ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА
2020. Т. 51. ВЫП. 4. С. 511–522

ТОЧНАЯ НЕМАРКОВСКАЯ ЭВОЛЮЦИЯ С НЕСКОЛЬКИМИ РЕЗЕРВУАРАМИ

А. Е. Теретёнков *

Математический институт им. В. А. Стеклова РАН, Москва

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва

Рассмотрена модель многоуровневой системы, взаимодействующей с набором резервуаров, для которой можно получить точную динамику редуцированной матрицы плотности системы, не используя марковское приближение. А именно, данная динамика полностью определяется конечным набором линейных дифференциальных уравнений. В данной работе результаты, полученные ранее для одного лоренцевского пика в спектральной плотности, обобщены на случай произвольного числа таких пиков, а также учтен вклад омической спектральной плотности.

The model of a multilevel system interacting with several reservoirs is considered. The exact reduced density matrix evolution could be obtained for this model without Markov approximation. Namely, this evolution is fully defined by the finite set of linear differential equations. In this work, the results which were obtained previously for only one Lorentz peak in the spectral density are generalized to the case of an arbitrary number of such peaks. The case of the Ohmic contribution in the spectral density is also taken into account.

PACS: 05.30.-d

ВВЕДЕНИЕ

Строгий вывод уравнений динамики редуцированной матрицы плотности системы в марковском приближении берет свое начало в работе Н. М. Крылова и Н. Н. Боголюбова [1]. Изложенные там методы получили развитие в рамках теории стохастического предела, современное изложение которой может быть найдено в [2]. Получаемые при этом кинетические уравнения для матрицы плотности системы имеют вид уравнений Горини–Коссаковского–Сударшана–Линдблада (ГКСЛ) [3, 4].

Однако в последнее время все больший интерес привлекают задачи немарковской динамики [5–12]. В частности, естественно задаться вопросом,

*E-mail: taemsu@mail.ru

когда немарковская динамика системы может быть расширена до марковской динамики для конечномерной матрицы плотности. В данной работе рассматривается модель многоуровневой системы, взаимодействующей с резервуарами при нулевой температуре, для которой динамика матрицы плотности системы может быть получена точно в терминах конечномерного уравнения Шрёдингера с неэрмитовым гамильтонианом. Мы проанализируем случаи, когда динамика редуцированной матрицы плотности может быть расширена до марковской динамики большей, но конечной размерности.

Данная работа развивает и обобщает результаты, полученные в [13, 14]. В разд. 1 мы опишем рассматриваемую модель и приведем результаты работы [14], необходимые для настоящей статьи. За подробным обсуждением того, как данная модель связана с другими известными в литературе моделями, мы отсылаем читателя к [13, 14]. Упомянем только, что она тесно связана с моделью Фридрихса [15], а метод, используемый нами в утверждениях 1 и 3, является развитием метода псевдомод, предложенного в [16–18]. В разд. 2 мы рассмотрим случай, когда спектральная плотность резервуара является комбинацией лоренцевских пиков, а в разд. 3 учтем омический вклад в спектральную плотность. Наконец, в заключении мы подведем итоги и наметим возможные направления дальнейших исследований.

1. МОДЕЛЬ

Мы будем рассматривать динамику в гильбертовом пространстве

$$\mathcal{H} \equiv (\mathbb{C} \oplus \mathbb{C}^N) \otimes \bigotimes_{i=1}^{N} \mathfrak{F}_b(\mathcal{L}^2(\mathbb{R})).$$

Здесь $\mathbb{C} \oplus \mathbb{C}^N$ — $(N+1)$-мерное гильбертово пространство с выделенным одномерным линейным подпространством. Степени свободы $\mathbb{C}^N$ описывают возбужденные состояния системы, а выделенное подпространство соответствует основному состоянию. Пусть $|i\rangle, i = 0, 1, \ldots, N$, — ортонормированный базис пространства $\mathbb{C} \oplus \mathbb{C}^N$, где $|0\rangle$ соответствует выделенному пространству. $\mathfrak{F}_b(\mathcal{L}^2(\mathbb{R}))$ — бозонные фоковские пространства, соответствующие резервуарам. Обозначим $|\Omega\rangle$ вакуумное состояние этих резервуаров. Также введем операторы рождения и уничтожения, удовлетворяющие каноническим коммутационным соотношениям: $[b_i(k), b_j^\dagger(k')] = \delta_{ij}\delta(k-k')$, $[b_i(k), b_j(k')] = 0$, $b_i(k)|\Omega\rangle = 0$.

