

Decoherencia, Dinámica Difusiva y Decaimiento Exponencial en Soluciones Exactas de la Ecuación de Schrödinger

F. M. CUCCHIETTI, H. M. PASTAWSKI*, G. USAJ Y E. MEDINA[⊗]

Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba.

[⊗] Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC), Caracas, Venezuela

e-mail: horacio@famaf.unc.edu.ar

Se estudia la evolución cuántica exacta de una excitación local interactuando con un conjunto grande (reservorio) pero finito de estados. En distintas variantes del modelo para el reservorio la autocorrelación presenta diferentes regímenes. A tiempos menores que el tiempo de Debye, decae siempre cuadráticamente. Dependiendo del modelo, a tiempos intermedios hay decaimiento exponencial coincidente con la regla de Oro de Fermi, decoherencia exponencial o dinámica difusiva clásica $\sim t^{-1/2}$. Finalmente al tiempo de Heisenberg del sistema aparecen ecos mesoscópicos. Se discute la aplicación de este modelo al estudio de la difusión de espines nucleares en moléculas lineales y a la decoherencia en la transferencia de carga entre dos centros de reacción.

The exact quantum evolution of a local excitation interacting with a large but finite set of quantum states (reservoir) is studied. With variants of the model for the reservoir, the self-correlation function presents different regimes. For times shorter than the Debye time a quadratic decay is always present. Depending on the model, at intermediate time there is exponential decay consistent with the Fermi Golden Rule, exponential decoherence or classical diffusive dynamics $\sim t^{-1/2}$. At the Heisenberg time of the system, mesoscopic beats show up. The application of this model to the study of nuclear spin diffusion in linear molecules and the decoherence in the charge transfer between two reaction centers is discussed.

Hace una década se propuso en esta revista un modelo que permitía resolver, con la ecuación de Schrödinger, el transporte electrónico en sistemas mesoscópicos en presencia de procesos inelásticos⁽¹⁾. El modelo consiste en acoplar los estados electrónicos con un conjunto infinito de estados que representa un alambre en contacto con un voltímetro o un conjunto de estados fonónicos. Lo relevante es que el baño es descrito a través de un potencial efectivo complejo (potencial óptico). Hoy es el método estándar para resolver sistemas mesoscópicos⁽²⁾. Aunque desde el punto de vista analítico el tamaño del sistema no constituye un problema⁽³⁾, la solución computacional de sistemas heterogéneos tiene una limitación práctica: debe resolverse una matriz del tamaño del número de estados empleados para representar el sistema^{(4), (5)}. Es por ello que nuestro grupo se ha propuesto representar los reservorios mediante sistemas finitos. Al menos para el estado estacionario, las propiedades de transporte se encuentran calculando la función de Green mediante técnicas de Grupo de Renormalización que reducen substancialmente el cálculo involucrado. En el caso de problemas dinámicos su rango de aplicación aún no ha sido estudiado. Por otra parte, el estudio de la dinámica de un conjunto de estados interactuando con un ambiente define un prototipo que puede simular el comportamiento de una gran cantidad de problemas complejos e interesantes. Es, por lo tanto, desafortunado el escaso estudio de esta situación, cuando tiene

relevancia significativa en campos tan variados como la resonancia magnética, transporte electrónico y la computación cuántica. En este trabajo, nuestro interés está orientado a la proposición de modelos simples que presenten comportamientos asociados a sistemas grandes y complejos. Se busca que estos modelos permitan una resolución exacta y por lo tanto están libres de los sutiles riesgos que aparecen al transformar, mediante aproximaciones, la descripción de la dinámica cuántica en una descripción semiclásica irreversible (ecuación de Boltzmann, ecuación maestra, etc). El sistema genérico propuesto corresponde al de una cadena finita:

$$H = \sum_{n=1}^N \mathbf{E}_n |n\rangle\langle n| + \mathbf{V}_{n,n+1} |n\rangle\langle n+1| + \mathbf{V}_{n+1,n} |n+1\rangle\langle n|,$$

donde $|n\rangle$ es un vector de dimensión M y \mathbf{E}, \mathbf{V} son matrices de dimensión $M \times M$. $|n\rangle$ representa el n -ésimo estado localizado centrado en el sitio $x=na$, siendo a la constante de red de la cadena. Los casos de espines cuánticos a $T=0$, y el de un conjunto de osciladores con acoplamiento armónicos tienen una equivalencia bien conocida con el modelo mencionado. Recientemente, hemos demostrado⁽⁶⁾ que también la dinámica de excitaciones en un sistema de espines cuánticos inhomogéneo a temperatura infinita con

* Autor a quién debe dirigirse la correspondencia.

interacción XY tiene una exacta correspondencia con el modelo electrónico. Por tanto en este trabajo usaremos el lenguaje del transporte electrónico con la salvedad de que las variables asociadas con el baño son ortogonales a los operadores que se calculan. Si bien hemos considerado múltiples variantes de este modelo básico, mostraremos aquí sólo dos situaciones que consideramos suficientemente representativas.

