

## ¿LA DINÁMICA DE CANALES DISIPATIVOS LORENTZIANOS ES NO MARKOVIANA?

### IS THE DYNAMICS OF DISSIPATIVE LORENTZIAN CHANNELS NON MARKOVIAN?

**Karen M. Fonseca y Rafael R. Rey-González**

Grupo de Óptica e Información Cuántica, Departamento de Física, Facultad de Ciencias,  
Universidad Nacional de Colombia - Sede Bogotá, Carrera 30 Calle 45-03, CP 111321,  
Bogotá, Colombia.

(Recibido: 11/2013. Aceptado: 12/2013)

#### **Resumen**

Consideramos la dinámica disipativa de un excitón en un reservorio Lorentziano, relevante en la descripción de algunos complejos fotosintéticos. Aunque esta dinámica se ha descrito con frecuencia como no Markoviana, mostramos que esta puede ser una caracterización equivocada. Describimos un enfoque en el cual es posible decidir si la dinámica es o no Markoviana y lo aplicamos al reservorio Lorentziano.

**Palabras clave:** Canal Lorentziano, Dinámica no Markoviana, Mecánica Cuántica de Sistemas Abiertos.

#### **Abstract**

We consider the dissipative dynamics of an exciton in a Lorentzian reservoir, relevant in the description of some photosynthetic complexes. Although this dynamics have been frequently described as non-Markovian, we show that this characterization may be misleading. We describe an approach within which it is possible to decide if this dynamics is or not Markovian. We apply this approach to the Lorentzian reservoir.

**Keywords:** Lorentzian Channel, Non-Markovian Dynamics, Open Systems Quantum Mechanics.

## Introducción

Los sistemas cuánticos abiertos presentan fenómenos característicos, tales como la disipación, la relajación y la descoherencia. Para incorporar el medio externo se puede recurrir a artificios tales como la modificación *ad hoc* de las reglas de cuantización (duplicación del número de grados de libertad y complejización [1]), el uso de Hamiltonianos con dependencias del tiempo particulares que simulan la interacción con el ambiente [2, 3] o de ecuaciones de Schrödinger no lineales [4], la formulación de ecuaciones cuánticas de Langevin [5] o el uso de ecuaciones fenomenológicas, tales como las ecuaciones maestras con la forma de Lindblad [6]. Los efectos deletéreos del ambiente también pueden ser descritos mediante sistemas Hamiltonianos con coeficientes que son variables clásicas aleatorias [7]. Otra manera común de incorporar efectos disipativos en mecánica cuántica, supone partir de un sistema conservativo. Se trata de hacer una descripción Hamiltoniana del sistema de interés y de los grados de libertad externos, teniendo en cuenta la interacción entre estos y el sistema de interés, tales como en el modelo de Caldeira-Leggett [8, 9]. El resultado final es una ecuación integrodiferencial solamente para el estado del sistema de interés, la cual se conoce como ecuación maestra.

Se suele decir que las «ecuaciones maestras (generalizadas)» son Markovianas si no involucran una integración temporal explícita, y que son no Markovianas en caso contrario. Hace unos cincuenta años se demostró que estas denominaciones no coinciden con las definiciones matemáticas [10]. En los últimos años, se reavivó el interés en la discusión de efectos no Markovianos, debido a que se han encontrado sistemas y procesos cuánticos en los cuales estos efectos son importantes (en particular en sistemas biológicos). Tradicionalmente, el término ecuaciones maestras no Markovianas se ha reservado para ecuaciones de la forma  $d\hat{\rho}(t)/dt = \int_0^t d\tau \mathcal{K}(t - \tau)\hat{\rho}(\tau)$ , en donde  $\hat{\rho}$  es el operador densidad del sistema descrito. Sin embargo, estas ecuaciones pueden escribirse no solamente en forma local en el tiempo  $d\hat{\rho}(t)/dt = \mathcal{L}(t)\hat{\rho}(t)$  [11, 12], sino como

ecuaciones locales en el tiempo con forma generalizada de Lindblad (al menos si son exactas)