Мы рассматриваем гамильтониан, который обнуляется на основном состоянии, в остальном же имеет общий вид. А именно,

$$\hat{H}_S = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} J_{ij} |i\rangle\langle j| = 0 \oplus H_S, \quad i, j = 1, \ldots, N, \tag{1}$$

где мы не предполагаем, что $\hat{H}_S$ диагонализуется в базисе $|i\rangle$. С физической точки зрения $|i\rangle$ играет роль локального базиса [19].

Гамильтониан резервуара представляет собой суммы одинаковых гамильтонианов свободных бозонных полей (с одинаковыми дисперсионными соотношениями $\omega(k)$):

$$\hat{H}_B = \sum_{i=1}^{N} \int \omega(k)\, b_i^\dagger(k)\, b_i(k)\, dk. \tag{2}$$

Взаимодействие описывается следующим гамильтонианом:

$$\hat{H}_I = \sum_i \int \Big(g^*(k)|0\rangle\langle i| \otimes b_i^\dagger(k) + g(k)|i\rangle\langle 0| \otimes b_i(k) \Big)\, dk. \tag{3}$$

Отметим, что данное выражение учитывает, что каждый уровень взаимодействует со своим резервуаром, а функции $g(k)$ (иногда называемые формфакторами [21]) совпадают для всех резервуаров. С физической точки зрения такой гамильтониан подразумевает, что выполнено дипольное приближение (так как учтены только члены, линейные по операторам рождения и уничтожения), а также приближения вращающейся волны (это выражено в отсутствии членов $|i\rangle\langle 0| \otimes b_i^\dagger(k)$ в гамильтониане).

Мы рассмотрим уравнение Шрёдингера

$$\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = -i\hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{4}$$

с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_S \otimes I + I \otimes \hat{H}_B + \hat{H}_I$ и начальным условием

$$|\Psi(0)\rangle = (|\psi(0)\rangle + \psi_0(0)|0\rangle) \otimes |\Omega\rangle, \quad \langle 0|\psi(0)\rangle = 0, \tag{5}$$

т. е. начальное условие является полностью факторизованным и предполагает нулевую температуру резервуара.

Нас будет интересовать динамика редуцированной матрицы плотности

$$\rho_S(t) \equiv \mathrm{tr}_R\, |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|,$$

где tr_R — частичный след по резервуару, т. е. по пространствам $\bigotimes_{i=1}^{N} \mathfrak{F}_b(\mathcal{L}^2(\mathbb{R}))$. В [14] мы доказали следующую теорему, позволяющую описать динамику редуцированной матрицы плотности в терминах конечномерного решения интегродифференциального уравнения.

Теорема 1. *Пусть интеграл сходится (корреляционная функция резервуара)*

$$G(t) = \int |g(k)|^2\, \mathrm{e}^{-i\omega(k)t}\, dk \tag{6}$$

для произвольного момента времени $t \in \mathbb{R}_+$ *и определяет непрерывную функцию, тогда*

$$\rho_S(t) = \begin{pmatrix} 1 - ||\psi(t)||^2 & \psi_0(0)\langle\psi(t)| \\ \psi_0^*(0)|\psi(t)\rangle & |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \end{pmatrix},$$

где $|\psi(t)\rangle$ *— решение интегродифференциального уравнения*

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -iH_S|\psi(t)\rangle - \int\limits_0^t ds\, G(t-s)|\psi(s)\rangle \tag{7}$$

с начальным условием $|\psi(t)\rangle|_{t=0} = |\psi(0)\rangle$.

