

افزایش بازده انتقال انرژی در سیستم‌های کوانتومی باز تحریک شده: رهیافت فلوکه

زهره نفری قلعه^۱ و علی رضاخانی^۱

^۱دانشگاه صنعتی شریف

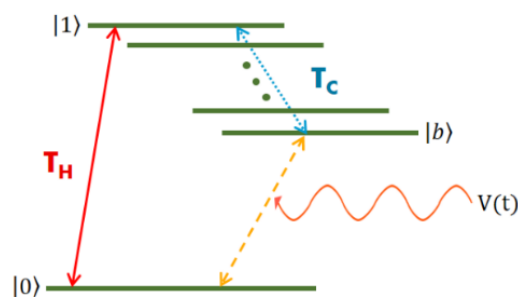
چکیده

در مقاله‌ی پیش رو اثر میدان خارجی بر انتقال انرژی در یک سیستم کوانتومی باز به یک حالت هدف بررسی شده است. برای این منظور از رهیافت فلوکه در استخراج معادله حرکت ماتریس چگالی کاهش یافته استفاده شده است، چرا که همیتونی سیستم وابسته به زمان می‌باشد و معادله لیندبلادی معمولی توصیف دقیقی از دینامیک سیستم کاهش یافته در اختیار نمی‌گذارد.

سیستم‌های کوانتومی بدلیل تماس با محیط پیرامون خود بطور کلی باز می‌باشند. بنا به دلایلی علاقمند هستیم تا این سیستم کوانتومی در یک انرژی خاصی قرار گیرد. بعنوان مثال در فوتو سنتز آن انرژی معین صرف جدایش بار در مرکز واکنش می‌شود [۱]. بنابراین بعد از ایجاد برانگیختگی در سیستم (بوسیله یک عامل خارجی همچون نور خورشید یا پالس لیزر)، یعنی قرارگیری سیستم در ویژه حالت مربوطه قصد داریم تا سیستم در ویژه حالت مربوط به انرژی مطلوب قرار گیرد. پس انتقال انرژی بین حالت‌های یک سیستم کوانتومی خواهیم داشت. از آنجاییکه سیستم کوانتومی باز است پس گذار بین ویژه حالت‌های سیستم امکانپذیر خواهد بود. در آخر بمنظور کمی کردن موفقیت آمیز بودن این فرآیند، جمعیت ویژه حالت هدف در طول زمان مشخص می‌شود. رابطه‌ی ۱ بازده انتقال انرژی به حالت مطلوب را نشان می‌دهد که بین ۰ و ۱ بهنجار شده است.

$$\eta = \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} dt \langle target | \rho(t) | target \rangle, \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad (1)$$

پس سیستم موردنظر در تماس با دو حمام قرار دارد: حمام گرم که مسئول ایجاد برانگیختگی اولیه در سیستم است (در دمای T_H) و حمام سرد که در واقع محیط پیرامون سیستم کوانتومی می‌باشد (در دمای T_C) و باعث گذار بین دیگر ویژه حالت‌های برانگیخته است. در این مقاله به دنبال افزایش دادن بازده انتقال انرژی در حالت هدف می‌باشیم. برای این منظور اثر میدان الکتریکی را بررسی نموده‌ایم. در شکل ۱ طرحواره‌ای از سیستم موردنظر نشان داده شده است.



شکل ۱: طرحواره‌ای از سیستم موردنظر. محیط گرم باعث ایجاد برانگیختگی در سیستم شده و محیط سرد سبب گذار بین ترازهای برانگیخته میانی می‌گردد. میدان خارجی تراز هدف و پایه را به یکدیگر جفت کرده است

ساده‌ترین دینامیک برای سیستم‌های کوانتومی باز با معادله‌ی معروف لیندبلاد داده می‌شود که در آن همیتونی سیستم مستقل از زمان می‌باشد و محیط یک حمام گرمایی است. هنگامیکه همیتونی سیستم وابسته به زمان باشد معادله تحول ماتریس چگالی سیستم کاهش یافته دستخوش تغییر می‌شود. در مواردی که وابستگی زمانی همیتونی سیستم، متناوب در

زمان باشد، می توان به کمک نظریه فلوکه (رابطه ی ۲ را ببینید)، شکل نسبتاً ساده ای برای دینامیک سیستم کاهش یافته پیدا کرد. مطابق با نظریه فلوکه در سیستم های متناوب در زمان، عملگر تحول سیستم را می توان بصورت معادله ی ۲ نوشت که در آن $P(t, t_0)$ عملگری متناوب با تناوب T و یکانی می باشد و \bar{H} که همیلتونی فلوکه نام دارد عملگری مستقل از زمان و هرمیتی می باشد.

$$U(t, t_0) = P(t, t_0)e^{-i(t-t_0)\bar{H}/\hbar}, \quad P(t_0 + nT, t_0) = \mathbb{I} \quad (2)$$

