

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Сибирский федеральный университет»

На правах рукописи



Мураев Павел Сергеевич

## **Транспорт бозе-частиц в одномерных периодических структурах**

Специальность 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук,  
старший научный сотрудник  
Коловский Андрей Радиевич

Красноярск — 2026

## Оглавление

	Стр.
<b>Введение</b> . . . . .	4
<b>Глава 1. Обзор литературы. Квантовый транспорт и теоретические подходы к задаче о транспорте</b> . . . . .	9
1.1 Квантовый транспорт ультрахолодных атомов . . . . .	10
1.2 Гранично-возбуждаемые открытые квантовые системы: общая концепция и математический аппарат . . . . .	14
1.3 Уравнение Линдблада и подходы к его решению . . . . .	16
1.4 Псевдоклассическое приближение . . . . .	22
1.5 Модель Бозе—Хаббарда в физике ультрахолодных атомов . . . . .	26
<b>Глава 2. Открытая цепочка Бозе—Хаббарда</b> . . . . .	28
2.1 Модель и основные уравнения . . . . .	28
2.2 Псевдоклассическое приближение . . . . .	30
2.3 Случай взаимодействующих и невзаимодействующих частиц . . . . .	32
2.4 Предел длинной цепочки . . . . .	36
2.5 Выводы по главе . . . . .	38
<b>Глава 3. Транспорт в ромбической цепочке</b> . . . . .	40
3.1 Описание системы . . . . .	41
3.2 Случай невзаимодействующих частиц . . . . .	42
3.3 Случай взаимодействующих частиц . . . . .	44
3.4 Выводы по главе . . . . .	47
<b>Глава 4. Одномерная цепочка с контактами</b> . . . . .	49
4.1 Модель системы с контактами . . . . .	49
4.2 Одночастичная матрица плотности . . . . .	51
4.2.1 Структура и динамика SPDM . . . . .	51
4.2.2 Обобщение на два контакта и вычисление тока . . . . .	53
4.3 Псевдоклассическое приближение . . . . .	53
4.3.1 Уравнение Фоккера-Планка и уравнения Ланжевена . . . . .	53

	Стр.
4.3.2 Анализ характера шума и влияние температуры . . . . .	54
4.4 Стационарный ток . . . . .	56
4.4.1 Зависимость тока от константы релаксации . . . . .	56
4.4.2 Зависимость тока от температуры . . . . .	58
4.4.3 Зависимость тока от плотности частиц . . . . .	60
4.5 Немарковское основное кинетическое уравнение . . . . .	61
4.6 Резонансное туннелирование . . . . .	63
4.6.1 Постановка задачи и условия резонанса . . . . .	63
4.6.2 Влияние межчастичного взаимодействия . . . . .	65
4.7 Выводы по главе . . . . .	67
<b>Глава 5. Открытая одномерная цепочка с сохраняющимся</b>	
<b>числом частиц . . . . .</b>	<b>68</b>
5.1 Модель . . . . .	69
5.1.1 Основные уравнения . . . . .	69
5.1.2 Режим линейного отклика . . . . .	70
5.2 Спектральные свойства стационарной матрицы плотности . . . . .	71
5.2.1 Анализ в базисе оператора тока . . . . .	71
5.2.2 Переход к квантовому хаосу . . . . .	72
5.2.3 Статистика спектра . . . . .	73
5.3 Стационарный ток и его зависимость от взаимодействия . . . . .	75
5.4 Фермионизация и локализация состояний . . . . .	77
5.5 Выводы по главе . . . . .	78
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>80</b>
<b>Список сокращений и условных обозначений . . . . .</b>	<b>83</b>
<b>Список литературы . . . . .</b>	<b>84</b>

## Введение

Исследование квантового транспорта частиц в низкоразмерных системах занимает центральное место в современной физике конденсированного состояния вещества и квантовой оптике. Решеточные модели, такие как модель Бозе—Хаббарда, являются ключевыми теоретическими моделями для изучения коллективных явлений — сверхтекучести, бозе-эйнштейновской конденсации и фазовых переходов [1]. Прогресс в экспериментах с ультрахолодными атомами в оптических решетках [2] позволил не только реализовать такие модели, но и управлять свойствами системы, такими как туннелирование, межчастичное взаимодействие и диссипация, с высокой точностью, открыв новые возможности для исследования неравновесной квантовой динамики. Однако некоторые фундаментальные вопросы о механизмах переноса в условиях сильных взаимодействий, декогеренции или диссипации остаются открытыми, требуя разработки новых теоретических подходов.

Для решения указанных проблем ключевым является анализ открытых квантовых систем. В отличие от замкнутых систем, они учитывают взаимодействие с окружением, что приводит к диссипации и установлению стационарных состояний [3]. Особый класс таких систем — *гранично-возбуждаемые системы* (англ. boundary-driven systems) [4] — предполагает, что резервуары подключены к краям системы, что в свою очередь приводит к появлению тока частиц. Моделирование таких систем часто опирается на основное кинетическое уравнение в форме Линдблада, также известное как уравнение Горини-Коссаковского-Сударшана-Линдблада, которое описывает диссипативную динамику через операторы релаксации [5; 6].

Развитие теории квантового транспорта тесно переплетается с активно развивающейся областью, называемой *атомтроникой*, — аналогом электроники, в котором носителями информации и тока выступают ультрахолодные атомы в оптических решетках [7; 8]. В таких системах управление атомными потоками, аналогичное управлению электронами в полупроводниках, требует глубокого понимания квантовых механизмов транспорта. Перспективным направлением является также использование нелинейных эффектов для создания логических элементов, чувствительных к изменению внешних параметров. Таким образом, изучение квантового транспорта в одномерных решетках не

только расширяет фундаментальные знания, но и закладывает основу для технологических прорывов инженерии квантовых систем.

**Целью** данной работы является теоретическое исследование квантового транспорта ультрахолодных бозе-атомов в одномерных дискретных системах — одномерных цепочках Бозе—Хаббарда, находящихся в контакте с резервуарами.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Исследовать стационарный ток в открытой одномерной цепочке Бозе—Хаббарда под влиянием межчастичного взаимодействия.
2. Исследовать квантовый транспорт в ромбической цепочке под действием синтетического магнитного поля, проанализировать интерференционные эффекты и изучить влияние межчастичного взаимодействия.
3. Разработать немарковскую модель открытой системы Бозе—Хаббарда с контактами, исследовать явление резонансного туннелирования бозонных частиц и проанализировать воздействие на него межчастичного взаимодействия.
4. Исследовать связь между статистическими свойствами спектра неравновесной матрицы плотности и режимами квантового транспорта.

#### **Научная новизна:**

1. Впервые в рамках псевдоклассического подхода проведено комплексное исследование перехода от баллистического к диффузионному транспорту в открытой цепочке Бозе—Хаббарда, обусловленного разрушением коллективных мод при включении межчастичного взаимодействия.
2. Впервые для открытой ромбической цепочки под действием синтетического магнитного поля систематически исследовано взаимное влияние интерференционных эффектов и межчастичного взаимодействия на транспорт, и показано, что взаимодействие разрушает интерференционную блокировку тока, переводя систему в диффузионный режим.
3. Впервые обнаружено и систематически исследовано явление резонансного туннелирования для бозонных носителей в немарковской модели с кольцевыми контактами и показано его разрушение под влиянием межчастичного взаимодействия.
4. Впервые выполнено исследование связи между квантовым хаосом и транспортом в открытой бозонной системе. Показано, что подавление стационарного тока при увеличении взаимодействия коррелирует

с переходом статистики спектра матрицы плотности от распределения Пуассона к распределению Вингнера-Дайсона.

**Практическая значимость** Результаты работы имеют практическую значимость для экспериментальной физики ультрахолодных атомов, мезоскопических систем, квантовой оптики и атомтроники. Полученные теоретические предсказания и построенные модели могут быть использованы для интерпретации и планирования экспериментов в области квантового транспорта в оптических решетках, фотонных кристаллах и сверхпроводящих цепях. В частности, результаты по управлению током с помощью синтетического магнитного поля и межчастичного взаимодействия, а также результаты по резонансному туннелированию, открывают пути для создания новых элементов квантовых устройств на основе бозонных систем.

**Методология и методы исследования.** В основе диссертации лежит решение основного кинетического уравнения в форме Линдблада. Это уравнение решалось численно и аналитически: в случае наличия взаимодействия — с использованием псевдоклассического приближения, основанного на усеченной функции Вигнера, а в случае отсутствия взаимодействия — сводилось к уравнению для одночастичной матрицы плотности. В главе 5 основное кинетическое уравнение решалось численно без использования приближений. В качестве численного метода использовался метод Рунге—Кутты четвертого порядка, реализованный в среде MATLAB.

#### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. В открытой цепочке Бозе—Хаббарда межчастичное взаимодействие вызывает кроссовер от баллистического к диффузионному режиму транспорта, который обусловлен разрушением коллективных мод.
2. В ромбической цепочке под действием магнитного поля межчастичное взаимодействие разрушает интерференционную блокировку транспорта при фазе Пайерлса  $\Phi = \pi$ , что приводит к появлению конечного тока в области параметров, в которой для невзаимодействующих частиц ток отсутствует.
3. В немарковской модели с контактами при низких температурах наблюдается резонансное туннелирование бозонных частиц. Вместе с тем межчастичное взаимодействие вызывает сдвиг и уширение резонансных пиков, вплоть до полного уничтожения резонансной картины.

4. Подавление тока через одномерную цепочку при увеличении межчастичного взаимодействия является следствием перехода от регулярной динамики к квантовому хаосу, что проявляется в изменении статистики спектра неравновесной матрицы плотности от распределения Пуассона к распределению Вигнера—Дайсона; в пределе сильного взаимодействия наблюдается фермионизация бозонов и восстановление регулярной динамики.

**Достоверность** полученных результатов обусловлена непротиворечивостью и обоснованностью используемых моделей, корректностью примененных приближений и методов, внутренней согласованностью результатов, полученных различными методами и физической интерпретируемостью полученных данных.

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались на международных и всероссийских конференциях: «Всероссийская научная конференция „Физика ультрахолодных атомов – 2020“» (г. Новосибирск, Россия, 2020 г.); «METANANO Summer School on Photonics of 2D materials» (г. Санкт-Петербург, Россия, 2021 г.); «Конкурс-конференция молодых учёных, аспирантов и студентов ФИЦ КНЦ СО РАН по секции „Физика“» (г. Красноярск, Россия, 2021, 2023 гг.); «17-я и 18-я Всероссийская научная конференция с международным участием „Физика ультрахолодных атомов“» (г. Новосибирск, Россия, 2023, 2024 гг.); «Dynamics Days Asia Pacific 13» (г. Киото, Япония, 2024 г.); «Long-term Workshop on Frontiers in Non-equilibrium Physics 2024» (г. Киото, Япония, 2024 г.); «International Workshop Quantum Computing, Complexity, and Control (QCCC25)» (г. Тэджон, Республика Корея, 2025 г.); «Всероссийская научная конференция с международным участием „Невская фотоника - 2025“» (г. Санкт-Петербург, 2025г.)

**Личный вклад.** Постановка задач и интерпретация полученных результатов выполнена совместно с научным руководителем д.ф.-м.н. А. Р. Коловским. Все представленные в диссертации оригинальные результаты получены лично автором либо при его непосредственном участии. Реализация алгоритмов расчета и интерпретация части результатов была осуществлена совместно с к.ф.-м.н. Д. Н. Максимовым и А. А. Бычек.

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 9 печатных изданиях, 4 из которых изданы в журналах, рекомендованных

ВАК, 4 — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 5 — в тезисах докладов.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, 5 глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 97 страниц, включая 25 рисунков. Список литературы содержит 145 наименований.



## Глава 1. Обзор литературы. Квантовый транспорт и теоретические подходы к задаче о транспорте

Проблема квантового транспорта частиц через периодические структуры возникла в первой половине XX столетия на ранних этапах становления квантовой механики. Первыми работами, связанными с квантовым транспортом, можно считать труды посвященные квантово-механическому описанию электронной структуры кристаллов, основное внимание в которых уделялось описанию электронов в условиях кристаллического поля. Одной из первых работ в данной области стал фундаментальный труд Ф. Блоха [9], в котором была сформулирована теорема о виде волновых функций электронов в периодическом потенциале и заложены основы зонной теории твёрдого тела. Хотя сам Блох не рассматривал динамику электронов во внешнем поле, из его теории позже следовало существование осцилляций Блоха — периодического движения электронного волнового пакета в постоянном электрическом поле. Первое последовательное предсказание данного эффекта и анализ его устойчивости были выполнены К. Ценером в 1934 году [10]. Осцилляции Блоха представляют собой чисто квантовое явление, поскольку в классическом случае частицы в постоянном поле испытывали бы неограниченное ускорение. Именно этот эффект стал прообразом для изучения квантового транспорта в периодических структурах. Модель сильной связи (tight-binding), формализованная Слэтером и Костером [11], предоставила математический аппарат для описания туннелирования между локализованными состояниями — базовый механизм транспорта в дискретных системах, таких как модели Хаббарда [12–14]. Теория квантового транспорта исследует перенос физических величин — энергии, заряда или частиц — в мезоскопических системах при низких температурах, где доминирующую роль играют квантовомеханические явления [15–17]. В таких условиях классическое описание носителей тока становится неприменимым, что требует строгого квантовомеханического формализма для анализа как стационарных, так и динамических режимов. Классическим примером служит электронный транспорт через наноструктуры, связывающие два электронных резервуара [18–20].

Квантовый транспорт в настоящее время является центральной темой в ряде передовых областей физики. В физике твёрдого тела его изучают на

примере электронного переноса в мезоскопических и наноструктурированных системах [15—17]. Аналогичные принципы находят применение в фотонике для управления световыми потоками в метаматериалах и оптических решётках [21—25]. Спинтроника расширяет область исследований, вовлекая спиновые степени свободы [26], а сверхпроводящие квантовые цепочки на основе транзмоннов позволяют исследовать коллективные квантовые явления и когерентный перенос энергии [27—29].

Особую роль играет физика ультрахолодных атомов, предлагающая почти идеально контролируемую систему для изучения квантового транспорта [4; 30]. Именно на ее основе сформировалось направление *атомтроники* [7; 8] — аналога электроники, роль носителей в которой играют электронейтральные атомы. Атомтроника открывает уникальные перспективы для создания программируемых квантовых симуляторов, высокочувствительных интерферометров и прототипов квантовых логических устройств, объединяя идеи из других разделов физики.

Исследования квантового транспорта тесно связаны с быстро развивающимся направлением диссипативной инженерии квантовых систем [31—33]. В данной области исследуется целенаправленное воздействие на систему со стороны внешнего окружения, позволяющее стабилизировать и создавать сложные многочастичные состояния, недостижимые в условиях термодинамического равновесия. Возникающие при этом неравновесные стационарные состояния могут обладать уникальными свойствами, демонстрировать экзотические фазовые переходы и проявлять топологический порядок [34—36]. Особый интерес представляют тёмные состояния (dark states) [31; 32; 37] — чистые состояния системы, остающиеся неизменными под действием диссипации. Перспектива использования таких состояний для задач хранения, обработки и передачи квантовой информации [31; 38; 39] делает их важным объектом современных исследований.

## 1.1 Квантовый транспорт ультрахолодных атомов

Исследование квантового транспорта ультрахолодных атомов, как направление современной физики, объединяет достижения в области управляемых

квантовых систем и фундаментальных явлений многочастичной динамики [40]. Уникальные свойства ультрахолодных атомов, охлаждённых до температур в несколько нанокельвинов, делают их идеальной платформой для моделирования сложных квантовых систем и проверки теоретических предсказаний квантовой механики и физики конденсированного состояния вещества.

Ключевым этапом в работе с ультрахолодными атомами является их охлаждение до температур, близких к абсолютному нулю. Для этого используются комбинированные методы лазерного и испарительного охлаждения [41—43]. Лазерное охлаждение позволяет замедлить атомы за счёт передачи импульса фотонов, а испарительное охлаждение удаляет наиболее горячие частицы, снижая общую температуру системы. Эти технологии, отмеченные в 1997 году Нобелевской премией [44—46], позволяют охлаждать атомные газы до ультранизких температур, при которых возникают макроскопические квантовые явления: бозе-эйнштейновские конденсаты и вырожденные ферми-газы.

