Spin-Boson model

Задача данного семинара — на *микроскопическом* уровне изучить динамику открытой системы, взаимодействующей с окружением. Изучать её мы будем на примере простейшей модели, которую можно придумать — так называемой **спин-бозонной модели** (**spin-boson model**). Система (s, system) будет представлять собой двухуровневую систему (это может быть спин-1/2 в магнитном поле, это может быть частица в двухъямном потенциале[1] — детали совершенно не важны), которую мы будем описывать на языке спина-1/2 и матриц Паули. В качестве модели окружающей среды (e, environment; также часто её называют **баней — bath**) мы возьмём набор гармонических осцилляторов. Запишем гамильтониан всей системы в следующем виде:

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_n \omega_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n}_{\hat{H}_e} + \underbrace{\frac{\Delta}{2}\hat{\sigma}_z}_{\hat{H}_s} + \underbrace{\hat{\sigma}_x \sum_n \lambda_n \hat{X}_n}_{\hat{V}}, \quad \hat{X}_n = \hat{a}_n + \hat{a}_n^\dagger \tag{1}$$

Такой вид взаимодействия обусловлен следующими простыми соображениями. Во-первых, ничего сложнее чем какая-то линейная комбинация матриц Паули для двухуровневой системы предложить нельзя; поэтому взаимодействие линейно по $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ (без ограничения общности[2] можно устроить взаимодействие именно посредством $\hat{\sigma}_x$). Во-вторых, мы будем предполагать, что отклонения осцилляторов от положения равновесия будут в каком-то смысле малы, и поэтому «сила» раскладывается линейно по отклонениям $\hat{X}$.

В принципе, вся система s+e является замкнутой и допускает описание на языке волновых функций. Однако интересоваться мы будем именно динамикой двухуровневой системы, для описания которой необходимо ввести редуцированную матрицу плотности $\hat{\rho}_s(t) = \mathrm{Tr}_e \hat{\rho}(t)$, где $\hat{\rho}(t)$ — матрица плотности всей системы, а операция Tr_e подразумевает взятие частичного следа по степеням свободы окружающей среды. Полученный в результате такой операции объект — это матрица 2×2.

Сразу обсудим, что величины λ_n будут предполагаться в каком-то смысле маленькими (приближение **слабой связи**), и дальше мы будем исследовать задачу в рамках теории возмущений по взаимодействию $\hat{V}$.

Представление взаимодействия

Работать мы будем в операторном формализме, используя представление взаимодействия по отношению к невозмущённому гамильтониану $\hat{H}_e + \hat{H}_s$ и с возмущением $\hat{V}$. Давайте выпишем формулы, как устроены операторы в представлении взаимодействия в нашей задаче:

$$\frac{d\hat{a}_n}{dt} = i[\hat{H}_e, \hat{a}_n] = i[\omega_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n, \hat{a}_n] = -i\omega_n \hat{a}_n \Rightarrow \hat{a}_n(t) = \hat{a}_n e^{-i\omega_n t}, \quad \hat{a}_n^\dagger(t) = \hat{a}_n^\dagger e^{i\omega_n t} \tag{2}$$

Для матриц Паули удобно ввести комбинации $\hat{\sigma}^\pm = \hat{\sigma}^x \pm i\hat{\sigma}^y$; несложно убедиться в следующих соотношениях:

$$\frac{d\hat{\sigma}^\pm}{dt} = i[\hat{H}_s, \hat{\sigma}^\pm] = \pm i\Delta\hat{\sigma}^\pm \Rightarrow \hat{\sigma}^\pm(t) = \hat{\sigma}^\pm e^{\pm i\Delta t}, \quad \frac{d\hat{\sigma}_z}{dt} = 0 \Rightarrow \hat{\sigma}^z(t) = \hat{\sigma}^z \tag{3}$$

Покомпонентно:

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_x(t) &= \frac{1}{2}(\hat{\sigma}^+ e^{i\Delta t} + \hat{\sigma}^- e^{-i\Delta t}) = \hat{\sigma}_x \cos\Delta t - \hat{\sigma}_y \sin\Delta t = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\Delta t} \\ e^{-i\Delta t} & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{\sigma}_y(t) &= \frac{1}{2i}(\hat{\sigma}^+ e^{i\Delta t} - \hat{\sigma}^- e^{-i\Delta t}) = \hat{\sigma}_x \sin\Delta t + \hat{\sigma}_y \cos\Delta t = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\Delta t} \\ ie^{-i\Delta t} & 0 \end{pmatrix} \end{cases} \tag{4}$$