در اینصورت با در نظر گرفتن فرض هایی که در معادله لیندبلاد معروف نیز وجود دارد (یعنی تقریب های بورن-مارکوف و موج چرخان)، و برای کلی ترین شکل برهمکنش سیستم و حمام (یعنی $H_{int} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha}$)، معادله تحول سیستم کاهش یافته در تصویر برهمکنش با معادله ی ۳ داده خواهد شد [۲].

$$\frac{d\rho_s(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H_{LS}, \rho_s(t)] + \mathcal{D}[\rho_s(t)] \quad (3)$$

که در آن H_{LS} همیلتونی لمب-شیف و $\mathcal{D}[\rho_s(t)]$ قسمت اتلافی و ناهمدوس دینامیک می باشد. Ω فرکانس همیلتونی سیستم وابسته به زمان می باشد.

$$H_{LS} = \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\omega} \sum_q \frac{1}{\hbar} S_{\alpha\beta}(\omega + q\Omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega, q) A_{\beta}(\omega, q) \quad (4)$$

$$\mathcal{D}[\rho_s(t)] = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\omega} \sum_q \gamma_{\alpha\beta}(\omega + q\Omega) \left[A_{\beta}(\omega, q) \rho_s(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega, q) - \frac{1}{2} \{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega, q) A_{\beta}(\omega, q), \rho_s(t) \} \right] \quad (5)$$

که در آن ضرایب $S_{\alpha\beta}$ و $\gamma_{\alpha\beta}$ بترتیب قسمت های حقیقی و موهی تابع همبستگی محیط می باشند

$$\Gamma_{\alpha\beta}(x) = \int_0^{+\infty} ds e^{-isx} \langle B_{\alpha}^{\dagger}(s) B_{\beta}(0) \rangle = \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta}(x) + i S_{\alpha\beta}(x) \quad (6)$$

همچنین اپراتورهای لیندبلاد بصورت زیر هستند

$$A_{\alpha}(q, \omega) = \sum_{\epsilon_i - \epsilon_j} \Pi_i A_{\alpha}(q) \Pi_j \quad (7)$$

که در آن

$$\bar{H}|\varphi_k\rangle = \epsilon_k|\varphi_k\rangle \quad \Pi_i = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \quad A_{\alpha}(q) = P^{\dagger}(t, t_0) A_{\alpha} P(t, t_0) \quad (8)$$

بمنظور بررسی اثر میدان متناوب خارجی، یک سیستم سه ترازه را مورد مطالعه قرار داده ایم. همیلتونی کل در ادامه قابل

مشاهده است

$$H_{tot}(t) = H_s(t) + H_h + H_c + H_{sh} + H_{sc} \quad (9)$$

که همیلتونی سیستم (۱۰) شامل دو بخش میباشد، همیلتونی آزاد و برهمکنش با میدان الکتریکی خارجی (روابط ۱۱ و ۱۲)

$$H_s(t) = H_0 + V(t) \quad (10)$$

$$V(t) = \eta \cos \Omega t (|0\rangle\langle b| + |b\rangle\langle 0|) \quad (11)$$

$$H_0 = \epsilon_0 |0\rangle\langle 0| + \epsilon_1 |1\rangle\langle 1| + \epsilon_b |b\rangle\langle b| \quad (12)$$

رابطه ۱۳ همیلتونی حمام های بوزونی را نشان می دهد که در آن رابطه جابه جاگری شان قابل مشاهده است

$$H_i = \sum_k \hbar \omega_k a_k^{\dagger} a_k, \quad [a_i, a_k^{\dagger}] = \delta_{i,k}, \quad i = c, h \quad (13)$$

روابط ۱۴ و ۱۵ برهمکنش سیستم با دو حمام را نشان می دهند که از نوع اتلافی می باشد

$$H_{sh} = \sum_k \lambda_k (\sigma_h^+ a_k + \sigma_h^- a_k^{\dagger}), \quad \sigma_h^+ = |1\rangle\langle 0| \quad (14)$$

$$H_{sc} = \sum_k g_k (\sigma_c^+ b_k + \sigma_c^- b_k^{\dagger}), \quad \sigma_c^+ = |1\rangle\langle b| \quad (15)$$

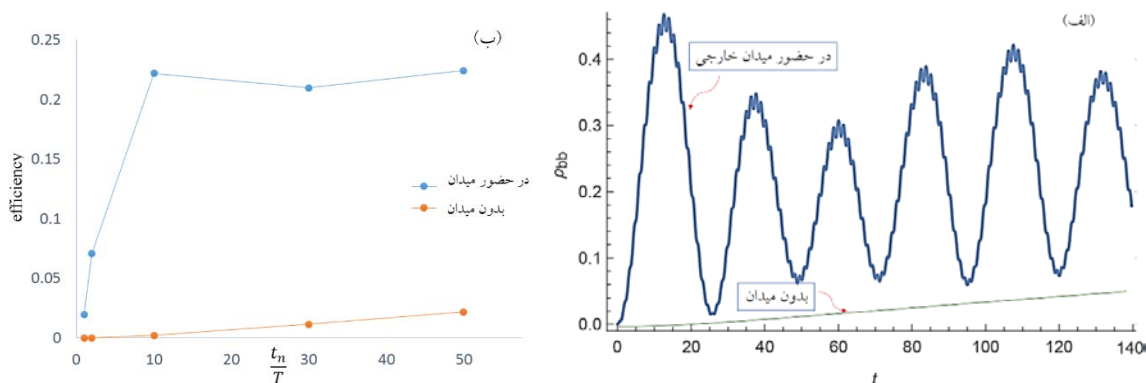
تابع چگالی طیفی هر دو محیط بصورت اهمی فرض شده است (معادله ۱۶). در جدول ۱ ثابت‌های ورودی آورده شده است.

