Konstrukce Försterova tenzoru

máme relaxační konstanty K_{ab} pro $|b\rangle \longrightarrow |a\rangle$

Tedy máme:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho_{aa}(t) = \sum_b K_{ab}\rho_{bb}(t)}$$

Ke konstrukci relaxačního tenzoru potřebujeme

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ab}(t) = ?$$

Využijeme fenomenologické znalosti

Při úbytku populace rychlostní konstantou

$$K_{aa} = -\sum_{b\neq a} K_{ba}$$

máme úbytek koherence

tato konstanta je záporná

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ac} = \frac{1}{2}K_{aa}\rho_{ac} \qquad \forall c$$

Od úbytku stavu $|c\rangle$ připisá také

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ac}(t) = \frac{1}{2}(K_{aa}+K_{cc})\rho_{ac}}$$

Celkově píšeme

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ab}(t) = \delta_{ab}\left(\sum_c K_{ac}\rho_{cc}(t)\right)$$

$$+(1-\delta_{ab})\frac{1}{2}(K_{aa}+K_{bb})\rho_{ab}(t)$$

Převedeme do tvaru tenzor × matice

→ přidáním Kroneckerových delt

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ab}(t) = \sum_{cd}\Big[\delta_{ab}K_{ac}\delta_{cd} + (1-\delta_{ab})\frac{1}{2}(K_{aa}+K_{bb})\delta_{ac}\delta_{db}\Big]\rho_{cd}(t)}$$

nevábná forma; ale skryté v Lindbladově formě

⇒ dodržuje pozitivitu matice hustoty

<u>Lindbladova forma Försterova tenzoru</u>

Relaxační část

$$\hat{A}_{ab} = |a\rangle\langle b|$$

zde není maticový element, je to operátor

$$\hat{A}_{ab} \qquad \hat{A}_{ba} = \hat{A}_{ab}^{\dagger}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{aa}(t)|a\rangle\langle a| = K_{ab}\,|a\rangle\langle b|\rho|b\rangle\langle a|$$

celkově máme

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho_{aa}(t)|a\rangle\langle a| = \sum_{b\neq a} K_{ab}\hat{A}_{ab}\hat{\rho}\hat{A}_{ab}^{\dagger}}$$

Odpovídající úbytek koherence v důsledku K_{ab}

$|a\rangle\langle c|$ $\quad$ $|c\rangle\langle a|$

úbytek stavu $|a\rangle$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ab}|a\rangle\langle b| = -\frac{1}{2}\sum_{c\neq a} K_{ca}\hat{A}_{ac}\hat{A}^{\dagger}_{ac}\hat{\rho}\,|b\rangle\langle b|$$

úbytek stavu $|b\rangle$

$$-\frac{1}{2}\sum_{c\neq b}|a\rangle\langle a|\hat{\rho}\,A_{bc}A^{\dagger}_{bc}K_{cb}$$

Jsou uvažovány všechny úbytky koherence v důsledku úbytku účastnících se stavů. (účastnících se koherence)

Sumace přes a a b

$$\frac{\partial}{\partial t}\sum_{ab}\rho_{ab}|a\rangle\langle a| = \frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = -\frac{1}{2}\sum_{a}\sum_{c\neq a}K_{ca}\hat{A}_{ac}\hat{A}^{\dagger}_{ac}\rho(t)\sum_{b}|b\rangle\langle b|$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{a}|a\rangle\langle a|\hat{\rho}(t)\sum_{b}\sum_{c\neq b}\hat{A}_{bc}\hat{A}^{\dagger}_{bc}K_{cb}$$

To dává

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = -\frac{1}{2}\Big(\sum_{a}\sum_{c\neq a}K_{ca}\hat{A}_{ac}\hat{A}^{\dagger}_{ac}\hat{\rho}(t) + \sum_{b}\sum_{c\neq b}\hat{\rho}(t)\hat{A}_{bc}\hat{A}^{\dagger}_{bc}K_{cb}\Big)$$

Sjednotíme indexy

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = -\frac{1}{2}\sum_{a}\sum_{c\neq a}K_{ca}\left(\hat{A}_{ac}\hat{A}^{\dagger}_{ac}\hat{\rho}(t) + \hat{\rho}\hat{A}_{ac}\hat{A}^{\dagger}_{ac}\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = -\frac{1}{2}\sum_{a,c\neq a}K_{ca}\left\{\hat{A}_{ac}\hat{A}^{\dagger}_{ac},\hat{\rho}(t)\right\}} \quad (*)$$