В физической литературе часто считается заданной не функция $g(k)$ или $G(t)$, а спектральная плотность $\mathcal{J}(\omega)$, т. е. преобразование Фурье функции $G(t)$:

$$G(t) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, \mathrm{e}^{-i\omega t}\mathcal{J}(\omega), \quad \mathcal{J}(\omega) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} G(t)\, \mathrm{e}^{i\omega t} dt.$$

В [14] мы рассмотрели случай спектральных плотностей с одним лоренцевским пиком. В следующем разделе мы обобщим эти результаты на случай произвольного конечного числа лоренцевских пиков, а в разд. 3 учтем вклад омической спектральной плотности.

2. НАБОР ЛОРЕНЦЕВСКИХ ПИКОВ

В данном разделе мы сведем динамику со спектральной плотностью в виде положительной комбинации лоренцевских пиков

$$\mathcal{J}_L(\omega) = \sum_{j=1}^K \frac{\gamma_j g_j^2}{\left(\frac{\gamma_j}{2}\right)^2 + (\omega - \varepsilon_j)^2}, \quad g_j > 0, \quad \gamma_i > 0, \quad K \in \mathbb{N}, \tag{8}$$

к системе линейных уравнений. Конечный набор чисел g_j и функция $g(k)$ обозначены одной буквой, так как они имеют близкий физический смысл. При этом стоит помнить, что $g(k)$ — комплексно-значные функции, а g_j — строго положительные вещественные числа. Корреляционная функция резервуара в случае спектральной плотности (8) принимает вид

$$G_{\mathrm{Lorentz}}(t) = \sum_{j=1}^K g_j^2 \exp\left(-\frac{\gamma_j}{2}|t| - i\varepsilon_j t\right). \tag{9}$$

Тогда выполнено следующее утверждение.

Утверждение 1. *Пусть* $|\psi(t)\rangle$ *— решение уравнения* (7) *с начальным условием* $|\psi(t)\rangle|_{t=0} = |\psi(0)\rangle$ *в случае, когда* $G(t) = G_{\mathrm{Lorentz}}(t)$ *определяется формулой* (9)*, тогда* $(K+1)N$*-мерный вектор* $|\tilde{\psi}(t)\rangle \equiv |\psi(t)\rangle \oplus \oplus_{j=1}^{K} |\varphi_j(t)\rangle \in \oplus^{K+1}\mathbb{C}^N$*, где*

$$|\varphi_j(t)\rangle \equiv -ig_j \int\limits_0^t ds \exp\left[-\left(\frac{\gamma_j}{2} + i\varepsilon_j\right)(t-s)\right] |\psi(s)\rangle, \tag{10}$$

удовлетворяет уравнению Шрёдингера с неэрмитовым гамильтонианом

$$\frac{d}{dt}|\tilde{\psi}(t)\rangle = -iH_{\mathrm{eff}}|\tilde{\psi}(t)\rangle,$$

$$H_{\mathrm{eff}} = \begin{pmatrix} H_S & g_1 I_N & g_2 I_N & \cdots & g_K I_N \\ g_1 I_N & \left(\varepsilon_1 - i\frac{\gamma_1}{2}\right) I_N & 0 & \cdots & 0 \\ g_2 I_N & 0 & \left(\varepsilon_2 - i\frac{\gamma_2}{2}\right) I_N & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ g_K I_N & 0 & 0 & 0 & \left(\varepsilon_K - i\frac{\gamma_K}{2}\right) I_N \end{pmatrix} \tag{11}$$

с начальным условием $|\tilde{\psi}(0)\rangle = |\psi(0)\rangle \oplus 0$.