Изучение квантового транспорта в последние годы получило значительный импульс благодаря экспериментальным методам, основанным на управляемых системах с ультрахолодными атомами. Ключевую роль здесь играют оптические решётки и дипольные ловушки, позволяющие создавать точно контролируемые потенциалы для моделирования сложных квантовых систем [43]. Например, в работе [47] исследовалась динамика расширения облака ультрахолодного газа ферми-атомов в однородной оптической решётке, моделирующей гамильтониан Хаббарда. В работе [48] описывается течение сверхтекучего ферми-газа через мезоскопический канал, соединяющий два атомных резервуара. В экспериментах [49; 50] изучались сверхтекучие токи БЭК в кольцевой оптической ловушке с вращающимся слабым звеном (weak link). Эти эксперименты показали наличие гистерезиса в исследуемой системе. В [51] описывается экспериментальная реализация транспортировки облака атомов на 28 см с использованием линз с регулируемым фокусом. При этом авторы сообщают о минимальных потерях частиц и нагреве, а также об управлении размером облака за счёт изменения параметров ловушки. Работа [52] описывает эксперименты по созданию элементов интегральных схем для управления когерентными волнами материи с использованием БЭК. В работе авторы демонстрируют ключевые элементы, такие как Y-разветвители, волноводы и волноводы с изгибом, созданные с помощью динамических оптических потенциалов. Также можно выделить серию работ выполненных в Кайзерслаутерне

под руководством профессора Х. Отта, посвященных исследованию транспорта БЭК в одномерной цепочке с локализованным диссипативным потенциалом, создаваемым сканирующим электронным лучом, выбивающим атомы из ловушки [53—57]. В данной экспериментальной платформе одномерная цепочка квази-двумерных конденсатов  $^{87}\text{Rb}$  подвергается воздействию управляемой диссипации в центральном узле, в то время как соседние узлы действуют как резервуары с фиксированным химическим потенциалом. Эти исследования позволили наблюдать формирование неравновесных стационарных состояний и изучать динамику одномерной цепочки конденсатов в системе с локализованной диссипацией, что предоставляет ценнейший экспериментальный контекст для теоретического моделирования гранично-возбуждаемых бозонных систем. Все приведенные выше эксперименты используют преимущества систем с ультрахолодными атомами [58], такие как:

- Достижение экстремально низких температур порядка нанокельвина [44—46];
- Гибкость оптических потенциалов для управления пространственными измерениями и создания произвольных геометрий [43; 59; 60];
- Точная настройка межатомных взаимодействий через резонансы Фешбаха [61; 62];
- Точная настройка туннелирования между узлами [63; 64];
- Когерентные временные масштабы, значительно превышающие аналоги в твёрдотельных системах, а именно миллисекунды вместо наносекунд [65];
- Возможность проводить высокоточные измерения в подобных экспериментах. В отличие от твердотельных систем и электронного транспорта, оптические эксперименты с ультрахолодными атомами позволяют визуализировать распределение атомов через метод абсорбционного изображения, как, например, в работах [66; 67], вплоть до разрешения на уровне отдельных узлов [68—70], что обеспечивает точное измерение числа частиц в пространственно локализованных модах;
- Возможность изучения неравновесной динамики и релаксации к стационарному состоянию в чисто квантовых системах без неконтролируемых примесей, характерных для твердотельных систем [4].

Особую значимость в контексте данной диссертации представляют пионерские работы группы профессора Т. Эслингера по исследованию квантового

транспорта в ультрахолодных ферми-газах [37; 66; 67; 71—76], выполненные в Швейцарской высшей технической школе Цюриха (ETH Zurich). В основополагающем эксперименте [71] была реализована модель, которую можно интерпретировать как гранично-возбуждаемую систему, основанную на двух резервуарах фермионов с различными эффективными химическими потенциалами, соединённых управляемым мезоскопическим каналом (Рисунок 1.1) — архитектура, где транспорт частиц индуцируется исключительно начальным градиентом плотности. Последующие работы [66; 67] расширили эту платформу, продемонстрировав, что строгое сохранение энергии и числа частиц в полной системе не препятствует установлению квазиравновесия через перераспределение частиц между подсистемами — процесс, аналогичный термализации в открытых квантовых системах [72]. Наиболее важной для данной диссертации является работа [67], в которой в одномерный канал между резервуарами была спроецирована управляемая оптическая решётка, рисунок 1.1(б). Этот эксперимент на ферми-атомах  $^6\text{Li}$  продемонстрировал ключевые явления, актуальные и для бозонного случая: управляемый переход от баллистического к изолирующему транспорту при соизмеримом заполнении решётки, чёткое проявление запрещённой зоны и возможность контроля проводимости с помощью «затворного» потенциала. Несмотря на то, что сильнокоррелированные состояния, наблюдавшиеся в [67], такие как жидкость Лютера-Эмери, специфичны для фермионов, сама экспериментальная платформа, методология и результаты данной работы имеют принципиальное значение для исследований квантового транспорта в целом, включая системы бозе-частиц, изучаемые в настоящей диссертации. В последующих работах группы, например, в [75] выявлено обращение термоЭДС под влиянием взаимодействий, а в работе [73] был реализован аналог спинтронного устройства на ультрахолодных атомах  $^6\text{Li}$ . В недавних работах группы профессора Т. Эслингера, посвящённых необратимому транспорту энтропии в сверхтекучих ферми-газах [76] и изучению тёмных состояний в режиме сильного взаимодействия [37], исследуется транспорт в ферми-системах с акцентом на роль квантовых эффектов в необратимых процессах.

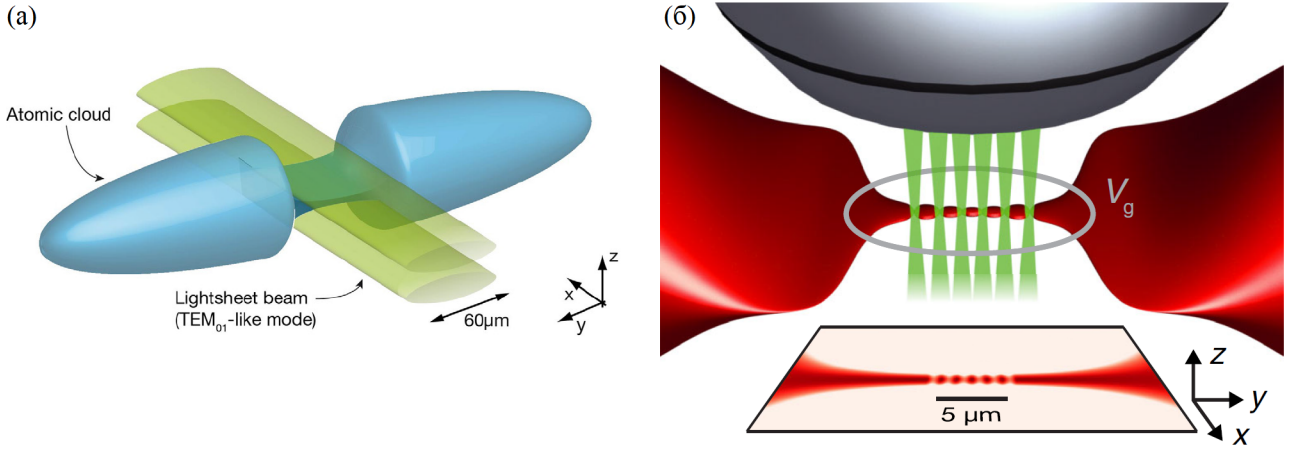


Рисунок 1.1 — Схематическое изображение экспериментальной установки в ETH Zurich: (а) облако ультрахолодных атомов, разделенное на два резервуара с помощью световых полей. Канал между резервуарами может быть квазиодномерным [67; 73; 74] или квазидвумерным [66; 71; 72]; (б) наложение решёточной структуры на одномерный канал с помощью микроскопа высокого разрешения [67]. Изображения взяты из работ [66] и [67].

## 1.2 Гранично-возбуждаемые открытые квантовые системы: общая концепция и математический аппарат

Основным предметом данной диссертации является квантовый транспорт бозонов в (квази)одномерных системах, связанных на своих краях с резервуарами частиц. Следуя [4], будем называть эти системы — *гранично-возбуждаемым системам* (boundary driven systems). Резервуары в таких задачах поддерживаются в различных термодинамических состояниях, отличающихся температурой, химическим потенциалом либо плотностью частиц, что индуцирует стационарные потоки частиц через систему. Возникающее неравновесное стационарное состояние (non-equilibrium steady-state) характеризуется нетривиальной пространственной корреляцией и фундаментальными транспортными режимами. В зависимости от длины цепочки  $L$ , часто оказывается, что ток частиц  $I$  подчиняется алгебраической зависимости  $I \sim L^{-\alpha}$  [4]:

- Баллистический транспорт ( $\alpha = 0$ );
- Диффузионный транспорт ( $\alpha = 1$ , закон Фурье);
- Суб-/супердиффузионный транспорт ( $0 < \alpha < 1$  и  $\alpha > 1$ );

- Изоляционное поведение. В пределе  $\alpha \rightarrow \infty$  ток стремится к нулю, что означает, что система является изолятором. В этом случае ток затухает быстрее, чем алгебраически, в зависимости от размера системы, например,  $I \sim e^{-L/\xi}$ , где  $\xi$  обозначает длину локализации.

Математической основой описания служит теория открытых квантовых систем. Полная динамика системы  $S$  и резервуаров  $B$  описывается уравнением Ливилля-фон Неймана:

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{R}}_{tot}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}_{tot}, \hat{\mathcal{R}}_{tot}], \quad \hat{\mathcal{H}}_{tot} = \hat{\mathcal{H}}_S + \hat{\mathcal{H}}_B + \hat{\mathcal{H}}_{int}, \quad (1.1)$$

где  $\hat{\mathcal{R}}_{tot}$  - матрица плотности системы и резервуаров,  $\hat{\mathcal{H}}_S$ ,  $\hat{\mathcal{H}}_B$  и  $\hat{\mathcal{H}}_{int}$  - гамильтонианы системы, резервуаров и их взаимодействия,  $\hbar$  - приведенная постоянная Планка (везде далее будем работать в системе единиц где  $\hbar = 1$ ), а квадратные скобки обозначают коммутатор.

Начальные условия обычно берутся такими, что  $S$  и  $B$  не коррелируют; то есть начальное состояние можно представить как  $\hat{\mathcal{R}}_{tot}(0) = \hat{\mathcal{R}}_S(0) \otimes \hat{\mathcal{R}}_B(0)$ . Тогда состояние системы в момент времени  $t$  равно

$$\hat{\mathcal{R}}_{tot}(t) = \hat{U}(t) \hat{\mathcal{R}}_{tot}(0) \hat{U}^\dagger(t), \quad \hat{U}(t) = e^{-i\hat{\mathcal{H}}_{tot}t}. \quad (1.2)$$

Основная цель в открытых квантовых системах — предсказать эволюцию приведенной (редуцированной) матрицы плотности системы  $\hat{\mathcal{R}}_S(t) = \text{Tr}_B [\hat{\mathcal{R}}_{tot}(t)]$ , где  $\text{Tr}_B[\dots]$  обозначает частичный след по степеням свободы резервуаров. Это можно сделать на уровне унитарного преобразования (1.2) или дифференциального уравнения (1.1). Первое приводит к так называемому представлению Крауса, а второе — к основному кинетическому уравнению на матрицу плотности.

Рассматривая отображение (1.2), можно показать, что эволюция редуцированной матрицы плотности произвольной открытой квантовой системы может быть представлена в виде [77]:

$$\hat{\mathcal{R}}_S(t) = \sum_{\alpha} \hat{K}_{\alpha,t} \hat{\mathcal{R}}_S(0) \hat{K}_{\alpha,t}^\dagger, \quad (1.3)$$

где  $\hat{K}_{\alpha,t}$  — зависящие от времени операторы (операторы Крауса), удовлетворяющие условию  $\sum_{\alpha} \hat{K}_{\alpha,t}^\dagger \hat{K}_{\alpha,t} = \mathbb{1}$ . Для любого набора таких операторов  $\hat{K}_{\alpha}$  отображение (1.3) является вполне положительным и сохраняющим след. Это

гарантирует, что оно отображает матрицы плотности в матрицы плотности, а именно сохраняет эрмитовость, нормировку и положительную определённость, в том числе при расширении гильбертова пространства [78].

На практике представление Крауса может оказаться неудобным, и для описания эволюции  $\hat{\mathcal{R}}_S(t)$  предпочтительным является дифференциальное уравнение, в общем случае имеющее вид [79; 80]:

$$\frac{d\hat{\mathcal{R}}_S}{dt} = \int_0^t dt' \mathcal{K}_{t-t'} [\hat{\mathcal{R}}_S(t')], \quad (1.4)$$

где  $\mathcal{K}_{t-t'}$  — линейный супероператор, называемый ядром памяти. В силу линейности (1.3) это уравнение также линейно по  $\hat{\mathcal{R}}_S$ . Однако оно, как правило, нелокально во времени, то есть скорость изменения редуцированной матрицы плотности  $\hat{\mathcal{R}}_S$  в момент  $t$  зависит от её значений в предшествующие моменты  $t' < t$  — что является проявлением *немарковости*.

Уравнение (1.4) обычно сложно вывести и решить аналитически. Поэтому часто используют более простые локальные во времени уравнения вида [3; 4]:

$$\frac{d\hat{\mathcal{R}}_S}{dt} = -i[\hat{\mathcal{H}}_S, \hat{\mathcal{R}}_S] + \mathcal{D}(\hat{\mathcal{R}}_S), \quad (1.5)$$

которые называют квантовыми основными кинетическими уравнениями. Член  $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{R}}_S)$ , называемый диссипатором, представляет собой линейный супероператор, описывающий влияние резервуара(ов). Конкретный вид  $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{R}}_S)$  определяется деталями модели, например, в параграфе 1.3 описана наиболее известная форма диссипатора — форма Линдблада. Это подчеркивает важность микроскопического вывода, в котором  $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{R}}_S)$  получается из физически обоснованного описания взаимодействия системы с резервуарами. Микроскопический вывод остается и на сегодняшний день важной и нетривиальной задачей привлекающей внимание современных исследователей [58].

### 1.3 Уравнение Линдблада и подходы к его решению

Предположим, что нас интересует задача описания временной эволюции открытой квантовой системы  $S$ , находящейся в контакте с макроскопическим резервуаром  $B$ . Строгое микроскопическое рассмотрение динамики такой



системы требует решения уравнения Шрёдингера в полном гильбертовом пространстве  $S+B$  с последующим усреднением по степеням свободы резервуара. В более общей формулировке данная задача еще более усложняется: вместо волновых функций возникает необходимость решения уравнения Лиувилля-фон Неймана (1.1) для полной матрицы плотности  $\hat{\mathcal{R}}_{tot}(t)$ . Практическая реализация подобного подхода сталкивается с принципиальными вычислительными трудностями, обусловленными экспоненциальным ростом размерности гильбертова пространства при увеличении числа степеней свободы резервуара.