anti-komutátor

Prozkoumáme člen $\frac{\partial}{\partial t}\rho_{aa}|a\rangle\langle a|$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{aa}|a\rangle\langle a| = -\frac{1}{2}\sum_{c\neq a} K_{ca} \underbrace{\hat{A}_{ac}\hat{A}^{\dagger}_{ac}}_{|a\rangle\langle c|c\rangle\langle a|} \hat{\rho}\,|a\rangle\langle a|$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{c\neq a} K_{ca}\,|a\rangle\langle a|\hat{\rho}\underbrace{\hat{A}_{ac}\hat{A}^{\dagger}_{ac}}_{|a\rangle\langle c|c\rangle\langle a|}$$

$$= -\underbrace{\sum_{c\neq a} K_{ca}}_{\text{suma všech depopulačních členů}}\hat{\rho}_{aa}(t)\,|a\rangle\langle a|$$

V kinetických rovnicích jsme definovali

$$\boxed{K_{aa} = -\sum_{c\neq a} K_{ca}}$$

kde můžeme definovat $K_{aa}=0$, abychom mohli spojit rovnice pro ρ_{ab} $a\neq b$ a rovnice pro ρ_{aa} do jedné!

Rovnice (*) obsahují nejen úbytek koherence, ale i úbytek populace.

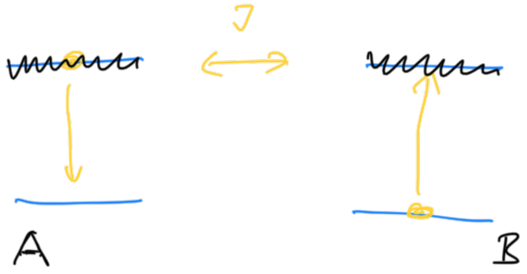
Spojíme vše dohromady

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = \sum_{ac} K_{ac}\left(\hat{A}_{ac}\hat{\rho}(t)\hat{A}^{\dagger}_{ac} - \frac{1}{2}\left\{\hat{A}^{\dagger}_{ac}\hat{A}_{ac},\hat{\rho}(t)\right\}\right)}$$

Tohle je Lindbladova forma

a je tedy samozřejmě pozitivní

"Pure dephasing" – rozfázování v důsledku fluktuací



$$H_J = \begin{pmatrix} 0 & J \\ J & 0 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{l} |A_e\rangle|B_g\rangle \;\; |a\rangle \\ |A_g\rangle|B_e\rangle \;\; |b\rangle \end{array}$$

$$H_{S-B} = \begin{pmatrix} \Delta V_1 & 0 \\ 0 & \Delta V_2 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\rho_{ab}(t) \simeq \rho_{ag}(t)\,\rho_{gb}(t)}$$

pro slabé J

$|a_A\rangle \quad |g_A\rangle$

$|b\rangle \quad |g_B\rangle$

$$|a_A\rangle|g_B\rangle\langle g_A|\langle b_B|$$

$$\rightarrow |a_A\rangle\langle g_A| \times |g_B\rangle\langle b_B|$$

$$\propto \rho_{ag}(t) \qquad \rho_{gb}$$

$$\rho_{ag}(t) = \rho_{ag}(0)\, e^{\boxed{-g_a(t)} - i\omega_{ag} t}$$

$$\rho_{ab}(t) = \rho_{ab}(0)\, e^{\boxed{-g_a(t) - g_b^*(t)}} \times e^{-i\omega_{ab} t}$$

Časový vývoj $\rho_{ab}(t)$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ab}(t) = \underbrace{\left(-\frac{\partial}{\partial t}\left[g_a(t) + g_b^*(t)\right]\right)}_{\text{časově závislá relaxační „konstanta"}} \underbrace{e^{-g_a(t) - g_b^*(t) - i\omega_{ab} t}\rho_{ab}(0)}_{\rho_{ab}(t)} \underbrace{- i\omega_{ab}(\dots)}_{\text{od } H_0}$$

$$g_a(t) = \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' C_a(\tau') \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} g_a(t) = \int_0^t d\tau\, C_a(\tau)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\rho_{ab}(t) = -i\omega_{ab}\rho_{ab}(t) - \int_0^t d\tau \left[C_a(\tau) + C_b^*(\tau)\right]\rho_{ab}(t)$$

K Lindbladově formě Försterovy teorie jistě můžeme/musíme přilepit tento člen popisující „pure dephasing"

$$\boxed{R^{pure\,deph}_{abcd}(t) = -\delta_{ac}\delta_{bd}\int_0^t d\tau\,\left[C_a(\tau)+C_b^*(\tau)\right]}$$

Uvažujme případ velmi rychlých fluktuací

$$C_a(\tau) = J_a^{pd}\,\delta(\tau)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{R^{pd}_{abcd} = -\left(J_a^{pd}+J_b^{pd}\right)\delta_{ac}\delta_{bd}}$$

Lze toto převést na Lindbladovu formu?