Доказательство. Подставляя (9) в (7) и учитывая (10), получим

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -iH_S|\psi(t)\rangle - i\sum_{j=1}^{K} g_K |\varphi_j(t)\rangle,$$

а дифференцируя (10) по времени t, получаем еще K дифференциальных уравнений

$$\frac{d}{dt}|\varphi_j(t)\rangle = -ig|\psi_j(t)\rangle - \left(\frac{\gamma_j}{2} + i\varepsilon_j\right)|\varphi_j(t)\rangle.$$

Комбинируя эти дифференциальные уравнения в одно для вектора $|\tilde{\psi}(t)\rangle = |\psi(t)\rangle \oplus |\varphi_1(t)\rangle \oplus \ldots \oplus |\varphi_K(t)\rangle = |\psi(t)\rangle \oplus \oplus_{j=1}^{K} |\varphi_j(t)\rangle$, получим (11). Кроме того, определение (10) приводит к $|\varphi_j(0)\rangle = 0$, т. е. к начальному условию $|\tilde{\psi}(0)\rangle = |\psi(0)\rangle \oplus 0$. $\square$

В [13] было показано, что в случае, когда матрица $V = (i/2)(H_{\mathrm{eff}} - H_{\mathrm{eff}}^{\dagger})$ неотрицательно определена, то по такому неэрмитову гамильтониану может быть построено (одночастичное) уравнение ГКСЛ такое, что $\rho_S(t)$ получается взятием следа по KN дополнительным степеням свободы, возникшим в уравнении (11) по сравнению с (7). Следуя [17], мы называем такие степени свободы псевдомодами, а матрицу V, следуя [20], будем называть оптическим потенциалом. Не останавливаясь на этом вопросе подробно, отметим, что

$$V = 0 \oplus \frac{\gamma_1}{2} I_N \oplus \ldots \oplus \frac{\gamma_K}{2} I_N$$

и неотрицательная определенность матрицы V следует из положительности γ_j. Таким образом, в случае, когда спектральная плотность является положительной комбинацией лоренцевских пиков, в соответствии с [13] мы получили, что динамика редуцированной матрицы плотности всегда может быть расширена до марковской (ГКСЛ) динамики большей размерности.

3. ОМИЧЕСКАЯ СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ

В данном разделе мы рассмотрим влияние вклада омической спектральной плотности

$$\mathcal{J}_{\mathrm{Ohmic}}(\omega) = \eta\omega, \quad \eta > 0.$$

Так как преобразование Фурье такой функции существует только в смысле обобщенных функций, то теорема 1 напрямую неприменима. Поэтому мы будем рассматривать семейство спектральных плотностей с экспоненциальным обрезанием

$$\mathcal{J}_{\Omega}(\omega) = \eta\omega \, \exp\left(-\frac{|\omega|}{\Omega}\right),$$

параметризованных частотой обрезания Ω, которую мы будем стремить к $+\infty$. Соответствующая корреляционная функция резервуара имеет вид

$$G_{\Omega}(t) = -i\eta \frac{2t\Omega^3}{\pi(1 + (\Omega t)^2)}. \tag{12}$$

Вместо H_S нам также понадобится семейство гамильтонианов

$$H_S(\Omega) = H_S^{(r)} + \frac{\eta\Omega}{\pi}. \tag{13}$$

Далее мы увидим, что $\eta\Omega/\pi$ играет роль контрчлена [22, разд. 3.6.1]. Так как мы устремим $\Omega \to +\infty$, то с физической точки зрения это соответствует тому, что энергии переходов из основного состояния в возбужденное значительно больше энергий переходов между возбужденными состояниями. Наши исследования были мотивированы моделями переноса в биологических системах, где такое условие выполнено [23–26]. Более того, именно это условие делает правомерным пренебрежение многоэкситонными состояниями в нашей модели, описанной в разд. 1.