Эта проблема мотивирует разработку формализма, позволяющего получить замкнутое уравнение движения исключительно для редуцированной матрицы плотности системы  $\hat{\mathcal{R}}_S(t) = \text{Tr}_B[\hat{\mathcal{R}}_{tot}(t)]$ . Одним из ключевых результатов в данной области стал вывод квантового марковского кинетического уравнения, известного как уравнение Линдблада (или Горини-Коссаковского-Сударшана-Линдблада). Оно было независимо получено в 1976 году Витторио Горини, Анжеем Коссаковским и Джорджем Сударшаном [6], а также Йёраном Линдбладом [5]. Уравнение Линдблада для матрицы плотности системы  $\hat{\mathcal{R}}_S$  может быть записано в виде:

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{R}}_S}{\partial t} = -i[\hat{\mathcal{H}}_S, \hat{\mathcal{R}}_S] + \sum_j \mathcal{D}[\hat{L}_j](\hat{\mathcal{R}}_S), \quad (1.6)$$

где  $\hat{\mathcal{H}}_S$  - гамильтониан системы,  $\mathcal{D}$  - диссипатор, также конструкцию  $\mathcal{D}[\hat{L}_j](\hat{\mathcal{R}}_S)$  называют супероператором Линдблада, который определяется как

$$\mathcal{D}[\hat{L}_j](\hat{\mathcal{R}}_S) = \gamma_j \left( \hat{L}_j \hat{\mathcal{R}}_S \hat{L}_j^\dagger - \frac{1}{2} \hat{L}_j^\dagger \hat{L}_j \hat{\mathcal{R}}_S - \frac{1}{2} \hat{\mathcal{R}}_S \hat{L}_j^\dagger \hat{L}_j \right), \quad (1.7)$$

где  $\gamma_j$  - константа релаксации, индекс  $j$  может означать как моду так и узел системы,  $\{\hat{L}_j\}$  - набор некоторых операторов, которые в зарубежной литературе также называются *jump operators*, описывающих диссипативную часть динамики. Форма операторов  $\hat{L}_j$  описывает, как резервуар  $B$  воздействует на систему  $S$ , и эта форма должна быть либо определена из микроскопических моделей динамики система-окружающая среда, либо сформулирована феноменологически. Например, если  $\hat{L}_j = \hat{a}_j$ , то описываемый процесс соответствует стоку частиц в резервуар, а  $\hat{L}_j = \hat{a}_j^\dagger$  - накачке частицами из резервуара в узел  $j$  [81; 82]; в работе [83] показано, что в димере выбор  $\mathcal{D}[\hat{a}_1 + \hat{a}_2](\hat{\mathcal{R}}_S)$  позволяет реализовать ситуацию, когда накачка и диссипация (сток) происходит только для разных мод, а именно накачка для *bonding mode*, а диссипация для

*antibonding mode*; выбор  $\hat{L}_j = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$  описывает дефазировку [81; 84]; а использование  $\hat{L}_j = \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_j$  позволяет описать некогерентный перенос частиц между соседними узлами [85; 86]. Основное квантовое кинетическое уравнение (1.6) описывает неунитарную эволюцию матрицы плотности открытой квантовой системы. А его главная особенность заключается в том, что если кинетическое уравнение имеет форму (1.6) для любого набора операторов  $\{\hat{L}_j\}$  и  $\mathcal{D}[\hat{L}_j]$ , определенных в (1.7), то гарантировано, что отображение, описывающее динамику системы, будет вполне положительным и сохраняющим след.

Следует подчеркнуть, что уравнение Линдблада представляет собой фундаментальный результат: оно описывает наиболее общий вид генератора однопараметрической полугруппы вполне положительных, сохраняющих след отображений [5]. Хотя уравнения в форме (1.6) часто возникают при микроскопическом выводе динамики открытых систем, они не выводятся напрямую из точного уравнения Накадзимы–Цванцига. Действительно, применение приближения Борна–Маркова к уравнению Накадзимы–Цванцига [3] приводит к дифференциальному уравнению первого порядка более общего вида, известному как уравнение Редфилда. Однако только при дополнительных предположениях — в частности, при использовании приближения вращающейся волны (*rotating-wave approximation*, RWA) или секулярного приближения — получаемое уравнение приобретает каноническую форму Линдблада и, следовательно, гарантирует полную положительность. Полная положительность означает, что на всех временах  $t \geq 0$  матрица плотности остаётся положительно полуопределённой, то есть все её собственные значения неотрицательны; и, что ещё важнее, это свойство сохраняется даже если система будет объединена с любой другой квантовой системой, с которой она изначально не взаимодействует. Без этих уточнений динамика может нарушать физические ограничения и оказаться неприменимой для описания реальных квантовых процессов.

Приближение Борна–Маркова, лежащее в основе большинства моделей марковской динамики, базируется на двух ключевых предположениях:

- Слабая связь с резервуаром: энергия взаимодействия между системой и окружением мала по сравнению с характерными энергетическими масштабами как самой системы, так и резервуара (приближение Борна);
- Быстрая релаксация резервуара: корреляционные функции резервуара затухают на временах  $\tau_B$ , значительно меньших характерного времени

эволюции системы  $\tau_S$  ( $\tau_B \ll \tau_S$ ), что позволяет пренебречь памятью окружения (приближение Маркова).

Эти условия обеспечивают возможность замены нелокального по времени уравнения Накадзимы–Цванцига на локальное дифференциальное уравнение, однако, как отмечалось выше, для получения физически корректной динамики требуется дополнительная регуляризация, обычно реализуемая через RWA.

Прямое решение уравнения Линдблада для бозонных многочастичных систем, как правило, требует работы с матрицей плотности большой размерности. Например, пусть рассматриваемая система состоит из  $L = 10$  узлов и сохраняет полное число частиц в системе равное  $N = 5$ . Тогда размерность матрицы плотности равна  $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$ , где  $\mathcal{N}$  определяется через число сочетаний с повторениями  $\mathcal{N} = \tilde{C}_L^N = \frac{(L+N-1)!}{N!(L-1)!} = 2002$ . В случае отсутствия сохранения частиц, число бозонов, вообще говоря, может быть бесконечным. Поэтому для численного счета при работе с системой без условия на сохранение числа частиц используют обрезку или усечение базиса. Но даже при усечении базиса, итоговая размерность определяется как сумма размерностей для каждого числа частиц вплоть до усечения, например, для  $L = 10$  и усечения на  $N = 10$  получаем  $\mathcal{N} = \sum_{N=0}^{10} \tilde{C}_L^N = 184\,756$ . Это означает, что даже для сравнительно небольших открытых систем, например для  $L = 10$  и усечения на  $N = 10$ , размерность превышает  $10^5$ , что делает точные квантовые расчеты невозможными. Это подчеркивает важность приближенных методов. Согласно обзору [81], для открытой модели Бозе–Хаббарда можно выделить такие методы как метод волновой функции Монте-Карло (quantum jump method), приближение среднего поля и его расширения, приближение усеченной функции Вигнера и использование интегралов по траекториям. Ниже рассмотрим подробнее лишь некоторые из них.

Волновая функция Монте-Карло обеспечивает точное стохастическое моделирование малых систем через разложение уравнения Линдблада на ансамбль траекторий. Основное преимущество данного метода заключается в том, что вместо эволюции матрицы плотности  $\hat{\mathcal{R}}_S$  вычисляют эволюцию вектора состояния  $|\Psi(0)\rangle$  (где  $\hat{\mathcal{R}}_S(0) = |\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|$ ). Этот метод сочетает непрерывную эволюцию с неэрмитовым гамильтонианом и дискретные скачки, соответствующие диссипативным процессам. Его сила проявляется в анализе квантовой запутанности и метастабильных состояний. Однако вычислительная сложность ограничивает его применение системами с небольшим числом частиц.

Отдельно стоит отметить подход одночастичной матрицы плотности (single particle density matrix, SPDM), который позволяет свести исходную многочастичную задачу к задаче на двухточечные корреляторы – элементы одночастичной матрицы плотности  $\rho_{j,k}$ , определяемые следующим выражением

$$\rho_{j,k} = \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \rangle = \text{Tr}[\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{\mathcal{R}}_S], \quad (1.8)$$

и описывающие одночастичные свойства рассматриваемой задачи. В случае, если исходная задача, уравнение Линдблада (1.6), содержит только члены квадратичные по операторам рождения и уничтожения  $\hat{a}_\ell^\dagger$  и  $\hat{a}_{\ell'}$ , то всегда можно получить замкнутую систему уравнений на элементы SPDM

$$\frac{d}{dt} \rho_{j,k} = \text{Tr}[\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{\mathcal{L}}_t(\hat{\mathcal{R}}_S)], \quad (1.9)$$

где  $\hat{\mathcal{L}}_t$  – правая часть уравнения (1.6). Во всех иных случаях замкнутую систему уравнений, как правило, получить невозможно, так как будут возникать корреляторы высоких порядков, для которых будет необходимо записывать новые уравнения, что приведет к появлению цепочки зацепляющихся уравнений – цепочке уравнений Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона [81; 87], для решения которых необходимо использовать дополнительные методы. Такие цепочки уравнений, содержащие корреляторы разных порядков составляют суть метода BBR (Bogoliubov back-reaction method). В рамках этого метода записывается цепочка уравнений до  $n$ -точечного коррелятора, а все корреляторы порядка  $n+1$  и выше в записанных уравнениях расцепляются, тем самым позволяя получить замкнутую систему уравнений [81; 88; 89]. Метод BBR позволяет прогнозировать время разрушения конденсата и устойчивость возбуджений, но применим лишь вблизи режима идеального БЭК.

Приближение усечённой функции Вигнера (truncated Wigner approximation) заполняет нишу между точными и среденеполевыми методами, моделируя динамику через стохастические уравнения в фазовом пространстве. Этот подход, учитывающий квантовые шумы, идеален для анализа неравновесного транспорта и стационарных токов в системах с резервуарами. Однако он требует больших чисел заполнения и теряет точность при сильной запутанности частиц. Подробнее этот метод будет рассмотрен в следующем параграфе.

Следует подчеркнуть, что наряду с методом основного кинетического уравнения, существенную роль в теории квантового транспорта играет формализм Ландауэра–Бюттикера [16; 17]. Данный подход получил широкое

распространение не только в физике твёрдого тела, а также и является теоретической основой для описания транспорта ультрахолодных атомов в оптических решётках, например, в описанной ранее работе группы профессора Эсслингера [67]. Формализм Ландауэра—Бюттикера устанавливает фундаментальную связь между проводимостью мезоскопической системы и энергетической зависимостью коэффициентов (вероятностью) прохождения  $T(E)$ . Этот подход, основанный на концепции упругого когерентного переноса, обладает рядом существенных преимуществ: физическая прозрачность, ток выражается через вероятности прохождения носителей, что обеспечивает непосредственную интерпретацию экспериментальных данных; вычислительная эффективность, метод особенно продуктивен для расчёта баллистического транспорта в наноструктурах простой геометрии; прямая связь с экспериментально измеряемой проводимостью. Однако подход имеет существенные ограничения: неявное предположение о бесконечных идеально термализованных резервуарах; игнорирование динамики релаксации: отсутствие параметра, характеризующего скорость установления равновесия в резервуарах; ограниченная область применимости: неспособность описывать нестационарные процессы, декогеренцию и термоэлектрические эффекты. Частичное устранение этих ограничений достигается при использовании метода неравновесных функций Грина [16], который позволяет более строго учесть взаимодействие системы с термостатами. Примечательно, что как показано в цикле работ Коловского А. Р. и соавторов [90—93], на качественном уровне наблюдается согласованность предсказаний основного кинетического уравнения и формализма Ландауэра—Бюттикера. В частности:

- Оба подхода предсказывают эффект резонансного туннелирования;
- Немарковское основное кинетическое уравнение воспроизводит ключевые особенности когерентного транспорта;
- Экспериментально наблюдаемое уширение резонансов получает естественное объяснение в рамках кинетического подхода через параметр релаксации  $\gamma$ .

## 1.4 Псевдоклассическое приближение

Псевдоклассическое приближение представляет собой метод описания динамики квантовых бозонных систем, при котором эволюция, задаваемая основным кинетическим уравнением, аппроксимируется классическим процессом в фазовом пространстве. В отличие от среднеполевого описания замкнутых бозонных систем, где динамика конденсата сводится к детерминированному нелинейному уравнению Гросса–Питаевского [94–96], псевдоклассический подход сохраняет информацию о флуктуациях и диссипативных процессах.

Для учёта этих эффектов применяется псевдоклассическое приближение. Его основная идея заключается в том, чтобы отобразить эволюцию квантовой системы на классическую стохастическую динамику в фазовом пространстве. Это достигается заменой квантовых операторов и матрицы плотности на их классические аналоги — гладкие функции в фазовом пространстве. Матрице плотности  $\hat{\mathcal{R}}$  ставится в соответствие одна из квазивероятностных функций распределения, например, функция Вигнера или функция Хусими (Husimi Q-function) [97]. Далее рассмотрим построение псевдоклассического приближения через функцию Вигнера [97–100]. В этом случае, все квантовые операторы заменяются их символами Вейля — гладкими функциями классических переменных  $\tilde{a}$  и  $\tilde{a}^*$  в фазовом пространстве

$$\text{symb}[\hat{A}] = A(\tilde{a}, \tilde{a}^*). \quad (1.10)$$

При условии, что вклад квантовых корреляций высоких порядков мал (например, в пределе большого числа частиц или слабой нелокальности взаимодействий), уравнение для эволюции функции Вигнера может быть сведено к уравнению Фоккера–Планка. В методе усечённой функции Вигнера (truncated Wigner approximation, TWA), это достигается путём отбрасывания членов третьего и более высоких порядков в градиентном разложении уравнения для функции Вигнера, что эквивалентно пренебрежению квантовыми корреляциями за пределами гауссова приближения. На практике такая процедура позволяет эффективно моделировать как когерентную, так и некогерентную динамику в низкоразмерных бозонных системах, включая эффекты квантового транспорта, рассеяния и диссипации.

Введем символы Вейля для наиболее часто встречающихся в данной диссертации операторов

$$\begin{aligned}\text{ymb}[\hat{a}] &= \tilde{a}, \\ \text{ymb}[\hat{a}^\dagger] &= \tilde{a}^*, \\ \text{ymb}[\hat{\mathcal{R}}] &= \mathcal{W},\end{aligned}\tag{1.11}$$

где  $\mathcal{W}$  – функция Вигнера, определяемая через матрицу плотности  $\hat{\mathcal{R}}$

$$\mathcal{W}(\tilde{a}, \tilde{a}^*) = \frac{1}{\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\beta d\beta^* e^{\tilde{a}\beta^* - \tilde{a}^*\beta} \text{Tr} \left[ e^{\beta\hat{a}^\dagger - \beta^*\hat{a}} \hat{\mathcal{R}} \right].\tag{1.12}$$

Символ Вейля от произведения операторов выражается через произведение Мoyalа:

$$\hat{A} \cdot \hat{B} \rightarrow A \star B = A \exp \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^\leftarrow}{\partial \tilde{a}} \frac{\partial^\rightarrow}{\partial \tilde{a}^*} - \frac{\partial^\leftarrow}{\partial \tilde{a}^*} \frac{\partial^\rightarrow}{\partial \tilde{a}} \right) \right] B.\tag{1.13}$$

где стрелки обозначают дифференцирование слева/справа. Использование вместо квантовых операторов их символов Вейля обеспечивает переход от операторного формализма к классическим уравнениям движения в фазовом пространстве. Данная схема особенно эффективна для анализа динамики бозе-конденсатов в слабоангармонических потенциалах, где она сохраняет ключевые квантовые корреляции, игнорируемые в стандартном среднем поле, при этом упрощая расчёты за счёт подавления сингулярных квантовых мод.

В качестве примера работы с произведением Мoyalа и символами Вейля перепишем оператор числа частиц  $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$

$$\text{ymb}(\hat{n}) = \tilde{a}^* \star \tilde{a} = \tilde{a}^* \tilde{a} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{a}^*}{\partial \tilde{a}} \frac{\partial \tilde{a}}{\partial \tilde{a}^*} - \frac{\partial \tilde{a}^*}{\partial \tilde{a}^*} \frac{\partial \tilde{a}}{\partial \tilde{a}} \right) + \dots = |\tilde{a}|^2 - \frac{1}{2}.$$

где член  $-\frac{1}{2}$  возникает из-за некоммутативности операторов  $\hat{a}^\dagger$  и  $\hat{a}$ , отражая принципиально квантовую поправку к классическому выражению.

При построении псевдоклассического приближения для открытой модели Бозе-Хаббарда ключевую роль играют два масштабных условия:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar_{\text{eff}}} &\gg 1, \\ \frac{1}{\hbar_{\text{eff}}} U &= \text{const},\end{aligned}\tag{1.14}$$

где  $\hbar_{\text{eff}}$  – безразмерная эффективная постоянная Планка. Первое условие, требующее малости  $\hbar_{\text{eff}}$ , обеспечивает подавление квантовых флуктуаций, что

является необходимым критерием применимости классического описания в фазовом пространстве. Второе условие фиксирует отношение энергии взаимодействия к эффективному квантовому масштабу, гарантируя сохранение баланса между нелинейными и диссипативными эффектами в открытой системе [82].

