная эволюция одной из траекторий, где указана процедура выбора временных интервалов; б) среднее значение чисел заполнения в результате усреднения по траекториям. Ниже приводится временная зависимость возмущения в произвольных единицах.

Таким образом, можно заключить, что формулировка метода ДКС в рамках усреднения по различным временным интервалам одной из произвольных траекторий аналогична обычному методу ДКС, который основан на стохастическом усреднении, однако, для временных интервалов, соответствующих отрелаксированному режиму. Вместе с этим, очевидно, что приведенный подход, основанный на принципе эргодичности, намного более эффективен для вычислений в области ольших временных интервало ıозволяет существенно сэкономить компьютерное время.

Данная работа поддержана грантом INTAS 04-77-7289.

ЛИТЕРАТУРА

1. **C.W.Gardiner**. Quantum Noise. Springer, Berlin, 1992.
2. **N.Gisin, I.C.Percival.** J. Phys., **A 25**, 5677 (1992).
3. **H.J.Carmichael.** An Open Systems Approach to Quantum Optics. Springer, Berlin, 1993.
4. **R.Schack**, **T.A.Brun**, **L.C.Percival**. J. Phys., **A 28**, 5401 (1995).
5. **H.H.Adamyan, S.B.Manvelyan**, **G.Yu.Kryuchkyan.** Phys. Rev., **A63**, 022102 (2001).
6. **H.H.Adamyan, S.B.Manvelyan**, **G.Yu.Kryuchkyan.** Phys. Rev., **E64**, 046219 (2001).
7. **G.Yu.Kryuchkyan, S.B.Manvelyan.** Phys. Rev. Lett., **88**, 094101 (2002).

ԷՐԳՈԴԻԿՈՒԹՅՈՒՆԸ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԴԻՍԻՊԱՏԻՎ ՊՐՈՑԵՍՆԵՐԻ ՀԱՄԱԿԱՐԳՉԱՅԻՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՈՒՄՈՒՄ

Հ.Հ. ԱԴԱՄՅԱՆ, Տ.Վ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Գ.Յու. ԿՐՅՈՒՉԿՅԱՆ

Քվանտային տեսության էրգոդիկության սկզբունքը օգտագործված է քվանտային դիսիպատիվ համակարգերի թվային մոդելավորման, քվանտային հետագծերի նոր մեթոդի մշակման համար: Այդ նպատակով քվանտային համակարգի խտության մատրիցը ներկայացված է ժամանակային ինտերվալների ըստ անսամբլի քվանտային վիճակների գումարման տեսքով: Մեթոդը կիրառված է քվանտային անհարմոնիկ տատանակի թվային հաշվարկների համար:

ERGODICITY IN COMPUTER MODELING OF QUANTUM DISSIPATIVE PROCESSES

H.H. ADAMYAN, T.V. GEVORGYAN, G.Yu. KRYUCHKYAN

The ergodicity of quantum theory is used for modification of quantum trajectories approach proposed for numerical simulation of quantum dissipative systems. For this goal the reduced density operator of a quantum system is represented via an ensemble of quantum states for random time intervals. This approach is illustrated for numerical simulations of a time-modulated anharmonic oscillator.