Modelo 1

Nos permite describir el decaimiento exponencial y, con variantes, la decoherencia exponencial. Para este caso, $M=1$, $V_{1,2} = V_{2,1} = V_s$; $V_{n,n+1} = V_{n+1,n} = V$ para $n>1$; con condiciones de contorno abiertas y $V_s/V \ll 1$. Para simplificar se tomó $E_n = 0$. La condición inicial utilizada corresponde a $|\Psi(t=0)\rangle = |I\rangle$.

El valor de expectación estudiado es la función de autocorrelación $P_{11}(t)$, la probabilidad de encontrar la función de onda en la condición inicial luego de un tiempo t . Los resultados obtenidos se muestran en las figuras 1 y 2. En estas se observa el comportamiento cuadrático $1 - (V_s t / \hbar)^2$ para tiempos menores al tiempo de Debye⁽⁷⁾ \hbar/V , donde V es el ancho de banda del espectro del baño. Para tiempos intermedios resulta un decaimiento exponencial cuyo tiempo característico τ_f se ajusta muy bien por el predicho con la regla de Oro de Fermi,

$$1/\tau = 2\pi/\hbar |V_s|^2 N(\epsilon),$$

donde $N(\epsilon)$ es la densidad local de estados, para la cadena $N(\epsilon) = 1/\pi V$. Se puede ver que el régimen exponencial se mantiene para valores de V_s chicos y N grande.

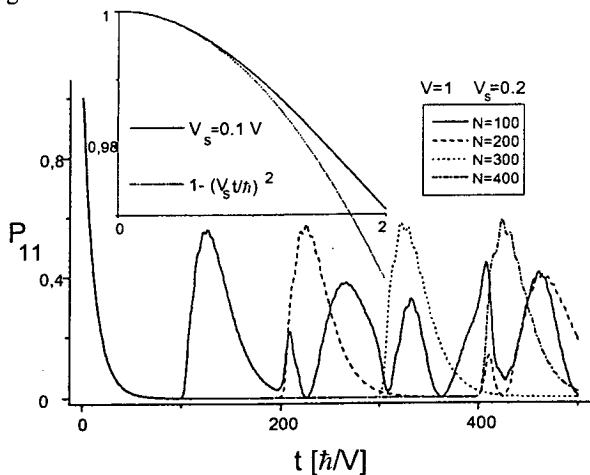


Figura 1. Función de autocorrelación para cadenas de diferentes tamaños. El tiempo del eco mesoscópico resulta lineal con N . En el inset se puede ver el comportamiento cuadrático hasta el tiempo de Debye τ_D (en este caso $\tau_D = 1$)

Para tiempos del orden del tiempo de Heisenberg $(\Delta E)^{-1} \propto N/V$ se observa en todos los casos un eco mesoscópico cuya magnitud y ancho son dependientes del valor de V_s . Estos ecos fueron predichos en esta publicación⁽⁸⁾ y su observación experimental en pequeños sistemas de espines fue hecha recientemente⁽⁹⁾.

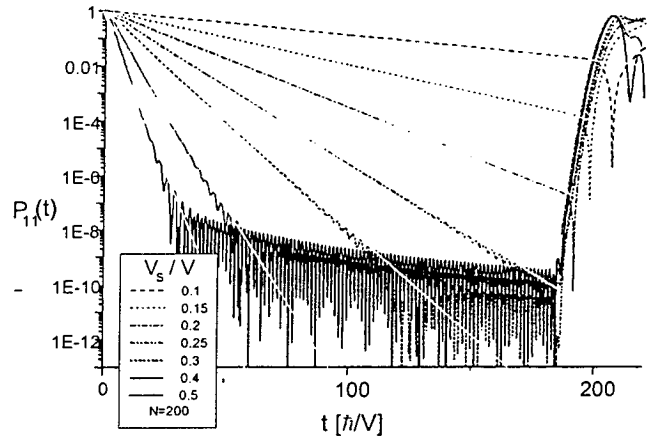


Figura 2. Ajuste de la función de autocorrelación con el coeficiente predicho por la regla de Oro de Fermi para cada V_s (en línea gris). Nótese como el ajuste mejora para V_s más chico (tiempo de decaimiento más largo)