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left[ \hat{H}(t), \hat{\rho}(t) \right] \\ &+ \sum_i \gamma_i(t) \left( 2 \hat{L}_i(t) \hat{\rho}(t) \hat{L}_i^\dagger(t) - \hat{L}_i^\dagger(t) \hat{L}_i(t) \hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t) \hat{L}_i^\dagger(t) \hat{L}_i(t) \right), \end{aligned} \quad (1)$$

en donde tanto los operadores de Lindblad  $\hat{L}_i(t)$  como las tasas de decaimiento  $\gamma_i(t)$ , dependen del tiempo [13, 14]. Una vez que una ecuación maestra haya sido escrita en la forma (1), podemos decir que una ecuación maestra es no Markoviana si las tasas de decaimiento se tornan negativas en un intervalo de tiempo. Vale la pena mencionar que algunos autores aún usan la expresión ecuación maestra no Markoviana para referirse a ecuaciones con tasas de disipación dependientes del tiempo. Por ejemplo, la referencia [15] usa esta expresión en un modelo en el que la tasa de disipación nunca se torna negativa. Es decir, el modelo de la referencia [15] es Markoviano, con tasa de disipación dependiente del tiempo.

En modelos de fotosíntesis se ha dicho que la dinámica es Markoviana. En este trabajo vamos a examinar la dinámica disipativa en un modelo de baño estructurado, un modelo de juguete correspondiente a la proteína PE545 (ver Figura 1, izquierda), y determinar si la dinámica es realmente no Markoviana. En esta proteína se han observado batimientos excitónicos coherentes [16]. Aunque los cromóforos de esta proteína están relativamente alejados ( $\sim 20\text{\AA}$ ) de modo que la mayoría de acoplamientos electrónicos son pequeños, esta antena funciona eficientemente debido al acoplamiento cuasi-resonante entre excitones y vibraciones. Como estas vibraciones están acopladas a grados de libertad externos, en los estudios espectroscópicos aparecen como Lorentzianas ensanchadas (ver Figura 1, derecha). De hecho, efectivamente, estas vibraciones constituyen grados de libertad que interaccionan con los excitones. Así, el reservorio efectivo es estructurado. El modelo completo fue estudiado en la referencia [17]. En este trabajo consideramos un modelo de juguete

que contiene un único excitón acoplado resonantemente a un único canal Lorentziano e investigamos si la dinámica subyacente es Markoviana.

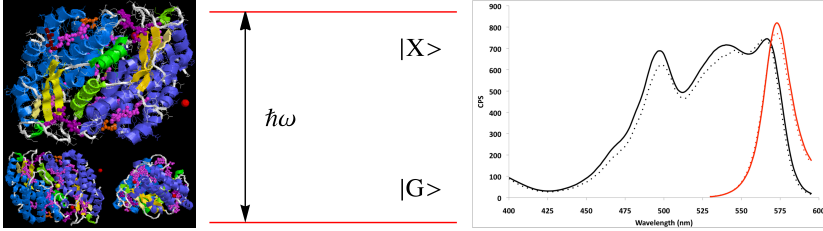


FIGURA 1. Izquierda: la estructura cristalina de la ficoeritrina PE545 [18]. Medio: Diagrama de niveles de un excitón. Derecha: Espectros de fotoluminiscencia de la PE545: excitación (negro) y emisión (rojo) (Wikimedia Commons).

## Canal de ruido Lorentziano

Consideremos un sistema de dos niveles,  $|G\rangle$  y  $|X\rangle$  (cuyo diagrama de niveles aparece en la Figura 1, medio), que interacciona con un conjunto de osciladores a través de un hamiltoniano bilineal. El Hamiltoniano del sistema más su ambiente es, entonces,

$$H = \hbar\omega |X\rangle \langle X| + \sum_n \hbar\omega_n a_n^\dagger a_n \quad (2)$$

$$+ \hbar \sum_n (g_n a_n^\dagger |G\rangle \langle X| + g_n^* a_n |X\rangle \langle G|),$$

en donde  $\hbar\omega$  es la diferencia de energía entre los dos estados del sistema,  $\omega_n$  es la frecuencia del  $n$ -ésimo grado de libertad del ambiente,  $a_n$  ( $a_n^\dagger$ ) es el operador de destrucción (creación) correspondiente al mismo grado de libertad y  $g_n$  es la constante de acoplamiento de tal grado de libertad con el sistema de dos niveles. Adicionalmente, vamos a suponer que el estado inicial del sistema y su ambiente es factorizado, es decir, es de la forma  $|\Psi(t=0)\rangle = (\alpha |G\rangle + \beta |X\rangle) \otimes |\mathbf{0}\rangle$ . Aquí  $t=0$  es un tiempo que se escoge como el tiempo inicial,  $\alpha$  y  $\beta$  son constantes, y  $|\mathbf{0}\rangle$  es una abreviación del estado  $\prod_n |0\rangle_n$ . Veamos que el estado