$$J_i(\omega) = J_{0i} \omega e^{-\frac{\omega^2}{\omega_{ci}^2}} \quad (16)$$

جدول ۱: ثوابت ورودی مسئله مربوط به سیستم سه ترازه

η	Ω	T	ϵ_0	ϵ_1	ϵ_b	β_h	β_c	J_{0h}	J_{0c}	ω_{ch}	ω_{cc}
0.1	$\frac{18}{8}$	$\frac{2\pi}{\Omega}$	0	3	$\frac{5}{2}$	$\frac{1}{30}$	$\frac{1}{4}$	0.0004	0.004	$\sqrt{2}$	$\sqrt{0.2}$

برای روشن شدن اثر میدان خارجی، این سیستم را بدون حضور میدان خارجی نیز بررسی نموده‌ایم یعنی صرفاً سیستم در تماس با دو حمام گرمایی است. نتایج مربوط به مقدار جمعیت تراز هدف بر حسب زمان و همچنین بازده انتقال انرژی به تراز هدف بر حسب زمان نهایی بترتیب در شکل‌های ۲-الف و ۲-ب قابل مشاهده می‌باشند. لازم به ذکر است برای بدست آوردن عملگرهای موجود در معادله دینامیکی، در گام نخست همیلتونی فلوکه محاسبه شده است. با توجه به معادله ۲، همیلتونی فلوکه برابر است با $\bar{H} = \frac{i\hbar}{T} \ln[U(T)]$ ، پس لازم است عملگر تحول سیستم را به شکل نمایی داشت. از آنجاییکه $U(t, 0) = U_0(t, 0)U_1(t, 0)$ ابتدا $U_1(t, 0)$ را بکمک بسط Magnus (تا مرتبه ۳) بدست می‌آوریم و سپس به کمک بسط Campbell-Baker-Hausdorff عملگر تحول سیستم در تصویر شرودینگر را به شکل $e^{\mathcal{E}(t)}$ خواهیم داشت و از آنجا همیلتونی فلوکه و عملگر $P(t, t_0)$ و در ادامه عملگرهای $A\alpha(\omega, q)$ حاصل می‌شوند. لازم به ذکر این حل تقریبی با حل عددی مقایسه شده است و پارامترهای مسئله به گونه‌ای انتخاب شده‌اند تا این دو حل با تقریب خوبی یکی شوند.



شکل ۲: نتایج مربوط به سیستم سه ترازه‌ای که در مجاورت دو حمام گرمایی قرار دارد (الف) جمعیت تراز هدف برای زمان نهایی $50T$ در حضور و غیاب میدان خارجی. (الف) بازده انتقال انرژی به تراز هدف بر حسب زمان نهایی (رابطه ۱)

همانطور که مشاهده می‌شود در حضور میدان خارجی جمعیت تراز هدف رفتار نوسانی دارد. علت این امر جفت شدن این تراز و تراز پایه با میدان خارجی می‌باشد که منجر به پر و خالی شدن این دو تراز می‌گردد. همچنین با توجه به نمودار ۲-الف مقدار جمعیت تراز هدف در حضور میدان خارجی در تمامی لحظات (حداقل تا $50T$)، بیشتر از زمان مشابه و در غیاب میدان است. نمودار ۲-ب مقایسه روشنی بر حسب بازده انتقال انرژی به تراز هدف (مطابق با رابطه ۱) نیز ارائه می‌دهد. بنابراین میدان خارجی بطور چشمگیری باعث افزایش بازده انتقال انرژی به سایت هدف می‌شود. در هر دو مورد، پس از ایجاد برانگیختگی بوسیله‌ی حمام گرم و پر شدن تراز ۱، حمام گرمایی سرد باعث گذار از تراز ۱ به تراز هدف

خواهد شد. از طرفی هنگامیکه میدان خارجی ترازهای هدف و پایه را به یکدیگر جفت می‌کند، سبب پرشدن تراز هدف بطور مستقیم از تراز پایه نیز خواهد شد، لذا شاهد رفتار اینچنینی می‌باشیم.

مرجع‌ها

1. Yuan-Chung Cheng and Graham R. Fleming, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **60**:241–62 (2009)
2. Krzysztof Szczygielski, *Journal of Mathematical Physics* **55**, 083506 (2014)