Утверждение 2. *Пусть* $|\psi_\Omega(t)\rangle$ *— решение* (7) *с начальным условием* $|\psi_\Omega(0)\rangle = |\psi(0)\rangle$, *где* $G(t) = G_\Omega(t) + G_c(t)$, $G_\Omega(t)$ *определяется формулой* (12), *а* $G_c(t)$ *— непрерывная функция,* $H_S = H_S(\Omega)$ *определяется формулой* (13). *Пусть при* $t > 0$ *существует предел* $\lim\limits_{\Omega\to+\infty} |\psi_\Omega(t)\rangle = |\psi^{(r)}(t)\rangle$, *являющийся бесконечно дифференцируемой функцией при* $t \in (0, +\infty)$, *тогда* $|\psi^{(r)}(t)\rangle$ *— решение уравнения*

$$\frac{d}{dt}|\psi^{(r)}(t)\rangle = -i\frac{1}{1+i\dfrac{\eta}{2}}H_S^{(r)}|\psi^{(r)}(t)\rangle - \int\limits_0^t ds\ \frac{1}{1+i\dfrac{\eta}{2}}G_c(t-s)|\psi^{(r)}(s)\rangle \quad (14)$$

с начальным условием $|\psi^{(r)}(0)\rangle = 1/(1+i\eta/2)|\psi(0)\rangle$.

Доказательство. Приведем только краткий набросок доказательства. Отметим, что

$$G_\Omega(t) = i\eta\frac{d}{dt}f_\Omega(t), \qquad f_\Omega(t) = \frac{1}{\pi}\frac{\Omega}{1+(\Omega t)^2},$$

где $f_\Omega(t)$ — симметричное δ-образное семейство. Тогда

$$-\int\limits_0^t ds\ G_\Omega(t-s)|\psi_\Omega(s)\rangle = -i\eta\int\limits_0^t ds\ f'_\Omega(t-s)|\psi_\Omega(s)\rangle =$$

$$= i\eta\int\limits_0^t ds\ \frac{d}{ds}f_\Omega(t-s)|\psi_\Omega(s)\rangle =$$

$$= i\eta\left(\frac{\Omega}{\pi}|\psi_\Omega(t)\rangle - f_\Omega(t)|\psi(0)\rangle\right) - i\eta\int\limits_0^t ds\ f_\Omega(t-s)\frac{d}{ds}|\psi_\Omega(s)\rangle.$$

Подставляя данное выражение в интегральную форму уравнения (7), имеем

$$|\psi_\Omega(t)\rangle - |\psi(0)\rangle = -iH_S^{(r)}\int\limits_0^t d\tau|\psi_\Omega(\tau)\rangle - \int\limits_0^t d\tau\int\limits_0^\tau ds\ G_c(\tau-s)|\psi_\Omega(s)\rangle -$$

$$- i\eta\int\limits_0^t d\tau f_\Omega(\tau)|\psi(0)\rangle - i\eta\int\limits_0^t d\tau\int\limits_0^\tau ds\ f_\Omega(\tau-s)\frac{d}{ds}|\psi_\Omega(s)\rangle.$$

(Члены вида $\int\limits_0^t d\tau \frac{i\eta\Omega}{\pi}|\psi_\Omega(\tau)\rangle$ сократились.) При $t > 0$, $\Omega \to +\infty$ получаем

$$|\psi^{(r)}(t)\rangle - |\psi(0)\rangle = -iH_S^{(r)}\int\limits_0^t d\tau|\psi^{(r)}(\tau)\rangle - \int\limits_0^t d\tau \int\limits_0^\tau ds\, G_c(\tau - s)|\psi^{(r)}(s)\rangle - \\ - i\frac{\eta}{2}|\psi(0)\rangle - i\frac{\eta}{2}(|\psi^{(r)}(t)\rangle - |\psi(0)\rangle).$$

Дифференцируя и сокращая на $1 + \eta/2$, получаем (14). Кроме того, полагая в данном уравнении $t = 0$, получаем требуемое начальное условие. □

Отметим, что если ограничиться только омическим членом, положив $G_c(t) = 0$, то уравнение (14) принимает вид уравнения Шрёдингера (11) с неэрмитовым гамильтонианом $H_{\text{eff}} = 1/(1 + i\eta/2)H_S^{(r)}$. Соответствующий оптический потенциал имеет вид $V = (\eta/2)/(1 + (\eta/2))^2 H_S^{(r)}$. Таким образом, для того, чтобы можно было построить марковское расширение, необходимо, чтобы гамильтониан $H_S^{(r)}$ был положительно определен:

$$H_S^{(r)} \geqslant 0. \tag{15}$$

Отметим, что с физической точки зрения это означает, что переход на возбужденные уровни гамильтониана системы $\hat{H}_S$ из основного состояния соответствует большим энергиям, чем $\eta\Omega/\pi$, которая определяется частотой обрезания.