$|G, \mathbf{0}\rangle$  es autoestado del hamiltoniano  $H$ , con autovalor 0. Por otro lado, el hamiltoniano  $H$  conserva el número de excitaciones  $N = |X\rangle\langle X| + \sum_n a_n^\dagger a_n$ . Así, en cualquier instante posterior de tiempo, el estado del sistema y de su ambiente es

$$|\Psi(t)\rangle = \alpha |G, \mathbf{0}\rangle + \beta \left( c_0(t) |X, \mathbf{0}\rangle + \sum_n c_n(t) |G, 1_n\rangle \right), \quad (3)$$

en donde los coeficientes dependientes del tiempo  $c_0(t)$  y  $c_n(t)$  satisfacen las condiciones iniciales  $c_0(0) = 1$  y  $c_n(0) = 0$ . La notación  $|1_n\rangle$  es una abreviación para el estado  $\prod_{m \neq n} |0\rangle_m \otimes |1\rangle_n$ .

Empleando la ecuación de Schrödinger encontramos que los coeficientes  $c$  satisfacen el sistema de ecuaciones

$$\dot{c}_0(t) = -i\omega c_0(t) - i \sum_n g_n^* c_n(t), \quad (4)$$

$$\dot{c}_n(t) = -i\omega_n c_n(t) - i g_n c_0(t). \quad (5)$$

Empleando la transformada de Laplace obtenemos un sistema algebraico de ecuaciones, del cual podemos despejar la transformada de cada  $c_n(t)$ . Después de usar estas expresiones en la ecuación de la transformada de  $c_0(t)$ , y tomando la transformada inversa de Laplace encontramos que  $c_0(t)$  satisface la ecuación integrodiferencial

$$\dot{c}_0(t) + i\omega c_0(t) + \int_0^t d\tau \sum_n |g_n|^2 e^{-i\omega_n(t-\tau)} c_0(\tau) = 0. \quad (6)$$

Vamos a considerar un caso en el cual el ambiente es estructurado, del tipo usado en la descripción del ambiente asociado a las vibraciones de la proteína PE545, involucrada en la recolección de luz en algas [17]. En este caso, el núcleo de la ecuación (6) queda

$$K(t, \tau) = \sum_n |g_n|^2 e^{-i\omega_n(t-\tau)} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\gamma_0}{2\pi} \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + (\omega - \omega_0)^2} e^{-i\omega(t-\tau)},$$

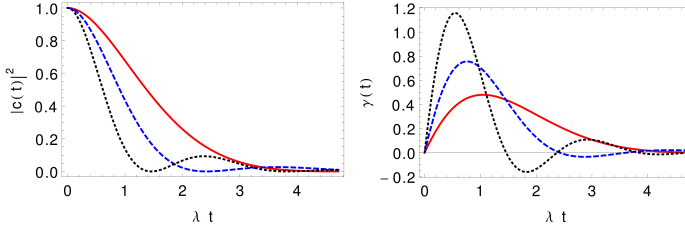


FIGURA 2. Cuadrado de la magnitud del coeficiente  $c(t)$  (izquierda) y tasa de disipación  $\gamma(t)$  (derecha) empleando  $\gamma_0 = \lambda$  (línea roja, sólida),  $\gamma_0 = 2\lambda$  (línea azul a trazos) y  $\gamma_0 = \lambda$  (línea punteada negra).

en donde  $\lambda$  y  $\gamma_0$  son medidas del ancho y de la altura de la Lorentziana. Resolviendo la ecuación integrodiferencial obtenemos

$$c_0(t) = \sqrt{\frac{2\gamma_0}{2\gamma_0 - \lambda}} e^{-\frac{\lambda t}{2} - i\omega_0 t} \sin\left(\frac{\sqrt{\lambda(2\gamma_0 - \lambda)}}{2} t + \phi_0\right), \quad (7)$$

en donde hemos supuesto que  $2\gamma_0 > \lambda$ . Aquí,  $\tan(\phi_0) = \sqrt{\frac{2\gamma_0 - \lambda}{\lambda}}$ .