Параметр  $\hbar_{\text{eff}}$  связан со средним числом частиц  $\bar{n}$  через следующее соотношение:  $1/\hbar_{\text{eff}} = \bar{n}$ . При этом сам параметр  $\bar{n}$  может быть определен несколькими способами. В случае закрытых систем данный параметр определяется через среднюю плотность частиц на узел решетки  $\bar{n} = N/L$ , где  $N$  - полное число частиц в системе. При рассмотрении открытых систем параметр  $\bar{n}$  может выступать в качестве средней плотности частиц в резервуаре. При этом соотношение  $1/\hbar_{\text{eff}} = \bar{n}$  в обоих случаях отражает физическую идеализацию, при которой за счёт макроскопического числа частиц ( $\bar{n} \gg 1$ ) классические статистические эффекты оказываются более значимыми на фоне квантовых флуктуаций. Однако в системах с двумя или более резервуарами возникает методологическая неоднозначность: выбор резервуара, среднее число частиц  $\bar{n}$  в котором отождествляется с  $1/\hbar_{\text{eff}}$ . Например, для цепочки Бозе—Хаббарда соединенной с двумя резервуарами, у которых плотность частиц в левом резервуаре больше чем в правом, параметр  $1/\hbar_{\text{eff}}$  можно ассоциировать со средней плотностью частиц в левом резервуаре, как это сделано в [82]. В работе [101] показано, что для больших чисел заполнения  $\bar{n}$  псевдоклассическое приближение хорошо воспроизводит результаты точного квантового моделирования осцилляций Блоха для взаимодействующих бозе-частиц [101], а также и экспериментальные результаты [102]. В недавно опубликованном препринте [103] представлено сравнение результатов точного квантового моделирования, выполненного с использованием метода квантовых траекторий (волновой функции Монте-Карло), и расчётов в рамках псевдоклассического приближения для диссипативной цепочки Бозе—Хаббарда из двух узлов, находящейся под действием внешнего периодического воздействия. Авторы демонстрируют количественное согласие между результатами, полученными этими двумя методами.

Условие (1.14) приводит к переопределению переменных из (1.11) к следующему виду

$$\tilde{a} = \sqrt{\bar{n}}a, \quad \tilde{a}^* = \sqrt{\bar{n}}a^*. \quad (1.15)$$



Если же в условии (1.14) принять  $\bar{n} \rightarrow \infty$  и  $\bar{n}U = \text{const}$  то псевдоклассическое приближение становится эквивалентным приближению среднего поля.

Критическим остаётся вопрос о нижней границе  $\bar{n}$ , при которой псевдоклассическое приближение сохраняет адекватность. Теоретическое обоснование такой границы затруднено из-за отсутствия аналитических решений для открытых многочастичных систем и вычислительных ограничений прямого квантового моделирования открытых систем с большим числом узлов и частиц. В работе [104] было продемонстрировано, что псевдоклассическое приближение воспроизводит квантовый результат для  $\bar{n} = 10/2 = 5$ . Во второй главе (раздел 2.2) данной диссертации представлено сравнение результатов прямого квантового счета и псевдоклассического приближения для открытой цепочки Бозе—Хаббарда из трех узлов.

Описанный выше математический аппарат позволяет перейти от квантового основного кинетического уравнения (1.6) к уравнению на классическую функцию распределения. Далее используя замену (1.15) и отбрасывая в силу малости все члены типа  $\mathcal{O}(\bar{n}^{-2})$ , получаем уравнение на функцию распределения, которое переходит в уравнение Фоккера—Планка для классических переменных. Уравнение Фоккера—Планка можно преобразовать в эквивалентные стохастические дифференциальные уравнения (СДУ) Ито—Ланжевена [82]. Например, для открытой цепочки Бозе—Хаббарда с локальными потерями частиц на крайних узлах ( $L_j = \hat{a}_j$ ,  $j = 1, L$ ) это дает систему  $2L$  уравнений, по одному на  $a_\ell$  и  $a_\ell^*$  для каждого узла  $\ell$ :

$$\begin{aligned} \frac{da_\ell}{dt} &= -i \frac{\partial H}{\partial a_\ell^*} - \delta_{j,\ell} \left( \frac{\gamma_j}{2} a_j + \dots + \text{шумовые члены} \right); \\ \frac{da_\ell^*}{dt} &= i \frac{\partial H}{\partial a_\ell} - \delta_{j,\ell} \left( \frac{\gamma_j}{2} a_j^* + \dots + \text{шумовые члены} \right), \end{aligned} \quad (1.16)$$

где  $H$  — классический гамильтониан, записанный в терминах голоморфных переменных (1.15), а шумовые и диссипативные члены с  $\gamma_j$  возникают из-за связи с резервуаром.

Хотя псевдоклассическое приближение оперирует классическими траекториями, усреднение по ансамблю этих траекторий позволяет восстановить элементы одночастичной матрицы плотности. Если получены уравнения Ланжевена на переменные  $a_\ell(t)$  и  $a_\ell^*(t)$  то элементы одночастичной матрицы плотности определяются следующим образом

$$\rho_{j,k}(t) = \langle a_j^*(t) a_k(t) \rangle, \quad 1 \ll j, k \ll L. \quad (1.17)$$

где  $\langle \dots \rangle$  – усреднение по различным реализациям случайного процесса.

## 1.5 Модель Бозе—Хаббарда в физике ультрахолодных атомов

Одной из фундаментальных моделей в физике ультрахолодных атомов является модель Бозе—Хаббарда, первоначально предложенная Х. Гершем и Г. Ноллманом в 1963 году [12] как бозонный аналог фермионной модели Хаббарда [13]. Данная модель – простейшая квантово-механическая модель, применяемая для описания взаимодействующих бозонов в периодическом потенциале. В рамках данной модели частицы могут перескакивать между узлами потенциала и взаимодействовать, если находятся в одном узле. Гамильтониан модели записывается следующим образом:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\ell} E_{\ell} \hat{n}_{\ell} - \sum_{\langle \ell, \ell' \rangle} \frac{J_{\ell, \ell'}}{2} \left( \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell'} + \text{h.c.} \right) + \frac{U}{2} \sum_{\ell} \hat{n}_{\ell} (\hat{n}_{\ell} - 1). \quad (1.18)$$

который содержит три ключевых компонента: энергию на узле  $E_{\ell}$ , матричный элемент туннелирования  $J_{\ell, \ell'}$ , экспоненциально зависящий от глубины оптической решетки, и который также может учитывать искусственные калибровочные поля [105], и параметр взаимодействия  $U$ , пропорциональный длине рассеяния s-волны. Здесь  $\hat{n}_{\ell} = \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell}$  – оператор числа частиц в  $\ell$ -м узле,  $\hat{a}_{\ell}^{\dagger}$  и  $\hat{a}_{\ell}$  – операторы рождения и уничтожения бозона в  $\ell$ -м узле, индексы  $\ell$  и  $\ell'$  нумеруют узлы решетки, а  $\langle \ell, \ell' \rangle$  подразумевают суммирование по всем соседним узлам, h.c. означает эрмитово сопряженный член. Знак  $U$  определяет характер взаимодействия:  $U > 0$  соответствует отталкиванию, что является типичным случаем для ультрахолодных атомов с короткодействующими s-волновыми рассеяниями [62], а  $U < 0$  – притяжению. Величиной параметра взаимодействия можно управлять с помощью резонансов Фешбаха.

Значительный прогресс в обосновании модели произошел в 1998 году, когда Якш и Цоллер [14] продемонстрировали, что динамика бозонов в глубокой оптической решетке действительно сводится к гамильтониану Бозе—Хаббарда. Их работа предсказала возможность наблюдения квантового фазового перехода между сверхтекучей фазой, в которой доминирует туннелирование  $J$ , и изолятором Мотта, в котором доминирует взаимодействие  $U$ , теоретически описанного

ранее в работе Фишера и др. [106]. В трехмерии переход происходит при выполнении условия  $U/J \sim z$ , где  $z$  — число ближайших соседей, например,  $z = 6$  для простой кубической решетки. В 2002 году, всего через четыре года после публикации теоретической работы [14], группа Грайнера [1] экспериментально реализовала этот переход для атомов рубидия в трехмерной оптической решетке, наблюдая подавление туннелирования при увеличении глубины решетки. Эти исследования заложили основу для использования оптических решеток в качестве квантовых симуляторов сильно коррелированных систем [40].

Помимо описания фундаментальных квантовых фаз, таких как сверхтекучесть и изолятор Мотта, модель Бозе—Хаббарда служит базовой платформой для изучения явления квантового хаоса в многочастичных системах [107; 108]. В отличие от интегрируемой модели Хаббарда для фермионов, бозонный вариант при ненулевых параметрах туннелирования  $J$  и взаимодействия  $U$  является неинтегрируемым и проявляет свойства квантовой хаотической системы. Это выражается в универсальных статистических свойствах её спектра, распределение расстояний между уровнями подчиняется статистике Вигнера—Дайсона гауссова ортогонального ансамбля, и в хаотической динамике её классического предела — дискретного нелинейного уравнения Шрёдингера, получаемого в рамках подхода среднего поля. Переход к хаосу проявляется в динамике системы, например, в необратимом затухании блоховских осцилляций в наклонной оптической решётке при умеренной силе поля, что было предсказано теоретически и подтверждено экспериментально [102; 108].

Также стоит отметить, что на сегодняшний день активно исследуется расширенная модель Бозе—Хаббарда, гамильтониан которой включает дополнительные члены, такие как межузловые взаимодействия, индуцированное взаимодействием туннелирование (interaction induced tunnelings) и парные процессы, например, парное туннелирование частиц. С последними достижениями в этой области можно подробнее ознакомиться в недавнем обзоре [109].

## Глава 2. Открытая цепочка Бозе—Хаббарда

В настоящей главе рассматривается система, состоящая из линейной цепочки Бозе-Хаббарда длины  $L$  (содержащей  $L$  узлов), в которой первый узел соединен с левым резервуаром частиц, а последний узел — с правым резервуаром (рисунок 2.1).

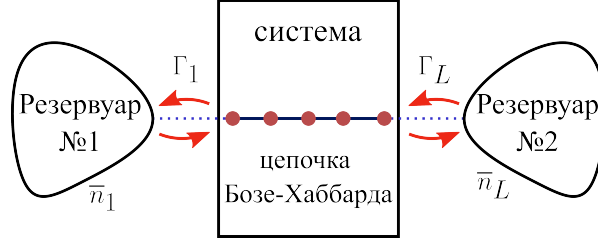


Рисунок 2.1 — Схематичное изображение цепочки Бозе—Хаббарда, соединяющей два атомных резервуара.

Основное внимание в главе уделяется анализу стационарного тока частиц через цепочку и его зависимости от параметров системы, таких как константа взаимодействия  $U$ , длина цепочки  $L$ , а также параметры резервуаров. Как будет показано, межчастичное взаимодействие играет ключевую роль в определении транспортных свойств системы, приводя к переходу от баллистического к диффузионному режиму транспорта.

### 2.1 Модель и основные уравнения

Для описания динамики частиц в системе запишем основное кинетическое уравнение (1.6) для редуцированной матрицы плотности  $\hat{\mathcal{R}}$  носителей в цепочке:

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{R}}}{\partial t} = -i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{R}}] + \hat{\mathcal{L}}_1(\hat{\mathcal{R}}) + \hat{\mathcal{L}}_L(\hat{\mathcal{R}}), \quad (2.1)$$

где  $\hat{\mathcal{L}}_1(\hat{\mathcal{R}})$  - супероператор Линдблада, который отвечает за обмен частицами между левым резервуаром и первым узлом цепочки,  $\hat{\mathcal{L}}_L(\hat{\mathcal{R}})$  - супероператор Линдблада, аналогичный  $\hat{\mathcal{L}}_1(\hat{\mathcal{R}})$ , но отвечающий за обмен частицами между правым резервуаром и последним ( $L$ -ым) узлом цепочки,  $\hat{\mathcal{H}}$  - гамильтониан

Бозе—Хаббарда (1.18) записанный в узельном представлении для одномерной цепочки.

Процесс обмена частицами между резервуаром и узлом в данной модели может протекать в обе стороны, т.е. частицы попадают из резервуара в узел и могут также совершать обратное движение. Таким образом супероператор  $\hat{\mathcal{L}}_\ell$  будет иметь следующий вид

$$\hat{\mathcal{L}}_\ell(\hat{\mathcal{R}}) = -\frac{\Gamma_\ell(\bar{n}_\ell + 1)}{2}\hat{\mathcal{L}}_\ell^{\text{loss}} - \frac{\Gamma_\ell\bar{n}_\ell}{2}\hat{\mathcal{L}}_\ell^{\text{gain}} \quad (2.2)$$

где  $\bar{n}_\ell$  - средняя плотность частиц в  $\ell$ -ом резервуаре,  $\ell = 1$  соответствует левому резервуару, а  $\ell = L$  соответствует правому резервуару,  $\Gamma_\ell$  - коэффициент, пропорциональный интенсивности обмена частиц с резервуаром,  $\hat{\mathcal{L}}_\ell^{\text{loss}}$  - супероператор, отвечающий за сток частиц

$$\hat{\mathcal{L}}_\ell^{\text{loss}}(\hat{\mathcal{R}}) = \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\mathcal{R}} + \hat{\mathcal{R}} \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell - 2\hat{a}_\ell \hat{\mathcal{R}} \hat{a}_\ell^\dagger, \quad (2.3)$$

$\hat{\mathcal{L}}_\ell^{\text{gain}}$  - супероператор, отвечающий за накачку частицами

$$\hat{\mathcal{L}}_\ell^{\text{gain}}(\hat{\mathcal{R}}) = \hat{a}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\mathcal{R}} + \hat{\mathcal{R}} \hat{a}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger - 2\hat{a}_\ell^\dagger \hat{\mathcal{R}} \hat{a}_\ell. \quad (2.4)$$

Нетрудно показать, что супероператоры Линдблада (2.3) и (2.4), в случае одного осциллятора соединенного с одним резервуаром со средним числом частиц  $\bar{n}$ , обеспечивают релаксацию осциллятора к стационарному состоянию со средним числом заполнения, заданным параметром  $\bar{n}$  [82]. Также отметим, что коэффициент  $\Gamma_\ell$  из (2.2) играет роль константы релаксации/ диссипации в основном кинетическом уравнении (2.1). Для определенности будем считать, что средняя плотность частиц в левом резервуаре превышает таковую в правом:  $\bar{n}_1 > \bar{n}_L$ . Таким образом, левый резервуар действует как источник частиц, а правый — как сток.

Для более глубокого понимания релаксационных процессов, обусловленных супероператорами Линдблада  $\hat{\mathcal{L}}_\ell$ , перепишем уравнение (2.1) в следующем виде:

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{R}}}{\partial t} = -i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{R}}] + \hat{\mathcal{D}}(\hat{\mathcal{R}}) + \hat{\mathcal{G}}(\hat{\mathcal{R}}), \quad (2.5)$$

где введены релаксационные супероператоры  $\widehat{\mathcal{D}}$  и  $\widehat{\mathcal{G}}$ , определяемые выражениями:

$$\widehat{\mathcal{D}}(\widehat{\mathcal{R}}) = -\frac{1}{2} \sum_{\ell=1,L} D_{\ell} \left( [\hat{a}_{\ell}, [\hat{a}_{\ell}^{\dagger}, \widehat{\mathcal{R}}]] + [\hat{a}_{\ell}^{\dagger}, [\hat{a}_{\ell}, \widehat{\mathcal{R}}]] \right), \quad (2.6)$$

$$\widehat{\mathcal{G}}(\widehat{\mathcal{R}}) = -\frac{1}{2} \sum_{\ell=1,L} \Gamma_{\ell} \left( \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \widehat{\mathcal{R}} + \widehat{\mathcal{R}} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} - 2 \hat{a}_{\ell} \widehat{\mathcal{R}} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \right). \quad (2.7)$$

Физическая интерпретация этих супероператоров следующая: супероператор  $\widehat{\mathcal{D}}$  описывает диффузионные процессы с коэффициентами диффузии  $D_{\ell} = \Gamma_{\ell} \bar{n}_{\ell}$ , тогда как супероператор  $\widehat{\mathcal{G}}$  соответствует диссипативным процессам с коэффициентами трения  $\Gamma_{\ell}$ . Теоретический анализ показывает, что независимый контроль коэффициентов  $D_{\ell}$  и  $\Gamma_{\ell}$  в принципе возможен в ультрахолодных газах. Это позволяет исследовать различные режимы: при  $\Gamma_{\ell} = 0$  наблюдается чистая диффузия, а при  $D_{\ell} = 0$  — чистая диссипация. В общем случае конкуренция диффузионных и диссипативных процессов приводит к установлению стационарного состояния.