По аналогии с утверждением 1 можно получить следующее утверждение.

Утверждение 3. *Пусть* $|\psi^{(r)}(t)\rangle$ *— решение уравнения* (14) *с начальным условием* $|\psi(t)\rangle|_{t=0} = |\psi(0)\rangle$ *в случае, когда* $G_c(t) = G_{\text{Lorentz}}(t)$ *определяется формулой* (9)*, тогда* $(K + 1)N$*-мерный вектор* $|\tilde{\psi}(t)\rangle \equiv |\psi(t)\rangle \oplus \oplus_{j=1}^K|\varphi_j(t)\rangle \in \oplus^{K+1}\mathbb{C}^N$*, где* $|\varphi_j(t)\rangle$ *определяется аналогично* (10)*, удовлетворяет уравнению Шрёдингера вида* (11) *с неэрмитовым гамильтонианом*

$$H_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{1+i\dfrac{\eta}{2}}H_S^{(r)} & \dfrac{g_1}{1+i\dfrac{\eta}{2}}I_N & \dfrac{g_2}{1+i\dfrac{\eta}{2}}I_N & \cdots & \dfrac{g_K}{1+i\dfrac{\eta}{2}}I_N \\ g_1 I_N & \left(\varepsilon_1 - i\dfrac{\gamma_1}{2}\right)I_N & 0 & \cdots & 0 \\ g_2 I_N & 0 & \left(\varepsilon_2 - i\dfrac{\gamma_2}{2}\right)I_N & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ g_K I_N & 0 & 0 & 0 & \left(\varepsilon_K - i\dfrac{\gamma_K}{2}\right)I_N \end{pmatrix}.$$

Чтобы проверить неотрицательную определенность оптического потенциала в данном случае, заметим, что если перейти в каждом подпространстве $\mathbb{C}^N$ пространства $\oplus^{K+1}\mathbb{C}^N$ в глобальный базис (собственный базис H_S), то H_{eff} разобьется в прямую сумму блоков вида (E_α — собственные значения H_S)

$$H_{\text{eff},\alpha} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{1+i\dfrac{\eta}{2}} E_\alpha & \dfrac{1}{1+i\dfrac{\eta}{2}}\, \mathbf{g}^T \\ \mathbf{g} & \varepsilon - i\dfrac{1}{2}\gamma \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{g}^T = (g_1 \cdots g_K), \quad \varepsilon = \operatorname{diag}(\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_K), \quad \gamma = \operatorname{diag}(\gamma_1, \ldots, \gamma_K).$$

Тогда оптический потенциал разобьется в прямую сумму блоков вида

$$V_\alpha = \frac{i}{2}(H_{\text{eff},\alpha} - H^\dagger_{\text{eff},\alpha}) = \begin{pmatrix} \dfrac{\dfrac{\eta}{2}}{1+\left(\dfrac{\eta}{2}\right)^2}\, E_\alpha & \dfrac{\dfrac{\eta}{2}}{2(1+i\dfrac{\eta}{2})}\, \mathbf{g} \\ \dfrac{\dfrac{\eta}{2}}{2(1+i\dfrac{\eta}{2})}\, \mathbf{g}^T & \dfrac{1}{2}\,\gamma \end{pmatrix}.$$

Так как подматрица $(1/2)\gamma$ положительно определена, то для положительной определенности V_α достаточно проверить положительность определителя

$$\det V_\alpha = \left(\frac{\dfrac{\eta}{2}}{1+\left(\dfrac{\eta}{2}\right)^2}\, E_\alpha - \frac{\left(\dfrac{\eta}{2}\right)^2}{2\left(1+\left(\dfrac{\eta}{2}\right)^2\right)}\, \mathbf{g}^T\gamma^{-1}\mathbf{g} \right) \det\left(\frac{1}{2}\,\gamma\right).$$