A partir del estado total del sistema y el ambiente (3) podemos encontrar el operador densidad reducido para el sistema

$$\rho(t) = (1 - |\beta|^2 |c_0(t)|^2) |G\rangle \langle G| + \alpha \beta^* c_0^*(t) |G\rangle \langle X| + \alpha^* \beta c_0(t) |X\rangle \langle G| + |\beta|^2 |c_0(t)|^2 |X\rangle \langle X|. \quad (8)$$

Derivando el operador densidad con respecto al tiempo, encontramos la ecuación de movimiento para  $\rho$

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hbar\omega\sigma^\dagger\sigma, \rho] + \gamma(t) (2\sigma\rho\sigma^\dagger - \sigma^\dagger\sigma\rho - \rho\sigma^\dagger\sigma). \quad (9)$$

en donde  $\sigma = |G\rangle \langle X|$  y  $\gamma(t) = -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \ln |c_0(t)|^2$ . Como  $|c_0(t)|^2$  oscila (ver Figura 2),  $\gamma(t)$  adquiere valores negativos y es, por lo tanto, no Markoviana. Aunque esta ecuación se dedujo para estados iniciales puros, debido a su forma lineal también es válida para estados iniciales arbitrarios, puros o mezclados.

## Conclusiones

Estudiamos la dinámica disipativa de un excitón en un reservorio Lorentziano y encontramos que está descrita por la ecuación

maestra de Lindblad generalizada (9). Demostramos que canales Lorentzianos resonantes con espectros relativamente angostos (caracterizados por valores de  $\gamma_0$  mayores que  $\lambda$ ) corresponden a dinámicas no Markovianas, cuyas tasas de disipación se vuelven negativas (ver Figura 2).

## Referencias

- [1] H. Dekker, *Phys. Rep.* **80**, 1 (1981).
- [2] P. Caldirola, *Il Nuovo Cimento* **18**, 393 (1941).
- [3] E. Kanai, *Prog. Theor. Phys.* **3**, 440 (1948).
- [4] M. D. Kostin, *J. Chem. Phys.* **57**, 3589 (1972).
- [5] R. Benguria and M. Kac, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1 (1981).
- [6] G. Lindblad, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119 (1976).
- [7] K. M. F. Romero and R. L. Franco, *Phys. Scripta* **86**, 065004 (2012).
- [8] P. Ullersma, *Physica* **32**, 27 (1966).
- [9] A. Caldeira and A. Leggett, *Ann. Phys.* **149**, 374 (1983).
- [10] I. Oppenheim and K. E. Shuler, *Phys. Rev.* **138**, B1007 (1965).
- [11] E. Andersson, J. D. Cresser, and M. J. W. Hall, *J. Mod. Optic.* **54**, 1695 (2007).
- [12] D. Chruściński and A. Kossakowski, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 070406 (2010).
- [13] H.-P. Breuer, *Phys. Rev. A* **70**, 012106 (2004).
- [14] M. J. W. Hall, J. D. Cresser, L. Li, and E. Andersson, *Phys. Rev. A* **89**, 042120 (2014).
- [15] K. Fonseca-Romero, *Phys. Status Solidi B* **220**, 799 (2000).
- [16] E. Collini, C. Y. Wong, K. E. Wilk, P. M. G. Curmi, P. Brumer, and G. D. Scholes, *Nature* **463**, 644 (2010).
- [17] A. Kolli, E. J. O'Reilly, G. D. Scholes, and A. Olaya-Castro, *J. Chem. Phys.* **137**, 174109 (2012).
- [18] A. B. Doust, C. N. Marai, S. J. Harrop, K. E. Wilk, P. M. Curmi, and G. D. Scholes, *J. Mol. Biol.* **344**, 135 (2004).