## 2.2 Псевдоклассическое приближение

Для анализа системы применим подход, описанный в разделе 1.4, который позволяет перейти от основного кинетического уравнения для матрицы плотности к классическому описанию в терминах функции распределения в фазовом пространстве. А именно, перейдем от уравнения (2.5) для редуцированной матрицы плотности  $\widehat{\mathcal{R}}$  к уравнению Фоккера-Планка для функции распределения  $f = f(\mathbf{a}, \mathbf{a}^*; t)$ , где  $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_L)$  — вектор комплексных амплитуд осцилляторов:

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\} + \sum_{\ell=1,L} \mathcal{D}^{(\ell)}(f) + \sum_{\ell=1,L} \mathcal{G}^{(\ell)}(f), \quad (2.8)$$

где

$$\mathcal{D}^{(\ell)}(f) = D_\ell \frac{\partial^2 f}{\partial a_\ell \partial a_\ell^*}, \quad (2.9)$$

$$\mathcal{G}^{(\ell)}(f) = \frac{\Gamma_\ell}{2} \left( a_\ell \frac{\partial f}{\partial a_\ell} + 2f + a_\ell^* \frac{\partial f}{\partial a_\ell^*} \right), \quad (2.10)$$

$$H = E_0 \sum_{\ell=1}^L a_\ell^* a_\ell - \frac{J}{2} \sum_{\ell=1}^{L-1} (a_{\ell+1}^* a_\ell + a_\ell^* a_{\ell+1}) + \frac{g}{2} \sum_{\ell=1}^L |a_\ell|^4, \quad (2.11)$$

где  $g = \bar{n}_1 U$  – макроскопическая константа взаимодействия, а  $\{\dots, \dots\}$  – классические скобки Пуассона. Член  $\mathcal{G}^{(\ell)}(f)$  соответствует трению (точнее, сжатию фазового объема), а член  $\mathcal{D}^{(\ell)}(f)$  описывает диффузию. Отметим, что коэффициент  $D_\ell$  из уравнения (2.9) при замене (1.15) определяется как  $D_\ell = \Gamma_\ell \bar{n}_\ell / \bar{n}_1$ .

От уравнения Фоккера-Планка (2.8) можно перейти к эквивалентной системе стохастических уравнений Ланжевена:

$$ida_\ell = \frac{\partial H}{\partial a_\ell^*} dt - i \frac{\Gamma_\ell}{2} (\delta_{1,\ell} + \delta_{L,\ell}) dt + \sqrt{D_\ell} (\delta_{1,\ell} + \delta_{L,\ell}) d\xi_\ell(t), \quad (2.12)$$

где  $d\xi_\ell(t)$  – комплексный белый шум, причем

$$\langle d\xi_\ell(t) d\xi_{\ell'}(t') \rangle = \delta_{\ell,\ell'} \delta(t - t') dt \quad (2.13)$$

где  $\langle \dots \rangle$  обозначает усреднение по различным реализациям случайного процесса. Таким образом, в рамках псевдоклассического приближения мы перешли от исходной квантовой задачи к классической задаче о системе  $L$  связанных нелинейных осцилляторов. При этом первый и последний осцилляторы испытывают трение с коэффициентами  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_L$  соответственно, а также подвержены воздействию внешних случайных сил с амплитудами  $\sqrt{D_1}$  и  $\sqrt{D_L}$ .

Следует сделать два важных замечания относительно проведенных выкладок. Во-первых, как отмечалось в разделе 1.4, существует определенная свобода в выборе параметра  $1/\hbar_{\text{eff}} = \bar{n}$  в выражениях (1.14) и (1.15). В данной главе этот параметр отождествлен со средней плотностью частиц в левом резервуаре  $\bar{n}_1$ , то есть  $\bar{n} = \bar{n}_1$ . Соответственно, макроскопическая константа взаимодействия  $g$  в гамильтониане (2.11) связана с микроскопической константой  $U$  соотношением  $g = \bar{n}_1 U$ . Также отметим, что благодаря условию  $\bar{n}_1 > \bar{n}_L$ , квадраты модулей амплитуд всех осцилляторов удовлетворяют условию  $|a_\ell|^2 / \bar{n}_1 \leq 1$ . Во-вторых, хотя условие (1.14) требует выполнения  $\bar{n}_1 \gg 1$ , вопрос о точной

нижней границе применимости псевдоклассического приближения остается открытым, поскольку его решение требует полного знания квантовой динамики системы. Численное решение основного кинетического уравнения (2.5) возможно только для систем с относительно малым числом узлов.

На рисунке 2.2 приводится сравнение прямого (квантового, сплошные линии) и псевдоклассического (штрихпунктирные линии) результатов для цепочки из трех узлов ( $L = 3$ ). Сплошные линии соответствуют населенностям узлов, нормированных на плотность частиц в левом резервуаре  $\mathcal{I}_\ell/\bar{n}_1 = \text{Tr}[\hat{n}_\ell \hat{\mathcal{R}}]/\bar{n}_1 = n_\ell/\bar{n}_1$ ; штрихпунктирные линии соответствуют квадратам модулей амплитуд осцилляторов, усредненным по различным реализациям белого шума, и также нормированным на плотность частиц в левом резервуаре  $\mathcal{I}_\ell/\bar{n}_1 = \langle |a_\ell|^2 \rangle / \bar{n}_1$ . Разумное согласие между штрихпунктирной и сплошной линиями указывает на то, что при таком размере системы нижней границей применимости псевдоклассического приближения можно считать  $\bar{n}_1 = 2$ . Хотя обсуждаемая нижняя граница не является решающей для излагаемых ниже результатов, следует помнить, что эта граница существует. Также на вставке показано сравнение результатов для тока  $I(t)$ , полученных из псевдоклассического приближения и прямого решения квантового уравнения.

### 2.3 Случай взаимодействующих и невзаимодействующих частиц

Рассмотрим сначала систему в отсутствие межчастичного взаимодействия ( $U = 0$ ,  $g = 0$ ). В этом случае для элементов одночастичной матрицы плотности (1.8) может быть получено замкнутое уравнение, следующее из уравнения Линдблада (2.5):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{l,m} = & i \frac{J}{2} (\rho_{l,m+1} + \rho_{l,m-1} - \rho_{l+1,m} - \rho_{l-1,m}) \\ & - \sum_{j=1,L} \frac{\Gamma}{2} (\delta_{l,j} + \delta_{m,j}) \rho_{l,m} + \sum_{j=1,L} D_j \delta_{l,j} \delta_{m,j}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Стационарное решение уравнения (2.14) представляет собой трехдиагональную матрицу с чисто мнимыми недиагональными элементами, которые определяют стационарный ток  $I$ . Сам ток  $I(t)$  может быть выражен через элементы одно-



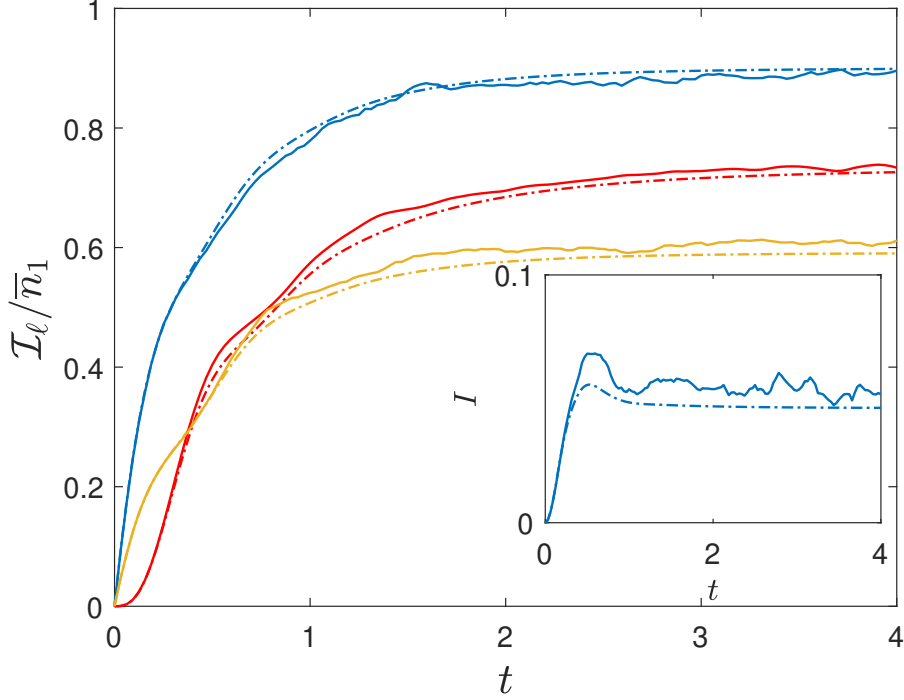


Рисунок 2.2 — Сравнение квантового (штрихпунктирная линия) и псевдоклассического (сплошная линия) результатов для  $L = 3$ ,  $J = 1$ ,  $\bar{n}_1 = 2$ ,  $\bar{n}_L = 1$ ,  $\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_L = 0.5$  ( $D_1 = \Gamma, D_L = \Gamma \bar{n}_L / \bar{n}_1$ ) и  $U = 0.5$  ( $g = 1$ ). В квантовом случае пространство Фока усекается до  $\sum_{\ell} n_{\ell} \leq 20$ , что дает размерность гильбертова пространства  $\mathcal{N} = 1771$ . В псевдоклассическом приближении усреднение производится по 16000 различным реализациям случайного процесса. Начальное условие соответствует пустой цепочке (осцилляторы в состоянии покоя). На вставке показано сравнение результатов для тока через цепочку [82].

частичной матрицы плотности следующим образом:

$$I(t) = \frac{J}{L-1} \sum_{\ell=1}^{L-1} \text{Im}[\rho_{\ell, \ell+1}(t)]. \quad (2.15)$$

Рассмотрим теперь случай  $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma$ , когда стационарный ток допускает компактное аналитическое выражение [82; 110]:

$$I = \frac{\Gamma J^2}{J^2 + \Gamma^2} \cdot \frac{D_1 - D_L}{2\Gamma} \bar{n}_1 = \frac{\Gamma J^2}{J^2 + \Gamma^2} \cdot \frac{\bar{n}_1 - \bar{n}_L}{2}. \quad (2.16)$$

Как следует из (2.16), ток пропорционален разности коэффициентов диффузии  $D_1 - D_L$  или разности средних плотностей частиц резервуаров  $\bar{n}_1 - \bar{n}_L$  в квантовой постановке задачи. Стационарные значения действий  $\mathcal{I}_{\ell}$  (диагональные

элементы SPDM) определяются выражением:

$$\mathcal{I}_\ell = \frac{D_1 - D_L}{2\Gamma} \bar{n}_1 = \frac{\bar{n}_1 - \bar{n}_L}{2}. \quad (2.17)$$

Соотношение (2.17) справедливо для всех осцилляторов, за исключением первого и последнего, значения действия для которых несколько отклоняются от указанной величины вследствие прямой связи с резервуарами.

Теперь рассмотрим случай взаимодействующих частиц и сравним его со случаем отсутствия взаимодействия. На левой колонке рисунка 2.3 показана динамика диагональных элементов одночастичной матрицы плотности, полученных в рамках псевдоклассического приближения согласно (1.17), для цепочки длиной  $L = 5$  с учетом взаимодействия, рисунок 2.3в, и без взаимодействия, рисунок 2.3а. Остальные параметры:  $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma = 0.5$ ,  $D_1 = 0.5$ ,  $D_L = 0.25$ , начальные условия  $\rho_{\ell,\ell}(t = 0) = 0$ , в начальный момент времени все осцилляторы покоятся.

В невзаимодействующем случае (сплошные линии на рисунке 2.3) наблюдается быстрая релаксация к стационарному состоянию с действиями  $\mathcal{I}_\ell$ , определяемыми выражением (2.17), рисунок 2.3г, и током, описываемым формулой (2.16), рисунок 2.3б. На рисунке 2.3б хорошо видно, что наличие взаимодействия (красная штриховая линия) приводит к подавлению стационарного тока.

Для интерпретации наблюдаемых эффектов целесообразно обратиться к анализу спектральных плотностей осцилляторов. Спектральная плотность мощности  $P(\nu)$  определяется следующим образом [111; 112]

$$P(\nu) = \langle |a(\nu)|^2 \rangle, \quad a(\nu) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T a(t) e^{i\nu t} dt. \quad (2.18)$$

На рисунке 2.4 (левая колонка) представлены спектральные плотности осцилляторов в цепочке при  $g = 0$ . В данном случае легко выделить частоты  $\omega_k$  коллективных мод, которые задаются вещественной частью комплексных полюсов функции Грина для системы линейных дифференциальных уравнений (2.12) с опущенными стохастическими членами. При умеренных значениях констант затухания (коэффициентов релаксации  $\Gamma$ ) частоты коллективных мод можно аппроксимировать собственными частотами линейной цепочки

$$\omega_k = -J \cos(2\pi k/L), \quad k = 1, \dots, L, \quad (2.19)$$

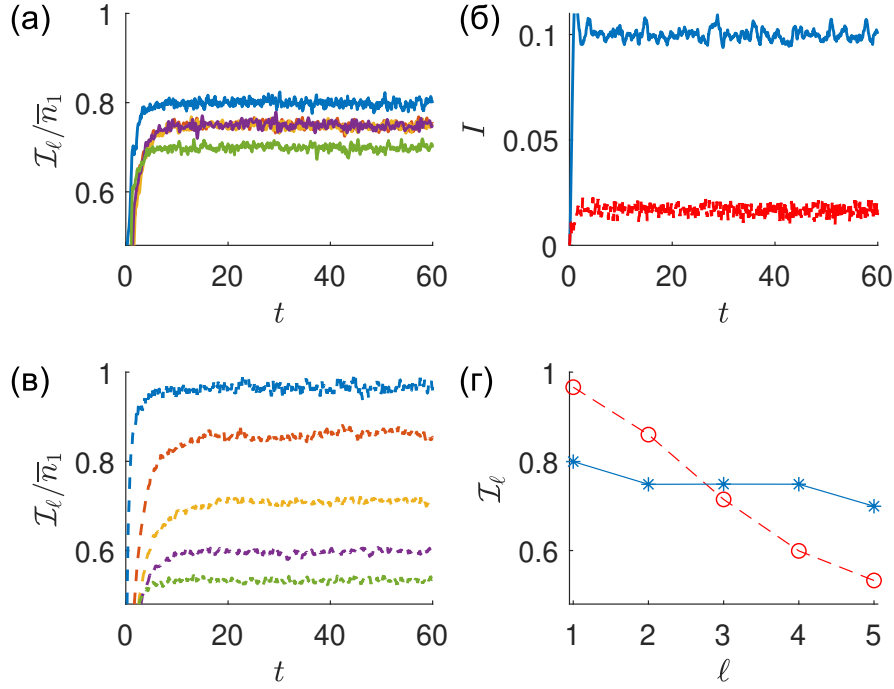


Рисунок 2.3 — Сравнение результатов с  $g = 2$  (штрихпунктирная линия) и  $g = 0$  (сплошная линия) для цепочки длиной  $L = 5$ . (а, в) Динамика нормированного среднего действия  $\mathcal{I}_\ell / \bar{n}_1$ ; (б) Динамика среднего тока; (г) Стационарные значения действий  $\mathcal{I}_\ell$ . Значения параметров:  $J = 1$ ,  $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma = 0.5$ ,  $\bar{n}_1 = 1$ ,  $\bar{n}_L = 0.5$ . Усреднение производилось по 12000 различным реализациям случайного процесса.

расположенными в зоне проводимости  $|\omega_k| \leq J$ .