Очевидно, $\det V_\alpha > 0$ эквивалентно

$$E_\alpha > \frac{\eta}{4}\mathbf{g}^T\gamma^{-1}\mathbf{g} = \frac{\eta}{4}\sum_{j=1}^{K}\frac{g_j^2}{\gamma_j}.$$

Для проверки неотрицательной определенности, вообще говоря, нужно проверить неотрицательность всех диагональных миноров [27, гл. 10, § 4]. Однако все миноры, содержащие элемент $(\eta/2)(1+(\eta/2)^2)E_\alpha$, будут иметь вид, аналогичный V_α, но вместо $\mathbf{g}$ в них будут векторы, содержащие все возможные подмножества элементов вектора $\mathbf{g}$. Поэтому если выполнено

$$E_\alpha \geqslant \frac{\eta}{4}\sum_{j=1}^{K}\frac{g_j^2}{\gamma_j},$$

то неравенства для остальных миноров выполнены автоматически в силу положительности g_j^2/γ_j. Данное выражение (критерий возможности марковского расширения) можно переписать в матричном виде

$$H_S^{(r)} \geqslant \left(\frac{\eta}{4} \sum_{j=1}^{K} \frac{g_j^2}{\gamma_j} \right) I_N,$$

что является обобщением условия наличия марковского расширения (15), полученного ранее в случае $G_c(t) = 0$. Физически это соответствует тому, что энергии перехода в возбужденные уровни должны быть больше суммы контрчлена, который пропорционален частоте обрезания, и члена, пропорционального сумме максимумов лоренцевских пиков.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе для модели, описанной в разд. 1, была получена точная динамика редуцированной матрицы плотности, выразившаяся в терминах решения уравнения с неэрмитовым гамильтонианом. Были рассмотрены случаи, когда спектральная плотность имеет вид комбинации лоренцевских пиков, а также когда присутствует омический вклад в спектральной плотности. Были получены условия, когда редуцированная динамика может быть расширена до марковской.

В качестве возможного направления дальнейших исследований нам кажется интересным попытаться получить точную немарковскую динамику, описанную в данной статье как предел приближенной динамики более общего вида, подобно тому, как марковские уравнения возникают в пределе Боголюбова – Ван Гофа [2, разд. 1.8].

Благодарности. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 17-71-20154).

Автор выражает глубокую благодарность И. В. Воловичу, С. В. Козыреву, А. И. Михайлову и А. С. Трушечкину за плодотворное обсуждение вопросов, рассматриваемых в статье.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Крылов Н. М., Боголюбов Н. Н.* Об уравнениях Фоккера–Планка, получаемых в теории возмущений с помощью метода, основанного на спектральных свойствах гамильтониана возмущений // *Боголюбов Н. Н.* Избранные труды в 3 т. Т. 2 / Под ред. Ю. А. Митропольского. Киев: Наук. думка, 1970. С. 5–76.
2. *Accardi L., Lu Y. G., Volovich I.* Quantum Theory and Its Stochastic Limit. Berlin: Springer, 2002.

