Sekulární aproximace

Sekulární ⇐ saeculum = věk, století

Zjednodušení relaxačního tenzoru

Pohybové: (v bázi vlastních stavů Ham.)

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{\alpha\beta}(t) = -i\omega_{\alpha\beta}\rho_{\alpha\beta}(t) - \sum_{\gamma\delta} R_{\alpha\beta\gamma\delta}(t)\,\rho_{\gamma\delta}(t)$$

$$\begin{array}{cccccc} I & I & I & J & I\,J & J \end{array}$$

V dlouhém čase

$$R_{\alpha\beta\gamma\delta}(t) \longrightarrow R_{\alpha\beta\gamma\delta} = \text{const.}$$

Jsme v režimu slabé vazby na lázeň ⇒

$$\rho_{\alpha\beta}(t) = \tilde{\rho}_{\alpha\beta}(t)\, e^{-i\omega_{\alpha\beta}t}$$

pomalá obálka

Jak na sebe působí jednotlivé elementy ρ

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{\alpha\beta}(t) = -i\omega_{\alpha\beta}\rho_{\alpha\beta}(t) - \underbrace{J}_{= R_{\alpha\beta\gamma\delta}}\,\rho_{\gamma\delta}(t)$$

$$\tilde{\rho}_{\alpha\beta}(t) = e^{i\omega_{\alpha\beta}t}\rho_{\alpha\beta}(t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\rho}_{\alpha\beta}(t) = \cancel{i\omega_{\alpha\beta}\tilde{\rho}_{\alpha\beta}(t)} - \cancel{i\omega_{\alpha\beta}\tilde{\rho}_{\alpha\beta}(t)} - J e^{i\omega_{\alpha\beta}t} e^{-i\omega_{\gamma\delta}t}\tilde{\rho}_{\gamma\delta}(t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\rho}_{\alpha\beta}(t) = -J\, e^{i\underbrace{(\omega_{\alpha\beta}-\omega_{\gamma\delta})}_{\Delta\omega}t}\, \tilde{\rho}_{\gamma\delta}(t)$$

Integrovat i $\tilde{\rho}_{\gamma\delta}(t) \approx \tilde{\rho}_{\gamma\delta}(0) \approx \tilde{\rho}_{\gamma\delta}(t)$

$$\tilde{\rho}_{\alpha\beta}(t) = \tilde{\rho}_{\alpha\beta}(0) - J\int_0^t d\tau\, e^{i\Delta\omega\tau}\, \tilde{\rho}_{\gamma\delta}(t)$$

$$= \tilde{\rho}_{\alpha\beta}(0) - \frac{J}{i\Delta\omega}\left(e^{i\Delta\omega t} - 1\right)\tilde{\rho}_{\gamma\delta}(t)$$

$$\lim_{\Delta\omega\to 0} \frac{J}{i\Delta\omega}\left(e^{i\Delta\omega t} - 1\right) = J\,\frac{\cancel{1} + \cancel{i\Delta\omega}\, t - \cancel{1}}{\cancel{i\Delta\omega}} = Jt$$

Pro $\Delta\omega = 0$

$$\tilde{\rho}_{\alpha\beta}(t) = \tilde{\rho}_{\alpha\beta}(0) - Jt\,\tilde{\rho}_{\gamma\delta}(t)$$

roste s časem úměrně $\tilde{\rho}_{\gamma\delta}(t)$

Pro $\Delta\omega \neq 0$

$$\tilde{\rho}_{\alpha\beta}(t) = \tilde{\rho}_{\alpha\beta}(0) - J\left(\frac{e^{i\Delta\omega t} - 1}{i\Delta\omega}\right)\tilde{\rho}_{\gamma\delta}(t)$$

1) neroste, jen osciluje
2) je tím menší, čím je $\Delta\omega$ větší

Závěr:

1) Vzájemné působení koherencí o různých frekvencích $\Delta\omega \neq 0$ můžeme zanedbat
→ zanedbáme veškerá vzájemná působení koherencí

2) Populace mají $\omega_{\alpha\alpha} = 0$; můžeme zanedbat

působení koherencí na populace

Z celého relaxačního tensoru zůstávají pouze dva typy příspěvků

Koherence:

$$\delta\omega = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{\alpha\beta}(t) = -i\omega_{\alpha\beta}\rho_{\alpha\beta}(t) - R_{\alpha\beta\alpha\beta}(t)\,\rho_{\alpha\beta}(t)$$

útlum koherence

$$\mathrm{Re}\, R_{\alpha\beta\alpha\beta} \geq 0$$

Populace

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{\alpha\alpha}(t) = -\sum_{\beta} R_{\alpha\alpha\beta\beta}(t)\,\rho_{\beta\beta}(t)$$

rychlostní konstanty přenosu populace

$$R_{\alpha\alpha\beta\beta} = -K_{\alpha\beta}$$

$$\mathrm{Im}\, R_{\alpha\alpha\beta\beta} = 0$$

$$\mathrm{Re}\, R_{\alpha\alpha\beta\beta} < 0 \quad \text{pro } \alpha \neq \beta$$

$$R_{\alpha\alpha\alpha\alpha} = K_{\alpha\alpha} \geq 0$$