Возбуждение коллективных мод внешними силами, действующими на граничные осцилляторы, обеспечивает эффективный перенос возбуждений вдоль цепочки. В квантовомеханическом описании это соответствует баллистическому транспорту бозе-частиц от левого резервуара к правому. Независимость стационарного тока от длины цепочки  $L$  является характерным признаком данного режима. На правой колонке рисунка 2.4 показаны спектральные плотности осцилляторов при  $g = 2$ . Наличие взаимодействия между частицами, нелинейности у осцилляторов в классической интерпретации, приводит к разрушению коллективных мод и исчезновению резонансных пиков в спектрах. Перенос возбуждений в этом случае приобретает диффузионный характер, что проявляется в значительном подавлении стационарного тока и возникновении его зависимости от длины цепочки  $L$ . Эта зависимость будет рассмотрена в следующем разделе.

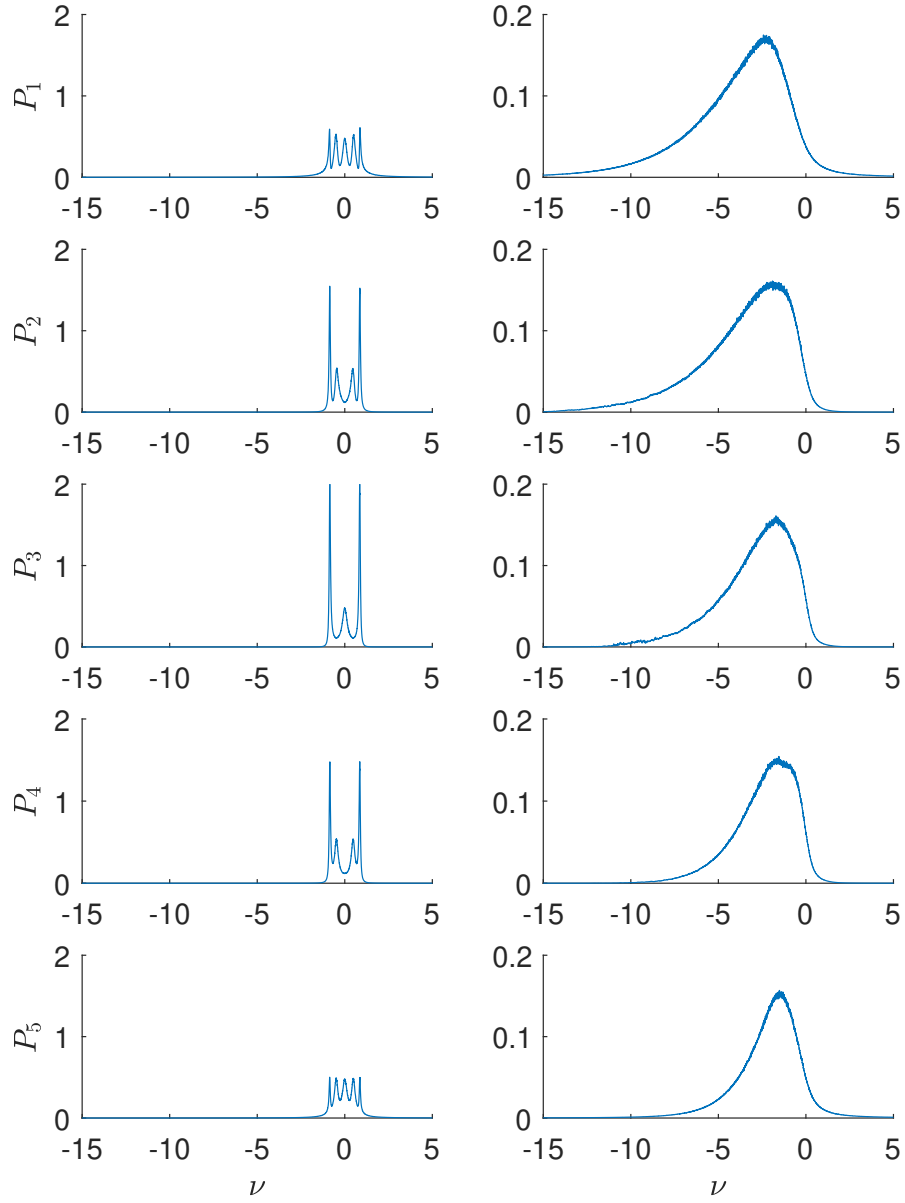


Рисунок 2.4 — Спектральная плотность осцилляторов в цепочке для  $g = 0$  (левая колонка) и  $g = 2$  (правая колонка). Остальные параметры такие же, как на рисунке 2.3.

## 2.4 Предел длинной цепочки

Согласно аналитическому решению (2.16), легко проверяемому численным моделированием, при отсутствии взаимодействия стационарный ток не зависит от длины цепочки, а транспорт характеризуется как баллистический. Если же

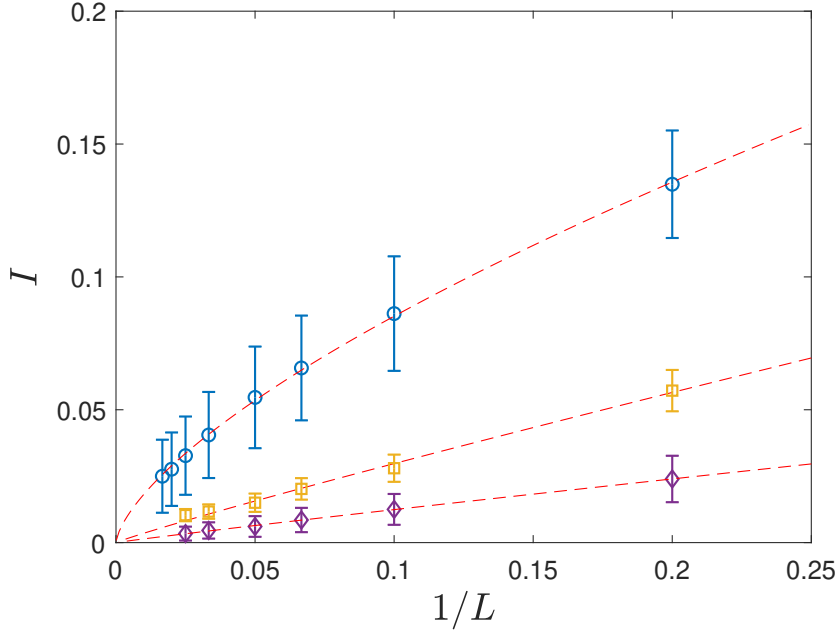


Рисунок 2.5 — Стационарный ток как функция обратной длины цепочки для разных значений средней плотности частиц в правом резервуаре  $\bar{n}_L$ . Маркерами обозначены численные результаты:  $\bar{n}_L = 0$  синие кружки,  $\bar{n}_L = 1$  желтые квадраты,  $\bar{n}_L = 1.5$  фиолетовые ромбы. Штриховые линии соответствуют аппроксимации степенной функцией вида  $I = \beta L^{-\alpha}$ . Остальные параметры:  $\bar{n}_1 = 2$ ,  $g = 1$  ( $U = 0.5$ ),  $J = 1$ ,  $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma = 0.5$ , усреднение производится по 8192 различным реализациям случайного процесса. Планки погрешностей соответствуют статистической ошибке из-за конечного числа реализаций случайного процесса [82].

теперь учесть межчастичное взаимодействие  $U$ , или нелинейность  $g$  в рамках псевдоклассического приближения, то у стационарного тока появляется зависимость от длины, причем характер этой зависимости определяется разностью  $\Delta\bar{n} = \bar{n}_1 - \bar{n}_L$ , то есть перепадом плотности между резервуарами, рисунок 2.5.

В предельном случае чистого стока ( $\bar{n}_L = 0$ ) зависимость  $I(L)$  с высокой точностью следует степенному закону  $I \sim L^{-\alpha}$ , где  $\alpha = 0.6712$ . Согласно принятой классификации из работы [4], обсуждавшейся в разделе 1.2 главы 1, значение показателя  $\alpha \approx 0.67$  ( $0 < \alpha < 1$ ) однозначно указывает на субдиффузионный режим транспорта. По мере увеличения средней плотности в правом резервуаре  $\bar{n}_L$  показатель степени в законе  $I \sim L^{-\alpha}$  увеличивается, приближаясь к единице, что соответствует диффузионному режиму ( $I \sim 1/L$ ). Это наглядно демонстрируют результаты аппроксимации для исследованных пара-

метров:

$$\begin{aligned}\bar{n}_L = 0 : \quad I &\sim L^{-0.6712} ; \\ \bar{n}_L = 1 : \quad I &\sim L^{-0.9264} ; \\ \bar{n}_L = 1.5 : \quad I &\sim L^{-0.9485} .\end{aligned}$$

Важно отметить, что для  $\bar{n}_L = 1.5$  точность степенной аппроксимации с  $\alpha \approx 0.95$  статистически неотличима от линейной зависимости стационарного тока от обратной длины цепочки  $I = 1/L$ . Таким образом, уменьшение перепада плотности  $\Delta\bar{n} = \bar{n}_1 - \bar{n}_L$  управляет плавным кроссовером от субдиффузионного к диффузионному транспорту в системе.

## 2.5 Выводы по главе

В данной главе проведено исследование стационарного тока бозонных носителей в цепочке Бозе—Хаббарда длины  $L$ , в которой первый и последний узлы соединены с резервуарами частиц, играющими роль источника и стока частиц соответственно. Анализ выполнен с использованием псевдоклассического подхода, который сводит исходную квантовую задачу к классической задаче о системе  $L$  связанных нелинейных осцилляторов, где первый и последний осцилляторы подвержены одновременному воздействию трения и стохастического возбуждения. В случае отсутствия межчастичных взаимодействий ( $g = 0$ ) аналитически рассчитаны элементы  $\rho_{l,m}$  одночастичной матрицы плотности, которые в классическом подходе соответствуют корреляционным функциям между  $l$ -м и  $m$ -м осцилляторами. Показано, что псевдоклассический подход достаточно хорошо воспроизводит квантовомеханические результаты. Также показано, что стационарный ток, определяемый недиагональными элементами стационарной одночастичной матрицы плотности, пропорционален разности плотностей частиц в резервуарах  $\Delta\bar{n} = \bar{n}_1 - \bar{n}_L$  и не зависит от длины цепочки  $L$ , что является характерным признаком баллистического транспорта. Для случая конечных межчастичных взаимодействий ( $g > 0$ ), которые делают классические осцилляторы нелинейными, методом численного моделирования обнаружено значительное подавление стационарного тока по сравнению с линейным случаем. Показано, что ток становится зависимым от длины цепочки,

и в случае малой разности  $\Delta\bar{n} \ll \bar{n}_1$  масштабируется как  $1/L$ , что свидетельствует о переходе к диффузионному режиму транспорта. Качественное объяснение смены транспортного режима дано на основе анализа спектральных плотностей осцилляторов. В отсутствие взаимодействия возбуждение коллективных мод приводит к эффективному баллистическому переносу. Наличие нелинейности разрушает коллективные моды, что проявляется в исчезновении резонансных пиков в спектрах и приводит к установлению диффузионного механизма переноса. Подчеркнуто, что переход от баллистического к диффузионному транспорту с ростом константы взаимодействия является кроссовером, а не фазовым переходом. Таким образом, проведенное исследование демонстрирует, что межчастичное взаимодействие играет определяющую роль в динамике открытых квантовых систем, управляя переходом между принципиально разными режимами транспорта и приводя к сложной зависимости стационарных характеристик системы от её параметров.

Результаты главы опубликованы в работе [82].

### Глава 3. Транспорт в ромбической цепочке

Настоящая глава расширяет исследования, представленные в предыдущей главе, рассматривая транспорт бозонных частиц через одномерную ромбическую решетку, находящуюся под воздействием внешнего магнитного поля и соединяющую два резервуара частиц (рисунок 3.1).

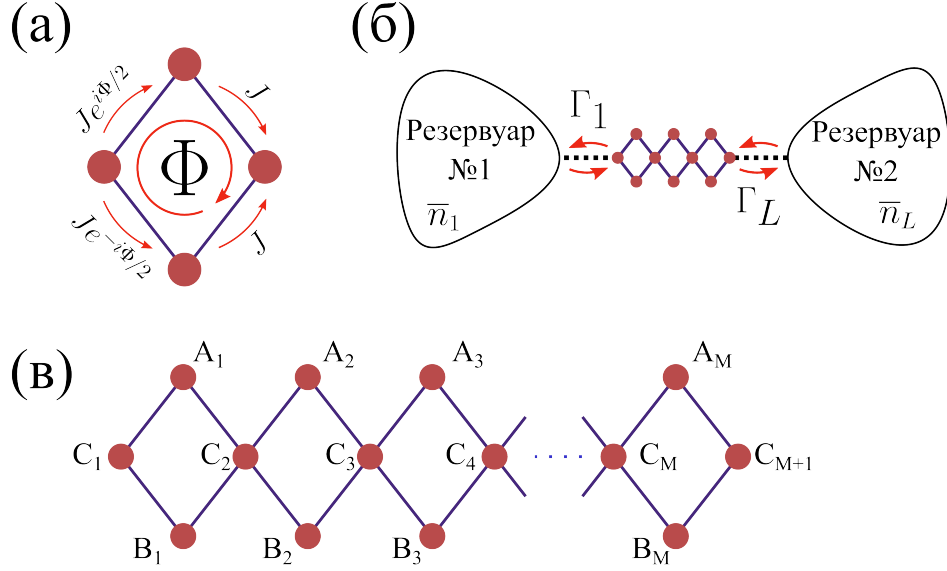


Рисунок 3.1 — (а) Элементарный блок ромбической цепочки. Элементарная ячейка содержит три узла, обозначенных как С, А и В. Поток через каждую ячейку характеризуется фазой Пайерлса  $\Phi$ , которая влияет на амплитуды туннелирования (константы перескока) между узлами. (б) Полная конфигурация системы с резервуарами: ромбическая цепочка, состоящая из  $M$  элементарных блоков (ромбов) и соединяющая два резервуара. (в) Индексация узлов в цепочке.

Известно, что спектр Блоха такой решетки состоит из двух дисперсионных зон и одной бездисперсионной (плоской) зоны, образованной локализованными состояниями. Более того, приложение внешнего магнитного поля позволяет модифицировать дисперсионное соотношение дисперсионных зон, также делая их плоскими при значении потока  $\Phi = \pi$  [113—115]. Это связывает вопросы рассматриваемые в данной главе с другими фундаментальными задачами, такими как роль плоских зон в квантовом транспорте [116—118] и устойчивость локализованных состояний в условиях межчастичного взаимодействия [113; 119; 120].



В экспериментах с ультрахолодными атомами в оптических решетках для создания эффекта, аналогичного действию магнитного поля, используется синтетическое (искусственное) магнитное поле. Поскольку атомы, такие как  $^{87}\text{Rb}$ , электрически нейтральны, на них не действует сила Лоренца — основная сила, вызывающая отклонение заряженных частиц в магнитном поле. Однако нужный эффект достигается за счёт модификации параметров решетки: если особым образом модулировать константы перескока  $J_{l,m}$  между её узлами, это приводит к возникновению фазы Пайерлса ( $\Phi$ ). Именно эта фаза заставляет нейтральные атомы «воспринимать» воздействие искусственного магнитного поля. Первую успешную экспериментальную реализацию этого подхода для ультрахолодного газа атомов рубидия в двумерной квадратной решетке представила группа И. Блоха в 2011 году [121].

Ромбическая цепочка с фазами  $\Phi = 0$  и  $\Phi = \pi$  была экспериментально реализована на нескольких физических платформах. В частности, недавно её реализация на трансмонах была продемонстрирована группой исследователей из Принстона [122]. Также аналогичные структуры были реализованы в фотонных системах [115] и в электрических цепях [123; 124].

### 3.1 Описание системы

Элементарная ячейка ромбической решетки состоит из трех узлов, обозначаемых как  $C_m$ ,  $A_m$  и  $B_m$ , где  $m = 1, 2, \dots, M$  — номер ячейки (рисунок 3.1с). Гамильтониан Бозе—Хаббарда для данной системы записывается в виде:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle l,m \rangle} (J_{l,m} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_{\ell} \hat{n}_{\ell}(\hat{n}_{\ell} - 1), \quad (3.1)$$

где  $J_{l,m}$  — матричный элемент туннелирования между узлами  $l$  и  $m$ , по модулю равный  $J$ , а остальные члены в точности совпадают с описанными ранее в (1.18). В используемой калибровке:  $J_{C_m, A_m} = J e^{i\Phi/2}$ ,  $J_{C_m, B_m} = J e^{-i\Phi/2}$ , а элементы туннелирования между узлами  $A_m$ - $C_{m+1}$  и  $B_m$ - $C_{m+1}$  вещественны и равны  $J$ . Для численного моделирования узлы решетки перенумеровываются в линейном порядке:  $C_1, A_1, B_1, C_2, A_2, B_2, \dots, C_{M+1}$ . Таким образом, общее число узлов составляет  $L = 3M + 1$ .