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ab}(t)\,|a\rangle\langle b| = -\left(J_a^{pd}+J_b^{pd}\right)\rho_{ab}(t)\,|a\rangle\langle b|$$

zatím vždy projektory $|a\rangle\langle b|$ pro $a\neq b$; ale uvnitř projektor $|a\rangle\langle a|$

$$= -J_a\,|a\rangle\underbrace{\langle a|a\rangle}_{1}\langle a|\hat\rho(t)|b\rangle\langle b|$$

$$-J_b\,|a\rangle\langle a|\rho(t)|b\rangle\langle b|b\rangle\langle b|$$

Provedeme sumaci $\sum_{ab}$ $\Rightarrow$ na levé straně $\frac{\partial}{\partial t}\hat\rho(t)$

$$\Rightarrow \quad \sum_{ab}\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ab}\,|a\rangle\langle b| = \frac{\partial}{\partial t}\hat\rho(t)$$

$$= -\sum_a \gamma_a \hat{A}_{aa} \hat{A}_{aa} \hat{\rho}(t) \overbrace{\sum_b |b\rangle\langle b|}^{\mathbb{1}}$$

$$- \sum_b \gamma_b \underbrace{\left(\sum_a |a\rangle\langle a|\right)}_{\mathbb{1}} \hat{\rho}(t) \hat{A}_{bb} \hat{A}_{bb}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = \mathcal{D}\hat{\rho}(t) \Rightarrow \mathcal{D}\hat{\rho}(t) = -\sum_a \gamma_a \left(\hat{A}^{\dagger}_{aa} A_{aa} \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{A}^{\dagger}_{aa} \hat{A}_{aa}\right)$$

$$= -\sum_a \gamma_a^{pd} \left\{\hat{A}^{\dagger}_{aa} \hat{A}_{aa}, \hat{\rho}(t)\right\}$$

Ověříme:

$$\langle a| \mathcal{D}\hat{\rho}(t) |b\rangle = -\gamma_a \rho_{ab}(t) - \gamma_b \rho_{ab}(t)$$

Pozor na příspěvek k populaci!

$$\langle c| \mathcal{D}\hat{\rho}(t) |c\rangle = -\gamma_c \rho_{cc}(t) - \gamma_c \rho_{cc}(t) = -2\gamma_c \rho_{cc}(t)$$

{ nefyzikální depopulace v důsledku rozfázování

Musíme sem zachránit člen

$$\sum_a \gamma_a \hat{A}^{\dagger}_{aa} \hat{\rho} \hat{A}_{aa}$$

člen nutně patřící do Lindbladovy formy

člen dává:

$$\langle c| \sum_a \gamma_a \overset{|a\rangle}{\hat{A}^{\dagger}_{aa}} \hat{\rho} \overset{\langle a|}{\hat{A}_{aa}} |d\rangle = \gamma_c \rho_{cc} \delta_{cd}$$

člen $\sum_a \gamma_a A^{\dagger}_{aa} \hat{\rho} A_{aa}$ může kompenzovat člen $-\frac{1}{2}\sum_a \gamma_a \{\hat{A}^{\dagger}_{aa} \hat{A}_{aa}, \hat{\rho}\}$

tohle je trace,

kterým se $\hat{A}^{\dagger}_{aa}$ vyskytuje v Lindbladově formě

Zadefinujeme:

$$\tilde{J}_a(t) = 2\int_0^t d\tau\, C_a(\tau)$$

dostáváme formu

$$\sum_a \tilde{J}_a(t)\left(\hat{A}^+_{aa}\hat{\rho}(t)\hat{A}_{aa} - \frac{1}{2}\left\{\hat{A}^+_{aa}A_{aa},\hat{\rho}(t)\right\}\right)$$

$$= \mathcal{R}^{pd}(t)\hat{\rho}(t)$$

Shrnutí

Relaxační konstanty $\quad K_{ab}(t) = K_{ab}^{\text{Förster}}$

pure dephasing $\quad K_{aa}(t) = -2\int_0^t d\tau\, C_a(\tau) = -2J_a$

projekční operátory $\quad \hat{A}_{ab} = |a\rangle\langle b|$

$$\boxed{\mathcal{R}^{F\text{-Lindblad}}(t)\,\hat{\rho}(t) = \sum_{ac} K_{ac}(t)\left(\hat{A}^+_{ac}\hat{\rho}(t)A_{ac} - \frac{1}{2}\left\{\hat{A}^+_{ac}A_{ac},\hat{\rho}(t)\right\}\right)}$$

Takto zkonstruovaný Försterův tenzor zaručuje pozitivitu matice hustoty