

Valdomos temperatūros atvyrų kvantinių sistemų dinamika

Temperature Controlled Open Quantum System Dynamics

Mantas Jakučionis¹, Darius Abramavičius¹

¹Cheminės fizikos institutas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 9, III rūmai, 10222, Vilnius
mantas.jakucionis@ff.vu.lt

Atviros kvantinės sistemos dinamikos nustatymas, t. y., tokios kvantinės sistemos, kurią formaliai galima atskirti nuo ją supančios aplinkos, tačiau sistema ir aplinka lieka terminiam kontakte, yra viena bendriausių kvantinės mechanikos užduočių. Atviros sistemos taikomos modeliuojant sužadintų būsenų optinį atsaką, energijos pernašos procesus molekulėse, jų agregatuose, fotosintetiniuose kompleksuose ir kt.

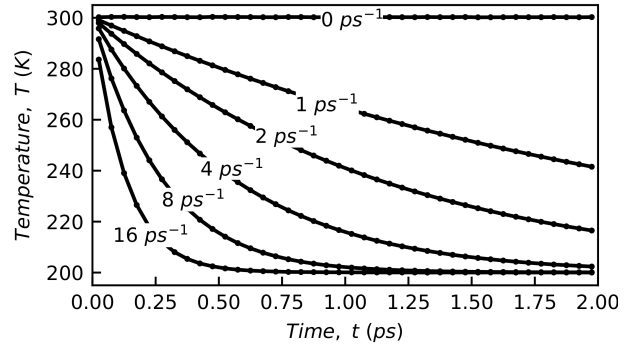
Tokių sistemų dinamikos nustatymui dažnai naudojamas sistemos ir pastovios temperatūros termostato modelis. Sistema vadinami visi mus dominančios fizikinės sistemos laisvės laipsniai, jie sąveikauja su termostato terminėmis fliktuacijomis, kurie vaizduoja aplinkos poveikį, pvz. fononų, baltymų ir kitų molekulių terminį judėjimą.

Sistema gali būti sudėtinga, sudaryta iš daugybės tarpusavyje sąveikaujančių elektroninių ir virpesinių laisvės laipsnių, o termostato fliktuacijos modeliuojamos, idealiu atveju – be galo dideliu, kvantinių harmoninių osciliatorių rinkiniu terminėje pusiausvyroje.

Taikant redukuotos tankio matricos teorinį aprašymą, aplinkos laisvės laipsniai yra nekintantys bei atsižvelgiama tik į jų statistinius vidurkius. Kitą vertus, galima tiesiogiai postuliuoti modelį aprašančią nuo laiko priklausančią banginę funkciją bei ją išreikštai propaguoti. Tuomet svarbu užtikrinti, jog termostatą sudarančios virpesinės modos išlieka pastovios temperatūros – jeigu vyksta energijos pernaša iš sistemos į termostatą, virpesinių modų temperatūra gali stipriai viršyti pradinę temperatūrą, taip efektyviai padidinti aplinkos temperatūrą.

Šiai problemai spręsti, sukūrėme termostato termalizacijos algoritmą [1], skirtą taikyti kartu su nuo laiko priklausančiu variaciniu metodu. Algoritmas stochastiškai atlieka virpesinių modų sklaidą, kiekvieno sklaidos įvykio metu virpesinių modų kinetinė energija yra pakeičiama taip, jog termostatas artėtų prie norimos temperatūros pusiausvyros. Sklaidos įvykių laukimo skirstinys yra Puasono, $P(n, \tau) = \frac{1}{n!} (\tau\nu)^n e^{-\tau\nu}$, ir aprašo tikimybę įvykti n sklaidos įvykiams per laiko intervalą τ , kai sklaidos įvykių sparta yra ν . Puasono skirstinys gautas, modeliuojant diskretaus laiko Bernulio įvykių ansamblį riboje, $\tau \rightarrow 0$, $\tau\nu \ll 1$.

Paveikslėlyje (1) pademonstravome, jog termostatui, izoliuotam nuo sistemos, termalizacijos algoritmas neblogai veikia plačiame sklaidos spartų intervale, net kai $\tau\nu \approx 0.15$. Matome, jog termostato temperatūra artėja prie norimos temperatūros ir pasiekia terminę pusiausvyrą.



1 pav. Vidutinė termostato temperatūra, suskaičiuota su skirtingomis sklaidos spartomis. Termostatas su pradine temperatūra, $T_0 = 300$ K, termalizuojamas į temperatūros, $T = 200$ K, terminę pusiausvyrą. Sklaidos lango plotis, $\tau = 0.01$ ps.

Pritaikius termalizacijos algoritma molekulių eksitonų sistemai, parodėme, jog termalizacija leidžia ne tik reguliuoti aplinkos temperatūrą, tačiau ir sumažinti reikalingą skaičių modų termostate, norint kokybiškai atvaizduoti aplinkos fliktuacijas.

Dinaminis termostato temperatūros modeliavimas atveria galimybę atsižvelgti į eksperimentuose stebimus molekulių lokalios aplinkos šylio efektus, kurie atsiranda dėl mokulinės vidinės konvercijos ar eksitonų anihilacijos procesų.

Reikšminiai žodžiai: atvira kvantinė sistema, termostatas, temperatūra, termalizacija.

Literatūra

[1] M. Jakučionis, D. Abramavičius, Physical Review A **103**, 032202 (2021)