Частицы поступают в решетку из левого резервуара через первый узел ( $C_1$ ) и уходят в правый резервуар через последний узел ( $C_{M+1}$ ). Динамика системы описывается основным кинетическим уравнением для редуцированной матрицы плотности  $\hat{\mathcal{R}}(t)$  носителей в решетке (2.1), с описанными в предыдущей главе супероператорами Линдблада (2.3) и (2.4). Как и предыдущей главе супероператоры Линдблада параметризуются константами релаксации  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_L$  и средней плотностью частиц в резервуарах  $\bar{n}_1$ ,  $\bar{n}_L$ . Для определенности полагаем  $\bar{n}_1 > \bar{n}_L$ .

### 3.2 Случай невзаимодействующих частиц

При отсутствии взаимодействия между частицами задача сводится к одночастичной. В этом случае трансляционная инвариантность системы вдоль направления цепочки позволяет напрямую вычислить одночастичный спектр, состоящий из трёх зон [113]. Зонная структура решетки определяется уравнением:

$$\varepsilon_0(\kappa) = 0, \quad \varepsilon_{\pm}(\kappa) = \pm J \sqrt{1 + \cos(\Phi/2) \cos(\kappa - \Phi/2)}, \quad (3.2)$$

где  $\kappa$  - квазиимпульс,  $\varepsilon_0(\kappa)$  - бездисперсионная плоская зона, а  $\varepsilon_{\pm}(\kappa)$  - дисперсионные зоны. Особый интерес представляет случай  $\Phi = \pi$ , при котором дисперсионные зоны также становятся плоскими:  $\varepsilon_{\pm}(\kappa) = \pm J$ , что приводит к полной локализации волновых функций и прекращению транспорта из-за деструктивной интерференции, рисунок 3.2.

Также для элементов одночастичной матрицы плотности (SPDM)  $\rho_{lm}(t) = \text{Tr}[\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{\mathcal{R}}(t)]$  может быть получено замкнутое уравнение:

$$\frac{d}{dt} \rho_{lm}(t) = -i[\hat{H}, \hat{\rho}]_{lm} - \sum_{j=1,L} \frac{\gamma_j}{2} (\delta_{l,j} + \delta_{m,j}) \rho_{lm} + \sum_{j=1,L} \gamma_j \bar{n}_j \delta_{l,j} \delta_{m,j}, \quad (3.3)$$

где  $\hat{H}$  - одночастичный гамильтониан.

Рассмотрим сначала случай  $\Phi = 0$ , когда уравнение (3.3) можно решить аналитически. Абсолютные значения элементов стационарной SPDM представлены на рисунке 3.2. Здесь стационарные населенности узлов  $C$  одинаковы (за исключением первого и последнего узлов) и определяются уравнением:

$$\rho_{C,C}^{(m)} = \frac{\bar{n}_1 + \bar{n}_L}{2}, \quad (3.4)$$

а населенности узлов А и В составляют половину этой величины. Более того, недиагональные элементы  $\rho_{l,m}$  (здесь  $l$  и  $m$  — два ближайших узла решетки) одинаковы. Эти элементы определяют средний ток бозе-атомов через решетку, который подчиняется уравнению

$$I(\Phi = 0) = \frac{2J^2\Gamma_1\Gamma_L(\bar{n}_1 - \bar{n}_L)}{(2J^2 + \Gamma_1\Gamma_L)(\Gamma_1 + \Gamma_L)}, \quad (3.5)$$

уравнение выше значительно упрощается, если принять  $\Gamma_1 = \Gamma_L = \Gamma$ :

$$I(\Phi = 0) = \frac{J^2\Gamma}{J^2 + \Gamma^2/2} \cdot \frac{\bar{n}_1 - \bar{n}_L}{2}. \quad (3.6)$$

Сравнивая уравнение выше с уравнением (2.16), приходим к выводу, что при  $\Phi = 0$  ромбическая цепочка ведёт себя подобно простой одномерной цепочке с чётными узлами, задаваемыми «суммой» узлов А и В ромбической цепочки. Также стоит отметить, что разность  $\bar{n}_1 - \bar{n}_L$  можно переписать как  $\bar{n}_1(1 - \bar{n}_L/\bar{n}_1)$ . Тогда, нормируя стационарный ток  $I$  на  $\bar{n}_1$ , он становится функцией всего двух параметров: отношения  $\bar{n}_L/\bar{n}_1$  и отношения  $\Gamma/J$ .

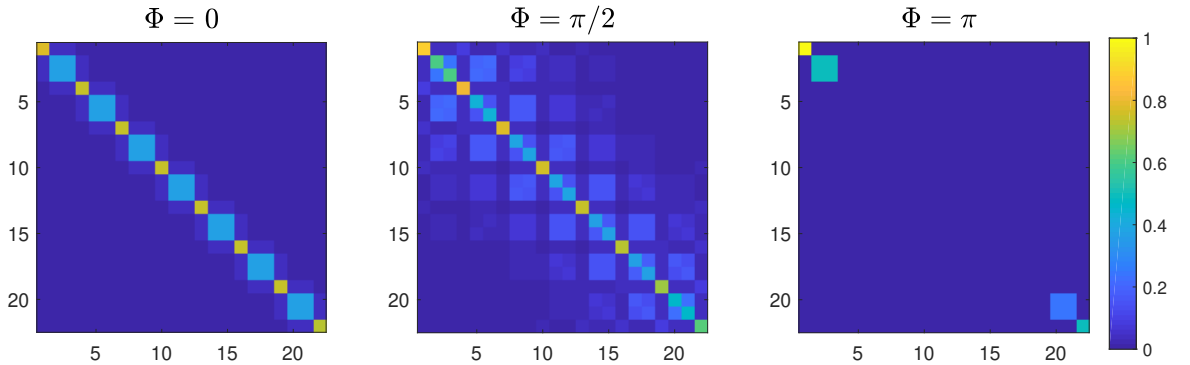


Рисунок 3.2 — Абсолютные значения элементов стационарной SPDM для  $M = 7$  при разных значениях магнитного потока. Параметры:  $\Gamma_1 = \Gamma_L = 0.4J$ ,  $\bar{n}_L/\bar{n}_1 = 0.5$ .

Далее рассмотрим случай  $\Phi = \pi$  (правая панель на рисунке 3.2). Как и ожидалось, в этом случае распространение частиц по цепочке блокируется деструктивной интерференцией, и ток строго равен нулю. Для населённостей краевых узлов имеем

$$\rho_{1,1} = \rho_{C,C}^{(1)} = \bar{n}_1, \quad \rho_{L,L} = \rho_{C,C}^{(M+1)} = \bar{n}_L, \quad (3.7)$$

а населенности соседних узлов А и В составляют половину этих значений. Также следует отметить, что димеры А–В на краях решетки находятся в антисимметричном (левый край) и симметричном (правый край) состояниях, то есть

$$\rho_{A,B} = \mp \sqrt{\rho_{A,A} \rho_{B,B}}. \quad (3.8)$$

К сожалению, простого аналитического выражения для стационарного тока при произвольном значении магнитного потока  $\Phi$  не существует. Более того, результат зависит от длины цепочки. На рисунке 3.3 представлена зависимость стационарного тока от фазы Пайерлса  $\Phi$  для цепочек разной длины ( $M \in [2, 7]$ ) в случае невзаимодействующих частиц. Видно, что с ростом  $M$  зависимости быстро сходятся к предельной кривой, которая с хорошей точностью аппроксимируется выражением:

$$I(\Phi) \approx I(\Phi = 0) \cos^2(\Phi/2), \quad (3.9)$$

где  $I(\Phi = 0)$  – ток при нулевом потоке (3.6). При  $\Phi = \pi$  ток тождественно равен нулю для любой длины решетки, что соответствует полной блокировке транспорта из-за деструктивной интерференции. Природа этой зависимости не сводится к среднему квадрату групповой скорости [110], и ее строгое обоснование остается открытой проблемой.

### 3.3 Случай взаимодействующих частиц

Для анализа транспорта при наличии межчастичного взаимодействия ( $U \neq 0$ ) используется псевдоклассическое приближение, описанное в разделе 1.4, и успешно примененное в главе 2. Исходное квантовое кинетическое уравнение в форме Линдблада сводится к многомерному уравнению Фоккера-Планка для функции распределения  $f(\mathbf{a}, \mathbf{a}^*; t)$  в фазовом пространстве  $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_L)$ , а затем – к системе стохастических уравнений Ланжевена:

$$i\dot{a}_l = \frac{\partial H}{\partial a_l^*} - i\frac{\Gamma_l}{2}(\delta_{l,1} + \delta_{l,L})a_l + \sqrt{D_l}(\delta_{l,1} + \delta_{l,L})\xi_l(t),$$

где  $H$  – классический гамильтониан, получаемый из (3.1) переходом от операторов рождения и уничтожения к паре классических голоморфных переменных

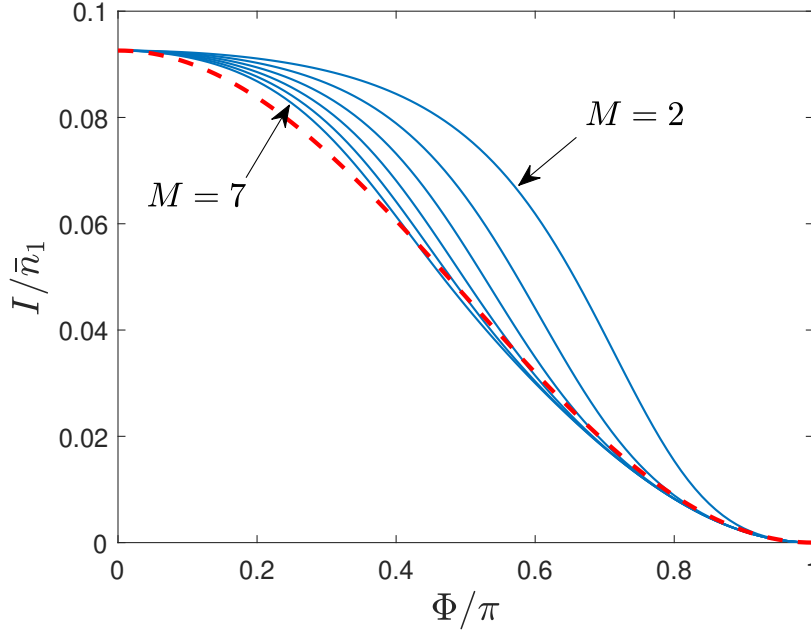


Рисунок 3.3 — Зависимость нормированного стационарного тока  $I/\bar{n}_1$  от фазы Пайерлса  $\Phi$  для невзаимодействующих частиц и разного числа ромбов  $M$ . Параметры:  $\Gamma_1 = \Gamma_L = 0.4J$ ,  $\bar{n}_L/\bar{n}_1 = 0.5$ . Пунктирная линия – формула (3.9).

$\hat{a}_l/\sqrt{\bar{n}_1} \rightarrow a_l$ ,  $\hat{a}_l^\dagger/\sqrt{\bar{n}_1} \rightarrow a_l^*$ ;  $D_l = \Gamma_l \bar{n}_l/\bar{n}_1$  – коэффициенты диффузии;  $\xi_l(t)$  – комплексный белый шум. Макроскопическая константа взаимодействия определяется как  $g = U\bar{n}_1$ .

На рисунке 3.4 показано влияние взаимодействия на стационарный ток для решетки с  $M = 5$  ( $L = 16$ ). Видно, что взаимодействие подавляет ток в области слабого поля ( $\Phi \approx 0$ ), что согласуется с результатами для линейной цепочки (глава 2) и свидетельствует о переходе от баллистического к диффузионному режиму транспорта. Напротив, в области  $\Phi \approx \pi$ , где ток для невзаимодействующих частиц стремится к нулю (и строго равен нулю при  $\Phi = \pi$ ), взаимодействие разрушает локализацию и приводит к появлению конечного тока. Это согласуется с результатами работы [113], в которой анализируется энергетический спектр двух взаимодействующих фермионов в ромбической цепочке под действием внешнего магнитного поля, а также с результатами работы [120], в которой конкретно рассматривается устойчивость локализованных состояний по отношению к взаимодействиям. Таким образом, взаимодействие разрушает интерференционные эффекты, ответственные за блокировку транспорта.

Разрушение локализации при  $\Phi = \pi$  носит динамический характер и связано с неустойчивостью локальных А-В состояний из-за взаимодействия. Этот процесс иллюстрируется рисунком 3.5, на котором показана временная динамика

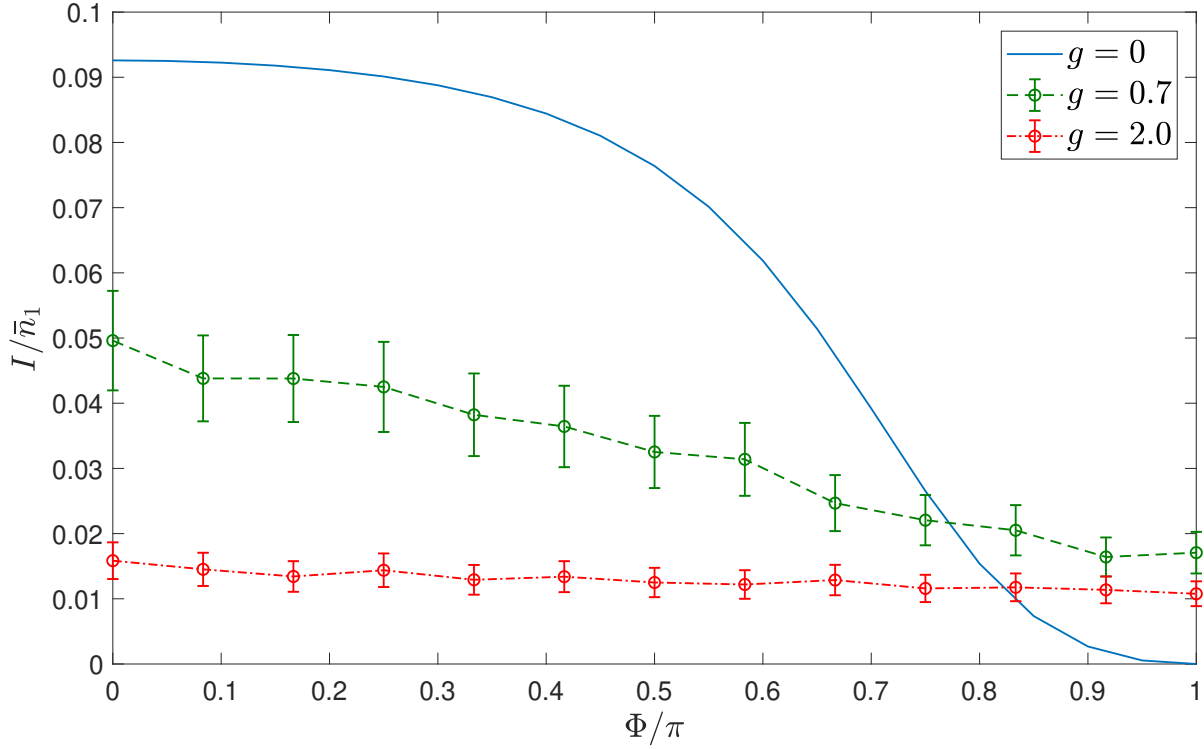


Рисунок 3.4 — Зависимость нормированного стационарного тока от фазы Пайерлса  $\Phi$  для цепочки с  $M = 5$  и разных значений макроскопической константы взаимодействия  $g$ . Параметры:  $\Gamma_1 = \Gamma_L = 0.4J$ ,  $\bar{n}_L/\bar{n}_1 = 0.5$ . Планка погрешностей указывает на статистическую ошибку метода Монте-Карло [125].