Такая «тривиальная» невозмущённая эволюция тем самым описывает просто прецессию спина с угловой скоростью Δ вокруг направления «магнитного поля» z. Если же мы говорим, к примеру, о частице в двухъямном потенциале — то такая когерентная прецессия представляет собой осцилляции Раби. В контексте спинов или кубитов, такое представление также часто называют **приближением вращающейся волны** (**rotating wave approximation**); это связано с тем, что в каком-то смысле оно эквивалентно переходу во вращающуюся систему отсчёта.

[1] Ранее гамильтониан для частицы (системы) с двумя изначально вырожденными состояниями и туннелированием между ними записывался в виде $H = \begin{pmatrix} E & -\Delta/2 \\ -\Delta/2 & E \end{pmatrix} = E - (\Delta/2)\sigma_x$, здесь же выполнен поворот в другой базис, в котором состояния (например, в левой и правой ямах) являются собственными для оператора σ_x, а туннелирование описывается членом, пропорциональным σ_z.

[2] Ось z в данной задаче является выделенной, но взаимодействие вида $\hat{\sigma}_z\hat{X}$ в каком-то смысле тривиально — оно сохраняет $\hat{\sigma}_z$ и не приводит к релаксации. Подробнее — см. домашнюю задачу к этому семинару

Приближение Борна-Маркова

Полная матрица плотности в представлении взаимодействия удовлетворяет следующему уравнению:

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = i[\hat{\rho}(t), \hat{V}(t)] \tag{5}$$

Мы интересуемся следующей постановкой задачи. В начальный момент времени $t = 0$ баня находилась в равновесии с температурой T, и поэтому описывалась своей матрицей плотности $\hat{\rho}_e(0) = \frac{1}{Z}e^{-\beta\hat{H}_e}$; а система была приготовлена со своей матрицей плотности $\hat{\rho}_s(0)$ (которая может соответствовать чистому состоянию $|\psi_0\rangle\langle\psi_0|$, или описывать смешанное состояние — сейчас это не очень важно); и изначально мы предполагаем, что баня и система никак не взаимодействовали, $\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_e(0) \otimes \hat{\rho}_s(0)$. В результате временной эволюции, происходит запутывание и матрица плотности больше не представляет собой простое тензорное произведение; поэтому, вообще говоря, не очень понятно, как брать частичный след в правой части уравнения (5).

Предлагается сделать несколько приближений. Первое приближение заключается в том, что если система достаточно маленькая, а среда — достаточно большая (что имеет место всегда), то разумным предположением будет считать, что матрица плотности среды не меняется с течением времени. Если мы, однако, предположим, что матрица плотности в произвольный момент времени выглядит как $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_e \otimes \hat{\rho}_s(t)$, и возьмём в уравнении (5) частичный след, мы немедленно получим ноль в правой части; и связанно это с тем, что $\mathrm{Tr}_e(\hat{\rho}_e\hat{X}_n(t)) \equiv \langle X_n(t)\rangle = 0$; поэтому делать такое такое приближение наивно нельзя.

Можно, однако, обойти эту трудность, сделав серию тождественных преобразований в уравнении (5): сперва мы его проинтегрируем от какого-то произвольного момента времени t_0 до t, а затем полученное выражение подставим опять в правую часть уравнения[3]:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(t_0) + i\int_{t_0}^{t} dt'[\hat{\rho}(t'), \hat{V}(t')] \Rightarrow \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = i[\hat{\rho}(t_0), \hat{V}(t)] - \int_{t_0}^{t} dt' \left[\left[\hat{\rho}(t'), \hat{V}(t')\right], \hat{V}(t)\right] \tag{6}$$

В этом уравнении уже можно взять частичный след, предположив матрицу плотности в таком виде. Идеологически то что было сейчас проделано — это второй порядок теории возмущений по $\hat{V}$, и сделанное приближение носит название **Борновского приближения**. Беря частичный след слева и справа, и переходя к $\tau = t - t'$, мы получаем:

$$\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = -\int_{0}^{t-t_0} d\tau \mathrm{Tr}_e\left(\left[[\hat{\rho}_s(t-\tau)\hat{\rho}_e, \hat{V}(t-\tau)], \hat{V}(t)\right]\right) \tag{7}$$