Este decaimiento exponencial encontrado sugiere inmediatamente su aplicación a un problema de transporte. Un problema minimal que puede ser representado con esta idea es el intercambio de carga entre dos centros de reacción fotosintéticos⁽¹⁰⁾. Si la carga interactúa con el ambiente (vibraciones) estas modifican la conformación de camino de túneling impidiendo la posterior transferencia entre centros. Representaremos esta situación simplemente con un sistema idéntico al anterior (una cadena) para cada uno de los centros, uniendo el sitio $|I\rangle$ de cada cadena con un hopping V_d . Los estados de la cadena representan el producto directo entre estados de carga y estados vibracionales del ambiente. Con esto se simula el impedimento de transferencia entre los dos centros al interactuar alguno de estos con el ambiente. Llamaremos a los estados de carga $|I\rangle$ y $|II\rangle$, por lo que el estado inicial será $|\Psi(t=0)\rangle = |I\rangle|I\rangle$.

La idea conceptual para el entendimiento de los procesos de decoherencia es que se debe proyectar la dinámica sobre el subespacio de interés, en este caso el de densidad de carga. Para una situación en que la carga se encuentra inicialmente en uno de los centros, esto significa que debemos sumar la densidad sobre todos los "sitios" de una "cadena". La figura 3 muestra un resultado típico. En este modelo, la decoherencia responde a los mismos parámetros temporales que el decaimiento indicado en la figura. Es llamativo, sin embargo, que el valor asintótico es ligeramente mayor que 0.5. Este es un primer indicio de la aparición de Efecto de Cúantico de Zenon⁽¹⁴⁾ según el cual se limita la evolución de un sistema cuántico interactuando con un reservorio. Este efecto aparece como determinante de la dinámica en varios de los modelos que hemos tratado.

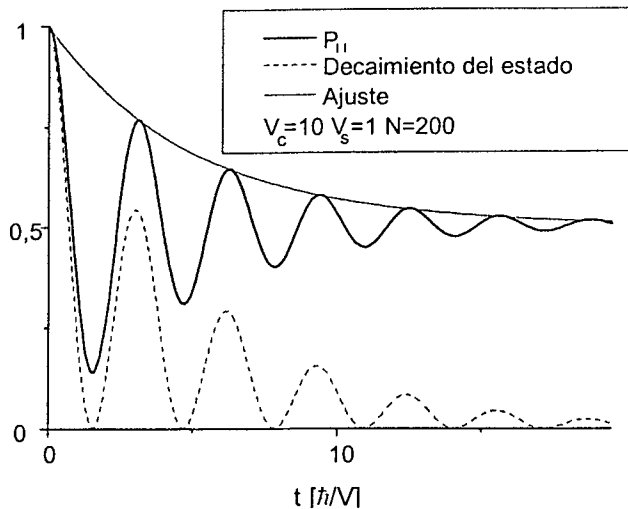


Figura 3. Densidad de carga en función del tiempo en el sitio $|I\rangle$. Obsérvese como desde 1 (densidad máxima) a tiempo cero decae hasta el valor 0.5, o sea uniformemente distribuida en los dos sitios. También se grafica la función de autocorrelación completa, o sea encontrando al baño y el sitio en el mismo estado cuántico.

Modelo 2

Para observar la **dinámica difusiva** es necesario cumplir con la condición que el camino libre medio elástico ℓ sea mucho menor que las dimensiones lineales del sistema aN y a su vez esta menor que la longitud de localización ξ . Esto puede ser garantizado tomando $M = 2$, $V_{n,n+1} = V_{n+1,n} = V$; $(E_n)_{jk} = W_j \delta_{jk} + V/\sqrt{M} (1 - \delta_{jk})$ y con condiciones de contorno periódicas. $W_j \in [-W/2, W/2]$ y W es la medida del desorden. Esquemáticamente, este sistema corresponde a una sucesión de capas de área M unidas en forma de un toro de perímetro Na . La longitud de localización se calcula mediante el método del mínimo exponente de Lyapunov⁽¹⁵⁾.