3. *Gorini V., Kossakowski A., Sudarshan E. C. G.* Completely Positive Dynamical Semigroups of N-Level Systems // J. Math. Phys. 1976. V. 17, No. 5. P. 821–825.
4. *Lindblad G.* On the Generators of Quantum Dynamical Semigroups // Commun. Math. Phys. 1976. V. 48, No. 2. P. 119–130.
5. *Breuer H. P., Kappler B., Petruccione F.* Stochastic Wave-Function Method for Non-Markovian Quantum Master Equations // Phys. Rev. A. 1999. V. 59, No. 2. P. 1633.
6. *Breuer H. P.* Non-Markovian Generalization of the Lindblad Theory of Open Quantum Systems // Phys. Rev. A. 2007. V. 75, No. 2. P. 022103.
7. *Kossakowski A., Rebolledo R.* On Non-Markovian Time Evolution in Open Quantum Systems // Open Systems and Information Dynamics. 2007. V. 14, No. 3. P. 265–274.
8. *Chruscinski D., Kossakowski A.* Non-Markovian Quantum Dynamics: Local versus Nonlocal // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 104, No. 7. P. 070406.
9. *Singh N., Brumer P.* Efficient Computational Approach to the Non-Markovian Second Order Quantum Master Equation: Electronic Energy Transfer in Model Photosynthetic Systems // Mol. Phys. 2012. V. 110, No. 15–16. P. 1815–1828.
10. *Tang N., Xu T.-T., Zeng H.-S.* Comparison between Non-Markovian Dynamics with and without Rotating Wave Approximation // Chin. Phys. B. 2013. V. 22, No. 3. P. 030304.
11. *Luchnikov I. A., Vintskevich S. V., Ouerdane H., Filippov S. N.* Simulation Complexity of Open Quantum Dynamics: Connection with Tensor Networks // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122, No. 16.
12. *Strathearn A. et al.* Efficient Non-Markovian Quantum Dynamics Using Time-Evolving Matrix Product Operators // Nature Commun. 2018. V. 9, No. 1. P. 3322.
13. *Теретёнков А. Е.* Метод псевдомод и вибронные немарковские эффекты в светособирающих комплексах // Тр. МИАН. 2019. Т. 306. С. 258–272.
14. *Teretenkov A. E.* Non-Markovian Evolution of Multi-Level System Interacting with Several Reservoirs. Exact and Approximate // Lobachevskii J. Math. 2019. V. 40, No. 10. P. 1587–1605.
15. *Friedrichs K. O.* On the Perturbation of Continuous Spectra // Commun. Pure Appl. Math. 1948. V. 1, No. 4. P. 361–406.
16. *Garraway B. M., Knight P. L.* Cavity Modified Quantum Beats // Phys. Rev. A. 1996. V. 54, No. 4. P. 3592.
17. *Garraway B. M.* Nonperturbative Decay of an Atomic System in a Cavity // Phys. Rev. A. 1997. V. 55, No. 3. P. 2290.
18. *Garraway B. M.* Decay of an Atom Coupled Strongly to a Reservoir // Ibid. No. 6. P. 4636.
19. *Trushechkin A. S., Volovich I. V.* Perturbative Treatment of Inter-Site Couplings in the Local Description of Open Quantum Networks // Europhys. Lett. 2016. V. 113, No. 3. P. 30005.
20. *Chruscinski D., Pascazio S.* A Brief History of the GKLS Equation. arXiv:1710.05993. 2017.
21. *Kozyrev S. V. et al.* Flows in Non-Equilibrium Quantum Systems and Quantum Photosynthesis // Inf. Dim. Anal., Quant. Prob. and Rel. Top. 2017. V. 20, No. 4. P. 1750021.

22. *Бройер Х. П., Петруччионе Ф.* Теория открытых квантовых систем. М.; Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ин-т компьютер. исслед. 2010.
23. *Engel G. S. et al.* Evidence for Wavelike Energy Transfer through Quantum Coherence in Photosynthetic Systems // Nature. 2007. V. 446, No. 7137. P. 782.
24. *Lee H., Cheng Y. C., Fleming G. R.* Coherence Dynamics in Photosynthesis: Protein Protection of Excitonic Coherence // Science. 2007. V. 316, No. 5830. P. 1462–1465.
25. *Mohseni M. et al.* Environment-Assisted Quantum Walks in Photosynthetic Energy Transfer // J. Chem. Phys. 2008. V. 129, No. 17. P. 11B603.
26. *Plenio M. B., Huelga S. F.* Dephasing-Assisted Transport: Quantum Networks and Biomolecules // New J. Phys. 2008. V. 10, No. 11. P. 113019.
27. *Гантмахер Ф. Р.* Теория матриц. 5-е изд. М.: Физматлит, 2004.