Следующее приближение, которое можно сделать в этом уравнении из самых общих соображений, следующее. Оператор возмущения имеет следующий вид:

$$\hat{V}(t) = \hat{\sigma}_x\hat{X}, \quad \hat{X} = \sum_n \lambda_n \hat{X}_n \tag{8}$$

Как мы продемонстрируем далее явно, в результате взятия частичного следа возникнут корреляционные функции вида $S(t-t') \equiv \left\langle \hat{X}(t)\hat{X}(t')\right\rangle$ (несложно видеть, они зависят только от разности времён). Такие автокорреляционные функции определяются динамикой среды, и как правило, они быстро спадают до нуля на очень малых масштабах времени — если окружающая среда содержит огромное количество степеней свободы, то о корреляциях на сколь либо продолжительных временах говорить не приходится. Это приближение носит название **Марковского приближения**, и сводится оно к следующему физическому свойству окружающей среды — как правило, среда *не обладает памятью.*

Если предположить, что этот масштаб времени много меньше масштаба времени, на котором меняется сама матрица плотности, то можно заменить $\hat{\rho}_s(t-\tau) \mapsto \hat{\rho}_s(t)$, а также в силу сходимости интеграла, заменить его верхний предел до бесконечности. В результате мы получаем следующее **квантовое кинетическое уравнение** (**master equation)**:

$$\boxed{\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = -\int_{0}^{\infty} d\tau \mathrm{Tr}_e\left([[\hat{\rho}_s(t)\hat{\rho}_e, \hat{V}(t-\tau)], \hat{V}(t)]\right)} \tag{9}$$

В таком виде это — система линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами на компоненты матрицы плотности $\hat{\rho}_s$.

Если окружающая среда не обладает памятью, то самый общий вид квантового кинетического уравнения имеет вид **уравнения Линблада**[4]:

$$\frac{d\hat{\rho}_s(t)}{dt} = i[\hat{\rho}_s(t), \hat{H}_s] + \mathcal{L}\hat{\rho}_s(t) \tag{10}$$

В правой части стоит супероператор — линейный оператор, действующий на пространстве линейных операторов — носящий название оператора Линблада; он имеет смысл аналога **интеграла столкновений** в обычном кинетическом

[3] Отметим, что в таком виде это пока тождественное преобразование!

[4] Отметим, что оно записывается в представлении Шрёдингера, поэтому добавляется член, описывающий собственную динамику с гамильтонианом $\hat{H}_s$.

уравнении. Оператор этот не может быть произвольным — даже при взаимодействии с окружающей средой, такое уравнение должно сохранять нормировку $\mathrm{Tr}\hat{\rho}_s(t) = 1$ и положительную определённость матрицы $\hat{\rho}_s$. То что мы сейчас получили — это явный вид оператора Линблада в приближении Борна-Маркова.

Выкладка

Во-первых, чтобы продвинуться дальше, давайте подставим явный вид возмущения и раскроем коммутаторы:

$$\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = -\int_0^\infty d\tau \mathrm{Tr}_e \Bigg(\hat{\rho}_s(t)\underline{\hat{\rho}_e}\hat{\sigma}_x(t-\tau)\underline{\hat{X}(t-\tau)}\hat{\sigma}_x(t)\underline{\hat{X}(t)} - \hat{\sigma}_x(t-\tau)\underline{\hat{X}(t-\tau)}\hat{\rho}_s(t)\underline{\hat{\rho}_e}\hat{\sigma}_x(t)\underline{\hat{X}(t)} - \\ - \hat{\sigma}_x(t)\underline{\hat{X}(t)}\hat{\rho}_s(t)\underline{\hat{\rho}_e}\hat{\sigma}_x(t-\tau)\underline{\hat{X}(t-\tau)} + \hat{\sigma}_x(t)\underline{\hat{X}(t)}\hat{\sigma}_x(t-\tau)\underline{\hat{X}(t-\tau)}\hat{\rho}_s(t)\underline{\hat{\rho}_e} \Bigg) \quad (11)$$

Подчёркнуты операторы, которые действуют на степени свободы окружающей среды (и которые, собственно, участвуют в операции взятии следа). При взятии следа мы:

- можем как угодно менять местами подчёркнутые и не подчёркнутые операторы — ведь они действуют на разные степени свободы, и потому коммутируют.
- не можем менять <u>относительный</u> порядок подчёркнутых операторов (аналогично и с не подчёркнутыми) — их коммутатор в общем случае отличен от нуля.
- можем циклически переставлять подчёркнутые операторы как хотим — из-за операции взятии следа

Руководствуясь этими правилами, и введя корреляционную функцию $S(t-t') \equiv \mathrm{Tr}_e(\hat{\rho}_e\hat{X}(t)\hat{X}(t')) \equiv \left\langle \hat{X}(t)\hat{X}(t') \right\rangle$, мы можем избавиться от частичного следа::

$$\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = -\int_0^\infty d\tau \left(S(-\tau)\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\sigma}_x(t) - S(\tau)\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_x(t) - S(-\tau)\hat{\sigma}_x(t)\hat{\rho}_s(t)\hat{\sigma}_x(t-\tau) + S(\tau)\hat{\sigma}_x(t)\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\rho}_s(t)\right) \quad (12)$$

Корреляционные функции среды

Нам необходимо научиться вычислять:

$$S(t) = \left\langle \hat{X}(t)\hat{X}(0) \right\rangle = \sum_{nm} \lambda_n\lambda_m \left\langle \hat{X}_n(t)\hat{X}_m(0) \right\rangle \quad (13)$$

Достаточно очевидно, корреляционная функция отлична от нуля только при $n = m$ — в противном случае среднее распадается. Поэтому:

$$S(t) = \sum_n \lambda_n^2 S_{\omega_n}(t), \quad S_{\omega_n}(t) = \left\langle \hat{X}_n(t)\hat{X}_n(0) \right\rangle = \left\langle (\hat{a}_n e^{-i\omega_n t} + \hat{a}_n^\dagger e^{i\omega_n t})(\hat{a}_n + \hat{a}_n^\dagger) \right\rangle \quad (14)$$

Отметим, что матрица плотности отдельного осциллятора диагональна в представлении чисел заполнения:

$$\hat{\rho}_e^{(n)} = \frac{1}{Z_n} e^{-\beta\omega_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n} \equiv \frac{1}{Z_n} \sum_{k=0}^\infty |k\rangle \langle k| \cdot e^{-\beta\omega_n k} \quad (15)$$

и поэтому средние вида $\langle \hat{a}_n\hat{a}_n \rangle = \left\langle \hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n^\dagger \right\rangle = 0$. Отличные от нуля средние — следующие:

$$\left\langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \right\rangle = \frac{\sum_{k=0}^\infty \langle k| \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n |k\rangle e^{-\beta\omega_n k}}{\sum_{k=0}^\infty e^{-\beta\omega_n k}} \equiv \frac{\sum_{k=0}^\infty k e^{-\beta\omega_n k}}{\sum_{k=0}^\infty e^{-\beta\omega_n k}} = n_B(\omega_n) \equiv \frac{1}{e^{\beta\omega_n} - 1} \quad (16)$$

(тут возникает Бозевская функция распределения, $n_B(\omega)$ — которая и определяется как среднее число возбуждений осциллятора при температуре T). Второе среднее $\left\langle \hat{a}_n\hat{a}_n^\dagger \right\rangle = n_B(\omega_n) + 1$. Поэтому:

$$S_{\omega_n}(t) = n_B(\omega_n) e^{i\omega_n t} + (n_B(\omega_n) + 1) e^{-i\omega_n t} \quad (17)$$

Наконец, всю информацию о распределении частот осцилляторов и констант связи λ_n можно собрать в одну функцию — **спектральную плотность среды**:

$$\boxed{J(\omega) \equiv \pi \sum_n \lambda_n^2 \delta(\omega - \omega_n)} \tag{18}$$

Континуальный предел для среды как раз будет представлять собой замену $J(\omega)$ на некоторую непрерывную функцию частоты; её явный вид мы обсудим позже, а пока перепишем корреляционную функцию среды в следующем виде:

$$S(t) = \left\langle \hat{X}(t)\hat{X}(0) \right\rangle = \int \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) S_\omega(t) = \int \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left[n_B(\omega) e^{i\omega t} + (n_B(\omega)+1) e^{-i\omega t} \right] \tag{19}$$