En la figura 4 se puede ver el gráfico de la función de autocorrelación promediada sobre realizaciones del desorden. Se puede apreciar que luego de un periodo inicial decae con una ley $t^{-1/2}$. Es muy importante destacar que este resultado no depende del promedio sobre ensamble, el cual está destinado a una mejor apreciación del gráfico. La ley de decaimiento observada no depende del tamaño del sistema. Al apartamiento de la ley difusiva para tiempos largos confluyen los efectos de tamaño finito y de localización débil.

Conclusiones

Hemos visto que un sistema cuántico simple puede presentar comportamientos asociados a sistemas clásicos, tales como decaimiento exponencial y difusión. Estas soluciones están incluidas en la ecuación de Schrödinger sin necesidad de recurrir a ninguna aproximación. Sin embargo, la huella cuántica en estos resultados está presente a cortos y largos tiempos, donde influyen respectivamente la naturaleza acotada del espectro de excitaciones y el tamaño finito del sistema. Una forma cualitativa de explicar tanto el

comportamiento cuadrático para tiempos cortos como los ecos mesoscópicos, sigue de un simple análisis de Fourier. Como el número de estados (frecuencias) involucrados es discreto y finito, la teoría de transformadas discretas de Fourier predice que no se encontrará una exponencial en el tiempo igual a la inversa de la frecuencia máxima involucrada (ancho de banda), y que se encontrará un eco en el tiempo igual a la inversa de la frecuencia mínima del sistema. También, el comienzo de la evolución cuadrática es típico de cualquier sistema cuántico. Una observación experimental de este tipo de decaimiento ha sido recientemente observada⁽¹¹⁾. Para una evaluación analítica del tiempo de Debye τ_D , es suficiente requerir la coincidencia de los dos límites asintóticos conocidos para la dinámica: $P_{I,I}(t) \cong 1 - (V_s t/\hbar)^2$ válido para tiempos cortos y $P_{I,I}(t) \cong a \exp[-t/\tau_D]$ válido para tiempos largos. Ambas formas funcionales satisfacen la continuidad de la densidad y la corriente. Esto fija el tiempo al que es posible este vínculo $\tau_D = \hbar/V$ y el valor de a

$$a = (1 - (V_s/V)^2) \exp(2(V_s/V)^2) \\ \cong (1 - (V_s/V)^2) / (1 - 2(V_s/V)^2)$$

Este último parámetro es muy importante cuando no se tiene acceso experimental a la intensidad de la excitación al instante inicial previo al decaimiento (como en el caso de una polarización magnética en un experimento de resonancia). $a > 1$ muestra el error que se comete cuando se asume una atenuación exponencial.

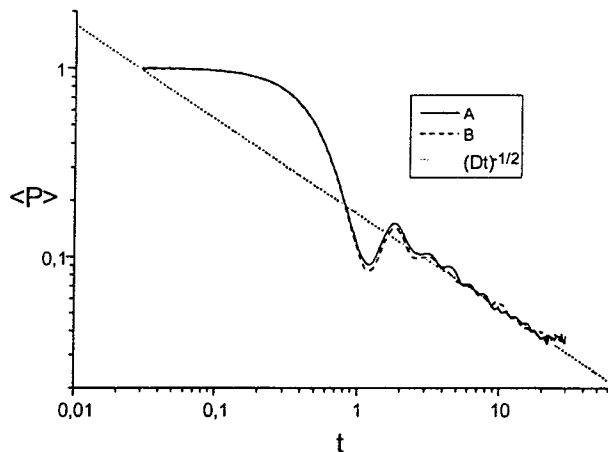


Figura 4. Comportamiento difusivo en el toro según el modelo 2. (A) $N=70$, con 700 promedios sobre realizaciones de desorden. (B) $N=100$, con 2100 promedios. Para los dos casos $M=9$. La constante D obtenida gráficamente es $35 a^2 \hbar/V$. La primer parte de la curva corresponde a un decaimiento cuadrático.

El sistema resuelto tiene su exacto equivalente en el sistema de un oscilador acoplado con un conjunto de osciladores independientes⁽¹²⁾. En ambos casos, si el espectro de excitaciones locales resultante del acoplamiento con el baño tiene forma de Lorentziana, la transformada de Fourier de la función de autocorrelación (función de Green local), será una exponencial.

