

# Atvirų kvantinių sistemų skaičiavimai: pernašos tenzorių metodo pritaikomumas

## Open quantum systems calculations: applicability of transfer tensor method

Edvardas Rybakovas<sup>1,2</sup>, Andrius Gelžinis<sup>1,2</sup>, Leonas Valkūnas<sup>1,2</sup>

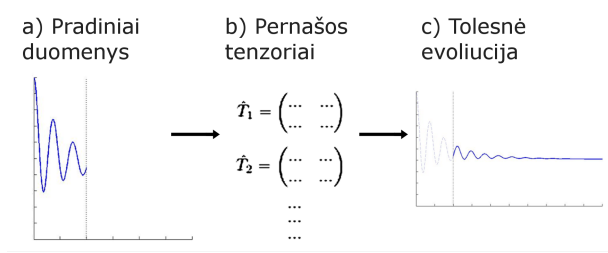
<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, 10222 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

[edvardas.rybakovas@ff.stud.vu.lt](mailto:edvardas.rybakovas@ff.stud.vu.lt)

Kvantinės sistemos, kurios sąveikauja su aplinka vadinamos atviromis. Tokių sistemų dinamika aprašoma pasitelkiant tankio matricos formalizmą. Yra išvesta nemažai metodų, leidžiančių skaičiuoti atvirų kvantinių sistemų dinamiką [1], tačiau visi jie turi trūkumų: vieni lėti, kiti kelia apribojimus parametrų.

Neseniai (2014 metais) J. Cerrilo ir J. Cao pasiūlė dar vieną metodą - pernašos tenzorius [2]. Tai tikslus, greitas ir nesudėtingas metodas, tačiau jis, kaip ir visi kiti, vis tiek nėra idealus - metodas reikalauja nemažai pradinio duomenų, suskaičiuotų kitu metodu.

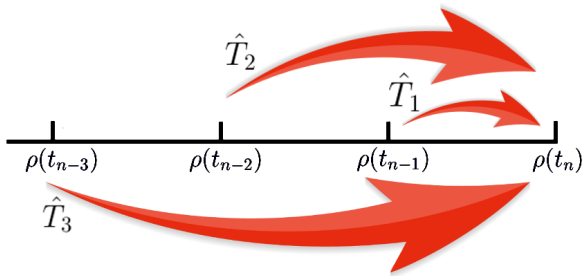


1 pav. Pernašos tenzorių metodo veikimo principas.

Pernašos tenzorių metodas veikia taip (žr. 1 pav.): pasirinktu kitu metodu suskaičiuojamas sistemos evoliucijos superoperatorius (skaičiuojant sistemos tankio matricos  $\rho$  evoliucijas iki tam tikro laiko esant skirtingoms pradinėms sąlygoms), iš šių duomenų sukonstruojami pernašos tenzoriai (matricos)  $\hat{T}$ , o tolesnė sistemos tankio matricos evoliucija skaičiuojama pagal lygtį:

$$\rho(t_n) = \sum_{m=1}^K \hat{T}_m \rho(t_{n-m}) \quad (1)$$

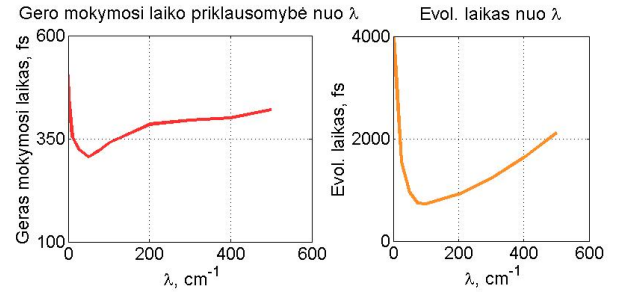
Iš (1) lygties nesunku suprasti pernašos tenzorių fizikinę prasmę. Jie rodo, kokią įtaką praeiti laiko momentai daro būsimam laiko momentui (žr. 2 pav.).



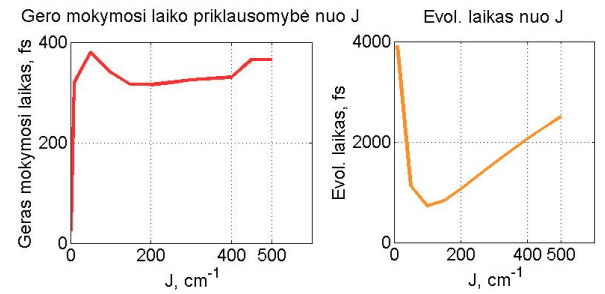
2 pav. Pernašos tenzorių fizikinė prasmė.

Laiką, iki kurio suskaičiuoti pradiniai duomenys, galima vadinti **mokymosi laiku**. Geras mokymosi laikas yra mažiausias mokymosi laikas, su kuriuo tolesnė evoliucija skaičiuojama pakankamai tiksliai. Pernašos tenzorių metodu išlošiama daugiausiai, kai gero mokymosi laiko ir evoliucijos trukmės (laiko, kurio reikia, kad būtų pasiekta pusiausvyra) santykis mažiausias.

Šiame darbe pateikiamas šių laikų palyginimas dimere. 3 pav. ir 4 pav. pavaizduotos gero mokymosi laiko ir sistemos evoliucijos laiko priklausomybės nuo reorganizacijos energijos  $\lambda$  (sąveikos su aplinka stiprumo) ir rezonansinės sąveikos (sąveikos tarp sistemos lygmenų stiprumo)  $J$  atitinkamai. Iš šių rezultatų galima teigti, jog metodą prasmingiausia naudoti esant didelėms (palyginus su kitais parametrais)  $\lambda$  arba  $J$  vėrtėms.



3 pav. Gero mokymosi laiko ir sistemos evoliucijos laiko priklausomybės nuo reorganizacijos energijos  $\lambda$ .



4 pav. Gero mokymosi laiko ir sistemos evoliucijos laiko priklausomybės nuo rezonansinės sąveikos  $J$ .

**Reikšminiai žodžiai:** atviros kvantinės sistemos, dinamika, pernašos tenzoriai

### Literatūra

- [1] L. Valkūnas, D. Abramavicius, and T. Mančal, *Molecular Excitation Dynamics and Relaxation* (Wiley-VCH, Berlin, 2013).
- [2] J. Cerrillo and J. Cao, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 110401 (2014).