Уравнения Блоха

В принципе, дальше можно было бы подставить явный вид матриц Паули в представлении взаимодействия, и получить систему из 4 уравнений на 4 компоненты матрицы плотности. Однако, более наглядным является представление Блоха, которое параметризует матрицу плотности произвольной двухуровневой системы при помощи вектора $\boldsymbol{n}$ согласно:

$$\hat{\rho}_s(t) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \boldsymbol{n}(t) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}(t)) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+n_z & n_- e^{i\Delta t} \\ n_+ e^{-i\Delta t} & 1-n_z \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{n}(t) = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_s(t) \hat{\boldsymbol{\sigma}}(t)) = \langle \hat{\boldsymbol{\sigma}}(t) \rangle_s \tag{20}$$

(у вектора наглядный физический смысл — он представляет собой вектор поляризации). Напишем уравнения на компоненты вектора $\boldsymbol{n}$:

$$\frac{d\boldsymbol{n}(t)}{dt} = \mathrm{Tr}\left(\frac{d\hat{\boldsymbol{\sigma}}(t)}{dt} \hat{\rho}_s(t) \right) + \mathrm{Tr}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}(t) \frac{d\hat{\rho}_s(t)}{dt} \right) = i \left\langle \left[\hat{H}_s, \hat{\boldsymbol{\sigma}}(t) \right] \right\rangle_s + \mathrm{Tr}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}(t) \frac{d\hat{\rho}_s(t)}{dt} \right) \tag{21}$$

Первый член тривиален, он описывает когерентную прецессию в отсутствии взаимодействия и имеет следующий вид:

$$\frac{dn_x^{(1)}}{dt} = -\Delta n_y, \quad \frac{dn_y^{(1)}}{dt} = \Delta n_x, \quad \frac{dn_z^{(1)}}{dt} = 0 \tag{22}$$

поэтому мы сфокусируемся на втором члене, подставив в него (12), а также все операторы в представлении взаимодействия; исследуем что получилось покомпонентно. Сразу отметим, что уравнение на x-компоненту тривиально — $\frac{dn_x^{(2)}}{dt} = 0$. Связано это с тем, что $[\hat{\sigma}_x, \hat{V}] = 0$ — и поэтому точное уравнение имеет вид:

$$\boxed{\frac{dn_x(t)}{dt} = -\Delta n_y(t)}$$

Z-компонента Подставляя и упрощая, получаем:

$$\frac{dn_z^{(2)}(t)}{dt} = -2 \int_0^\infty d\tau \left[n_z(t) \left(S(\tau) + S(-\tau) \right) \cos \Delta\tau + i \left(S(\tau) - S(-\tau) \right) \sin \Delta\tau \right] \tag{23}$$

Стоящие тут интегралы сводятся к преобразованию Фурье:

$$\int_0^\infty d\tau (S(\tau) + S(-\tau)) \cos\Delta\tau = \int_{-\infty}^\infty d\tau S(\tau) \cos\Delta\tau =$$
$$= \int_{-\infty}^\infty d\tau \int \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left[n_B(\omega) e^{i\omega\tau} + (n_B(\omega)+1) e^{-i\omega\tau} \right] \frac{1}{2}(e^{i\Delta\tau} + e^{-i\Delta\tau}) =$$
$$= \int d\omega J(\omega)(2n_B(\omega)+1)(\delta(\omega+\Delta) + \delta(\omega-\Delta)) = J(\Delta) \coth\frac{\beta\Delta}{2} \tag{24}$$

$$i\int_0^\infty d\tau (S(\tau) - S(-\tau)) \sin\Delta\tau = i\int_{-\infty}^\infty d\tau S(\tau) \sin\Delta\tau =$$
$$= \int_{-\infty}^\infty d\tau \int \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left[n_B(\omega) e^{i\omega\tau} + (n_B(\omega)+1) e^{-i\omega\tau} \right] \frac{1}{2}(e^{i\Delta\tau} - e^{-i\Delta\tau}) =$$
$$= \int d\omega J(\omega)(\delta(\omega-\Delta) - \delta(\omega+\Delta)) = J(\Delta) \tag{25}$$

(отметим, что $2n_B(\omega)+1 = \coth\frac{\beta\omega}{2}$; а кроме того, мы предполагаем для конкретности, что $\Delta > 0$; а величина $J(\omega \le 0) \equiv 0$ — осцилляторов с отрицательной частотой не бывает). Поэтому мы перепишем уравнение на z-компоненту в следующем виде:

$$\boxed{\frac{dn_z(t)}{dt} = -\frac{n_z(t) - n_z^{(eq)}}{T_1}, \quad \frac{1}{T_1} = 2J(\Delta)\coth\frac{\beta\Delta}{2}, \quad n_z^{(eq)} = -\tanh\frac{\beta\Delta}{2}} \tag{26}$$