Es interesante notar que cuando este acoplamiento con el baño se inserta en la excitación de un sistema de dos niveles, se genera la decoherencia exponencial de las oscilaciones naturales. Si bien al tiempo de Heisenberg aparecerá un resurgimiento de la excitación, es justamente este el que permite la conservación de corriente al realizar un promedio temporal de la misma. Esta es justamente la clave de la reciente propuesta⁽¹³⁾ para modelar la decoherencia en el transporte estacionario en sistemas mesoscópicos. En este caso, variando los largos de las cadenas es posible minimizar los efectos de interferencia indeseadas originadas entre los ecos de Heisenberg.

Respecto del modelo difusivo, queremos mencionar que esta es la primera vez que se muestra explícitamente este límite clásico en la ecuación de Schrödinger. Si bien era conocida su existencia, hasta ahora había limitaciones numéricas que impedían la solución exacta del límite esperado. La novedad del modelo 2 es que fue especialmente diseñado para proveer una longitud de localización mucho mayor que el camino libre medio entre colisiones ℓ . Esto fue posible sin particular costo numérico imponiendo un gran grado de acoplamiento entre los canales involucrados lo que hace que los procesos de scattering sean ineficientes para lograr la localización de los estados.

Finalmente los modelos estudiados y sus variantes pueden ser de gran utilidad para la observación de decoherencia en el sistema. La formulación conceptual del problema sigue los lineamientos presentados al fin del modelo 1. Resultados preliminares arrojan la posibilidad de leyes de decoherencia con leyes de potencia, exponencial y Gaussianas, por lo que la investigación continúa en este sentido.

Referencias

1 - J.L.D'Amato y H.M.Pastawski Anales AFA 1, 239-242

- (1989); J.L.D'Amato and H.M.Pastawski, Phys. Rev. B 41, 7411-7420 (1990).
- 2 - S.Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Ed. Cambridge Univ. Press (1995)
 - 3 - H.M. Pastawski Physical Review B 44 6329-6339 (1991); ibid 46 4053-4070 (1992)
 - 4 - E. V. Anda, S. S. Makler, H.M. Pastawski and R. G. Barrera; Braz. J. of Phys. 24, 330-336 (1994)
 - 5 - J. Bonca and S. A. Trugman, Phys. Rev. Lett. 75, 2566 (1995); ibid 79, 4874 (1997)
 - 6 - F.M.Cucchietti, *Trabajo Final de Licenciatura*, FaMAF (1998)
 - 7 - B.L.Hu, J.P.Paz, Y.Zhang, Phys. Rev. D 45 2843 (1992)
 - 8 - G. Usaj y H.M. Pastawski, Anales Asociación Física Argentina, 6 155-158 (1994); H.M.Pastawski, P. R. Levstein and G. Usaj, Phys. Rev. Lett. 75, 4310-4313 (1995)
 - 9 - Z.L. Mádi, B. Brutsher, T. Schulte-Herbrüggen, R. Brüscheiler, R.R. Ernst, Chem.Phys.Lett. 268 300-305 (1997)
 - 10 - K.V.Mikkelsen, M.A.Ratner Chem.Rev. 87 113 (1987); D.N.Beratan, J.N.Betts, J.N. Onuchic, Science 252 1285-1288 (1991); P.R.Levstein; H.M.Pastawski and J.L.D'Amato; J. of Phys.: Cond. Matter 2, 1781-1794 (1990).
 - 11 - S.R. Wilkinson, C.F. Bharucha, M.C. Fisher, K.W. Madison, P.R.Morrow, Q.Niu, B. Sundaram, M.G. Raizen, Nature 387 575 (1997)
 - 12 - F. H. Gaioli, E. T. García Alvarez and J. Guevara, Intl. J. Theor. Phys. 36, 2167 (1997); P.Blaise, P.Durand, O.Henri-Rousseau, Physica A 209 51 (1994)
 - 13 - H.M. Pastawski, E. Medina (comunicación privada)
 - 14 - H.M.Pastawski and G. Usaj Phys. Rev. B 57, 5017-5021 (1998)
 - 15 - H.M. Pastawski, A.Rojo and C.A.Balseiro; Phys. Rev. B 37, 6246-52 (1988)

CEILAP
CITEFA - CONICET
ZUFRIATEGUI Y VARELA
1603 - VILLA MARTELLI
REPUBLICA ARGENTINA