Это уравнение описывает процессы **релаксации**. Произвольное начальное значение намагниченности будет релаксировать за время T_1 (которое носит название времени релаксации) к своему равновесному значению $n_z^{(eq)}$ по закону $n_z(t) = n_z^{(eq)} + (n_z(0) - n_z^{(eq)})e^{-t/T_1}$. Отметим, что величина $n_z^{(eq)}$ совпадает со средней «намагниченностью», если система, описываемая гамильтонианом $\hat{H}_s$, будет находится в термодинамическом равновесии с температурой, которая совпадает с температурой бани T. Тем самым, за время T_1 происходит **термализация** — устанавливается равновесие.

Отметим, что для термализации необходимо, чтобы происходили реальные процессы переворота спина — при этом система должна забирать из бани (или отдавать туда) энергию Δ. Поэтому тот факт, что скорость релаксации оказалась пропорциональна $J(\Delta)$ — не удивительно; ведь если в окружающей среде, скажем, осцилляторы с частотой Δ отсутствовали бы, то было бы невозможно диссипировать в неё квант энергии Δ.

Y-компонента Аналогично, путём прямых вычислений мы получаем:

$$\frac{dn_y^{(2)}(t)}{dt} = -2\int_0^\infty d\tau (S(\tau) + S(-\tau))(n_y(t)\cos\Delta\tau - n_x(t)\sin\Delta\tau) \tag{27}$$

Первый член уже был сосчитан ранее, а вот второй отличается — он не сводится к преобразованию Фурье и для его вычисления требуется регуляризация $e^{-\epsilon\tau}$ — которая, после использования формулы Сохоцкого, говорит нам, что оставшийся интеграл по частоте нужно брать в смысле главного значения:

$$\int_0^\infty d\tau (S(\tau) + S(-\tau))\sin\Delta\tau = \int_0^\infty d\tau \int \frac{d\omega}{\pi} J(\omega)(2n_B(\omega) + 1)\cos\omega\tau\sin\Delta\tau = -v.p. \int \frac{d\omega}{\pi} J(\omega)(2n_B(\omega) + 1)\frac{2\Delta}{\omega^2 - \Delta^2} \tag{28}$$

Окончательно, собирая всё вместе, уравнение на y-компоненту выглядит следующим образом:

$$\boxed{\frac{dn_y}{dt} = (\Delta - 2\delta)n_x(t) - \frac{n_y(t)}{T_2/2}, \quad \frac{1}{T_2} = J(\Delta)\coth\frac{\beta\Delta}{2}, \quad \delta = v.p. \int \frac{d\omega}{\pi} J(\omega)\coth\frac{\beta\omega}{2}\frac{2\Delta}{\omega^2 - \Delta^2}} \tag{29}$$

Выбор двоек в этом уравнении мотивирован следующим соображением. Полученная система линейных дифференциальных уравнений описывается следующей матрицей:

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta \\ \Delta - 2\delta & 2/T_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} \tag{30}$$

которая имеет собственные частоты $\omega_{1,2} \approx \pm(\Delta - \delta) - \frac{i}{T_2}$. Поэтому величина δ — это поправка к частоте Δ, а затухание всех решений происходит как e^{-t/T_2}.

Вклад δ носит название **Лэмбовского сдвига**[5], он отвечает за перенормировку частоты «прецессии» Δ, связанную со взаимодействием с окружающей средой. Если бы мы имели дело с двухъямным потенциалом, то Δ имел бы смысл туннельного матричного элемента; тот факт, что δ уменьшает эффективную величину[6] Δ, является демонстрацией того, как взаимодействие с окружающей средой подавляет туннелирование. Хотя уравнения были написаны в рамках теории возмущений, можно показать, что в данной модели имеется квантовый фазовый переход — при достаточно сильном взаимодействии со средой, туннелирование подавляется до нуля.

Наконец, член T_2 носит название **дефазировки**, он подавляет поперечную компоненту $n_{x,y}(t)$ так, что они начинают затухать как e^{-t/T_2}. На языке двухъямного потенциала, к примеру, когерентная прецессия вокруг оси z — это осцилляции Раби, их наличие свидетельствует о когерентном туннелировании между состояниями двухуровневой системы. Имеется наглядный способ представить себе дефазировку. Давайте рассмотрим ансамбль спинов, вращающихся *когерентно* (*синфазно*) вокруг оси z с одинаковой частотой Δ. Однако, из-за взаимодействия с «шумом», индуцированным окружающей средой, частота каждого из этих спинов чуть «дрожит», из-за чего каждый из них начинает вращаться с чуть изменённой частотой. Хотя на малых временах эта поправка будет незаметна, и динамика будет оставаться когерентной — однако спустя какое-то время спины окажутся совершенно случайным образом разбросаны в плоскости, и среднее значение проекции спина на плоскость xy выйдет на нулевое значение.

---

[5]Вообще говоря, вы наверняка уже слышали про Лэмбовский сдвиг, но в другом контексте. Исходно так называется расщепление между $^2S_{1/2}$ и $^2P_{1/2}$ уровнями энергии атома водорода, которое имеет порядок α^3 ($\alpha \approx 1/137$ — постоянная тонкой структуры) и вызванное релятивистскими эффектами — петлевыми поправками КЭД, за счёт рассмотрения виртуальных процессов рождения и уничтожения фотонов в старших порядках теории возмущений.

Можно на это смотреть и с точки зрения динамики открытых систем: Лэмбовский сдвиг возникает за счёт взаимодействия с нулевыми колебаниями фотонной «бани». Поэтому, как это ни странно, Лэмбовский сдвиг в КЭД и в нашей задаче имеют весьма схожую природу.

Тот факт, что он определяется не только степенями свободы бани, что находятся в резонансе — на частоте Δ — а интегралом по всем частотам, говорит о том, что он имеет природу поправки, связанной с виртуальными процессами. Скорее всего, эту формулу (скажем, при $T = 0$) можно получить исходя из стандартной формулы для второго порядка теории возмущений.

[6]Основной вклад в интеграл, как правило, приходит от частот $\omega \gg \Delta$, и поэтому величина δ положительна

Подчеркнём, что физически члены T_1 и T_2 имеют совершенно разную природу, и отвечают за различные физические процессы (хотя в рамках тривиальной теории возмущений и получилось, что они отличаются всего лишь в два раза — в реальной жизни они могут быть совершенно различными). Грубо говоря, время T_2 — это время, в течение которого в нашей квантомеханической системе ещё могут наблюдаться какие-либо когерентные квантовые эффекты, и после которого система ведёт себя в большой мере классически. Время T_1 же говорит нам, когда измеряемые значения наблюдаемых перестанут зависеть от времени (разумеется, усреднив по быстрым квантовым осцилляциям).

О спектральной плотности

Всю информацию о структуре окружающей среды мы «спрятали» в спектральную функцию $J(\omega)$. С другой стороны, мы пока ничего не говорили о том, как $J(\omega)$ устроена. Она зависит от констант связи и от плотности состояний в бане; как правило, последняя растёт как какая-то степень частоты; как следствие, типичное поведение — это $J(\omega) \propto \omega^s$. С другой стороны, как правило в окружающей среде нельзя найти моды со сколь угодно большими частотами — у функции $J(\omega)$ может иметься обрезка на какой-то достаточно большой частоте[7] ω_c, выше которой $J(\omega)$ быстро спадает до нуля. Наличие такой обрезки может быть существенно для некоторых эффектов, которые происходят от ультрафиолетовых степеней свободы бани (к примеру, при исследовании Лэмбовского сдвига).

По поведению скорости релаксации при $\Delta \to 0$, выделяют несколько случаев:

- **Омическая баня**: $s = 1$, $J(\omega) = \pi\alpha\omega\theta(\omega_c - \omega)$. При этом $\frac{1}{T_{1,2}} \to \text{const}$ при $\Delta \to 0$. Наиболее часто встречаемый и простой тип «бани».
- **Суб-омическая баня**: $s < 1$, $\frac{1}{T_{1,2}} \to \infty$ при $\Delta \to 0$.
- **Супер-омическая баня:** $s > 1$, $\frac{1}{T_{1,2}} \to 0$ при $\Delta \to 0$.

[7]Если баня обеспечена фононными степенями свободы, то ω_c — это частота Дебая, выше которой фононов нет. Если это фермионная баня (которая, конечно, требует отдельного рассмотрения), то в роли обрезки может выступать энергия Ферми.