ка населенностей узлов для  $\Phi = \pi$  и  $g = 4$ . В частности, в работе [120] было показано, что антисимметричное локализованное состояние А–В подвержено динамической неустойчивости, которая приводит к возбуждению незащищённого симметричного состояния А–В. Поскольку развитие неустойчивости занимает некоторое время, в ромбической цепочке мы имеем очень длительный переходный режим при  $\Phi = \pi$ . Наблюдается длительный переходный процесс, в ходе которого происходит последовательное заполнение узлов С вдоль решетки. В течение этого переходного процесса мы наблюдаем последовательное заселение узлов С с временной задержкой, определяемой временем неустойчивости (рисунок 3.5). Когда все узлы С оказываются заселенными, система переходит в стационарный режим с диффузионным транспортом из левого резервуара в правый.

Псевдоклассическое приближение также позволяет несколько иначе взглянуть на влияние межчастичных взаимодействий на квантовый транспорт. В то время как в квантовой картине учет взаимодействий приводит к деградации когерентных свойств SPDM, в классической картине, где взаимодействующие

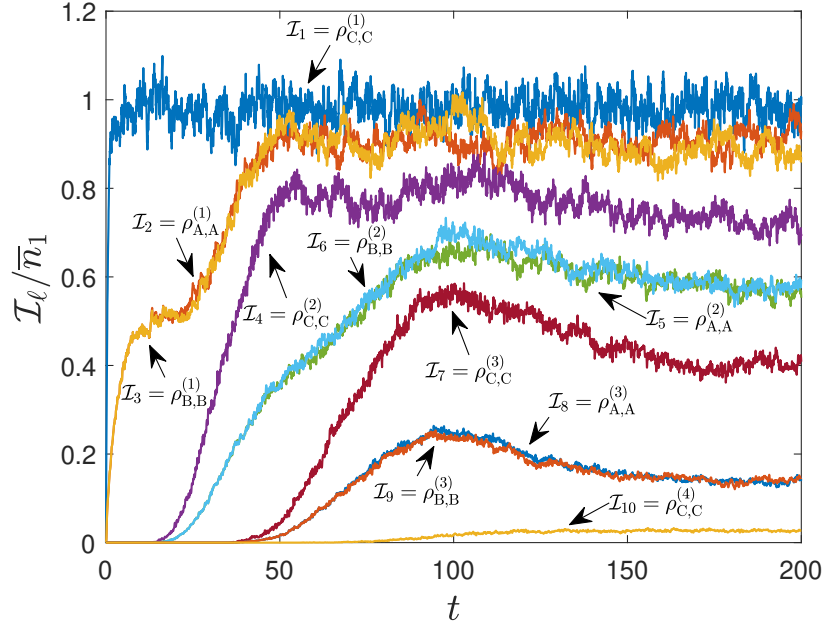


Рисунок 3.5 — Временная динамика популяций узлов (диагональных элементов SPDM) для  $\Phi = \pi$ ,  $M = 3$ ,  $g = 4$ . Параметры:  $\Gamma_1 = \Gamma_L = 0.4J$ ,  $\bar{n}_R = 0$ . Усреднение по 960 реализациям [125].

бозоны в каждом узле решетки рассматриваются как классические нелинейные осцилляторы, потеря когерентности связана с десинхронизацией между различными осцилляторами из-за того, что частота нелинейного осциллятора зависит от его амплитуды.

### 3.4 Выводы по главе

В настоящей главе в рамках псевдоклассического приближения исследован стационарный ток бозонных носителей в ромбической цепочке под действием внешнего искусственного магнитного поля, соединяющей два резервуара частиц. В случае невзаимодействующих частиц ток обусловлен интерференцией частиц, движущихся по двум альтернативным путям между узлами  $S$  соседних ячеек. При нулевом потоке интерференция конструктивна, и ток максимален. При потоке, соответствующем фазе Пайерлса  $\Phi = \pi$ , интерференция становится деструктивной, что приводит к полной блокировке транспорта. Для промежуточных значений потока ток приближенно следует зависимости  $\cos^2(\Phi/2)$ . Наличие межчастичного взаимодействия ( $g \gtrsim J$ ) кардинально изме-

няет транспортные свойства системы. Взаимодействие подавляет ток в области слабого поля, что соответствует переходу от баллистического к диффузионному режиму транспорта. В области  $\Phi \approx \pi$  взаимодействие, напротив, разрушает локализацию и приводит к появлению конечного тока. Таким образом, при умеренных взаимодействиях ток становится практически независимым от значения магнитного потока. Проведенное исследование демонстрирует, что взаимодействие играет определяющую роль в квантовом транспорте через периодические структуры со сложной зонной структурой, подавляя интерференционные эффекты и приводя к установлению универсального диффузионного режима транспорта.

Результаты главы опубликованы в работах [125—128].



## Глава 4. Одномерная цепочка с контактами

В предыдущих главах анализ тока бозе-частиц проводился в рамках стандартной открытой модели Бозе-Хаббарда, где влияние резервуаров учитывается введением супероператоров Линдблада. Эти супероператоры описывают сток и накачку частиц из/в резервуар и действуют на первый и последний узлы цепочки. В классическом приближении данная модель соответствует ситуации, когда первый и последний осцилляторы подвержены трению и возбуждаются белым шумом, интенсивность которого определяется средней плотностью частиц в соответствующих резервуарах [82]. Однако стандартная открытая модель Бозе—Хаббарда подразумевает марковское приближение, которое не всегда оправдано, особенно для случая низкотемпературных резервуаров с почти сконденсированными бозе-частицами. В настоящей главе предлагается решение этой проблемы за счет введения немарковской модели открытой цепочки Бозе—Хаббарда, которая представляет собой бозонный аналог немарковской модели для ферми-частиц, обсуждавшейся в работах [90—93]. В данной главе показано, что в псевдоклассическом приближении предлагаемая модель использует вместо белого шума узкополосный шум с хорошо определённой средней частотой. Это приближает нас к экспериментальным условиям, описанным в работе [29], и одновременно к ситуации, с которой мы сталкиваемся в физике твердого тела для фермионов с четко определенной энергией Ферми. В частности, подобно фермионному случаю, мы можем рассмотреть явление резонансного туннелирования [16].

### 4.1 Модель системы с контактами

Рассмотрим усложненную модель открытой системы Бозе—Хаббарда, в которой резервуары смоделированы как кольцевые контакты (рисунок 4.1). Каждый контакт моделируется одномерной цепочкой длины  $M$ , замкнутой в кольцо. Эти контакты присоединены к первому или последнему узлу основной одномерной цепочки длины  $L$  [129]. Бозоны могут туннелировать между узлами цепочки и между узлами кольца с интенсивностью  $J_s$  и  $J_r$  соответственно,

при этом  $J_s \sim J_r$ , а связь между цепочкой и кольцами контролируется малой константой  $\varepsilon \ll J_s, J_r$ .

Для каждого из колец можно определить химический потенциал и температуру; если температура или химический потенциал левого и правого колец отличаются, то можно наблюдать направленный ток частиц через цепочку.

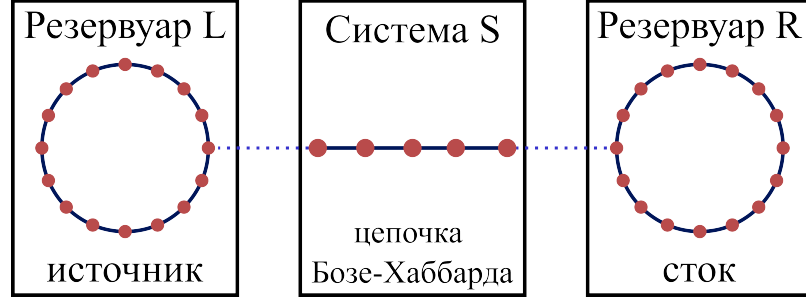


Рисунок 4.1 — Схематическое изображение цепочки Бозе–Хаббарда с кольцевыми контактами.

Динамика системы описывается основным кинетическим уравнением для полной матрицы плотности  $\hat{\mathcal{R}}(t)$ :

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{R}}}{\partial t} = -i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{R}}] + \sum_{j=L,R} \left[ \hat{\mathcal{L}}_d^{(j)}(\hat{\mathcal{R}}) + \hat{\mathcal{L}}_g^{(j)}(\hat{\mathcal{R}}) \right], \quad (4.1)$$

где полный гамильтониан  $\hat{\mathcal{H}}$  имеет вид:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_s + \sum_{j=L,R} \hat{\mathcal{H}}_r^{(j)} + \sum_{j=L,R} \hat{\mathcal{H}}_\varepsilon^{(j)}. \quad (4.2)$$

Гамильтониан цепочки  $\hat{\mathcal{H}}_s$  задаётся выражением:

$$\hat{\mathcal{H}}_s = \delta \sum_{\ell=1}^L \hat{n}_\ell - \frac{J_s}{2} \sum_{\ell=1}^{L-1} (\hat{a}_{\ell+1}^\dagger \hat{a}_\ell + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_{\ell=1}^L \hat{n}_\ell (\hat{n}_\ell - 1), \quad (4.3)$$

где  $\delta$  — энергия на узле, которая в данной системе выступает как аналог напряжения затвора, а  $\hat{a}_\ell^\dagger$  и  $\hat{a}_\ell$  — бозонные операторы рождения и уничтожения, действующие на узле цепочки с индексом  $\ell$ . Гамильтонианы колец  $\hat{\mathcal{H}}_r^{(j)}$  записываются в терминах бозонных операторов  $\hat{b}_k^\dagger$  и  $\hat{b}_k$ , действующих в пространстве Фока, построенном на блоховских состояниях, т.е. индекс  $k$  указывает на определенную моду, а не узел кольца:

$$\hat{\mathcal{H}}_r^{(j)} = \sum_{k=1}^M E_k \hat{b}_k^{(j)\dagger} \hat{b}_k^{(j)}, \quad E_k = -J_r \cos \left( \frac{2\pi k}{M} \right). \quad (4.4)$$

Гамильтонианы связи  $\widehat{\mathcal{H}}_\varepsilon^{(j)}$ :

$$\widehat{\mathcal{H}}_\varepsilon^{(j)} = -\frac{\varepsilon}{2\sqrt{M}} \hat{a}_{\ell_j}^\dagger \sum_{k=1}^M \hat{b}_k^{(j)} + \text{H.c.}, \quad (4.5)$$

где  $\ell_j = 1$  для левого кольца ( $j = \text{L}$ ) и  $\ell_j = L$  для правого ( $j = \text{R}$ ). Далее полагаем  $J_s = J_r \equiv J = 1$ ,  $\delta = 0$ ,  $U = 0$  если не оговорено иное. Таким образом, все константы энергии измеряются в единицах  $J$ .

Термодинамические свойства резервуаров задаются супероператорами Линдблада:

$$\widehat{\mathcal{L}}_d^{(j)}(\widehat{\mathcal{R}}) = -\frac{\gamma}{2} \sum_{k=1}^M (\bar{n}_{j,k} + 1) \left( \hat{b}_k^{(j)\dagger} \hat{b}_k^{(j)} \widehat{\mathcal{R}} - 2\hat{b}_k^{(j)} \widehat{\mathcal{R}} \hat{b}_k^{(j)\dagger} + \widehat{\mathcal{R}} \hat{b}_k^{(j)\dagger} \hat{b}_k^{(j)} \right), \quad (4.6)$$

$$\widehat{\mathcal{L}}_g^{(j)}(\widehat{\mathcal{R}}) = -\frac{\gamma}{2} \sum_{k=1}^M \bar{n}_{j,k} \left( \hat{b}_k^{(j)} \hat{b}_k^{(j)\dagger} \widehat{\mathcal{R}} - 2\hat{b}_k^{(j)\dagger} \widehat{\mathcal{R}} \hat{b}_k^{(j)} + \widehat{\mathcal{R}} \hat{b}_k^{(j)} \hat{b}_k^{(j)\dagger} \right), \quad (4.7)$$

где

$$\bar{n}_{j,k} = \frac{1}{e^{\beta(E_k + \mu_j)} - 1}. \quad (4.8)$$

Супероператоры Линдблада (4.6) и (4.7) обеспечивают релаксацию числа частиц в кольце к распределению Бозе—Эйнштейна (4.8) с заданным химическим потенциалом  $\mu$  и обратной температурой  $\beta$ . Скорость, с которой происходит эта релаксация, определяется константой  $\gamma$ . В дальнейшем в качестве управляющего параметра используется средняя плотность частиц в кольце  $\bar{n}_j = \sum_{k=1}^M \bar{n}_{j,k}/M$ , которая вместе с температурой однозначно определяет химический потенциал  $\mu$ . Далее будем обозначать плотности частиц в левом и правом кольцах через  $\bar{n}_\text{L}$  и  $\bar{n}_\text{R}$  соответственно.

## 4.2 Одночастичная матрица плотности

### 4.2.1 Структура и динамика SPDM

Для случая невзаимодействующих частиц уравнение (4.1) может быть сведено к уравнению на одночастичную матрицу плотности (single particle density

matrix, SPDM). Для простоты предположим, что к цепочке присоединен только левый контакт, тогда полная SPDM системы имеет блочную структуру:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \hat{\rho}_r & \hat{\rho}_\varepsilon \\ \hat{\rho}_\varepsilon^\dagger & \hat{\rho}_s \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

где  $\hat{\rho}_s$  – SPDM цепочки, с элементами определяемыми как  $\rho_{l,l'} = \text{Tr}[\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \hat{\mathcal{R}}]$ ;  $\hat{\rho}_r$  – SPDM кольца, с элементами определяемыми как  $\rho_{q,q'} = \text{Tr}[\hat{b}_q^\dagger \hat{b}_{q'} \hat{\mathcal{R}}]$ ;  $\hat{\rho}_\varepsilon$  – блок, описывающий корреляции между цепочкой и кольцом, с элементами определяемыми как  $\rho_{q,l} = \text{Tr}[\hat{b}_q^\dagger \hat{a}_l \hat{\mathcal{R}}]$ . Динамика SPDM, с учетом блочной структуры введенной выше, описывается системой уравнений:

$$\frac{\partial \hat{\rho}_s}{\partial t} = -i[\hat{H}_s, \hat{\rho}_s] - i\varepsilon \left( \hat{V}_1^\dagger \hat{\rho}_\varepsilon - \hat{\rho}_\varepsilon^\dagger \hat{V}_1 \right), \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho}_\varepsilon}{\partial t} = -i\hat{H}_r \hat{\rho}_\varepsilon + i\hat{\rho}_\varepsilon \hat{H}_s - \frac{\gamma}{2} \hat{\rho}_\varepsilon - i\varepsilon \left( \hat{V}_1 \hat{\rho}_s - \hat{\rho}_r \hat{V}_1 \right), \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho}_r}{\partial t} = -i[\hat{H}_r, \hat{\rho}_r] - i\varepsilon \left( \hat{V}_1 \hat{\rho}_\varepsilon^\dagger - \hat{\rho}_\varepsilon \hat{V}_1^\dagger \right) + \gamma \left( \hat{\rho}_r^{(0)} - \hat{\rho}_r \right), \quad (4.12)$$

где  $\hat{H}_s$  – одночастичный гамильтониан цепочки

$$\hat{H}_s = -\frac{J_s}{2} \sum_{\ell=1}^L (|1+\ell\rangle\langle\ell| + c.c.), \quad (4.13)$$

$\hat{H}_r$  – одночастичный гамильтониан кольца

$$\hat{H}_r = -J_r \sum_{k=1}^M \cos\left(\frac{2\pi k}{M}\right) |k\rangle\langle k|, \quad (4.14)$$

$\hat{V}_1$  – оператор связи кольца с крайним левым узлом цепочки,

$$\hat{V}_1 = \frac{1}{2\sqrt{M}} \sum_{k=1}^M |k\rangle\langle\ell=1|, \quad (4.15)$$

$\hat{\rho}_r^{(0)}$  – равновесная SPDM кольца

$$\hat{\rho}_r^{(0)} = \sum_{k=1}^M \frac{|k\rangle\langle k|}{e^{\beta[J \cos(2\pi k/M) - \mu]} - 1}. \quad (4.16)$$

### 4.2.2 Обобщение на два контакта и вычисление тока

Систему уравнений (4.10) — (4.12) можно легко обобщить на случай двух контактов, в котором второй контакт присоединен к последнему узлу цепочки. Для того чтобы рассмотреть случай с двумя контактами, необходимо перейти от  $\hat{\rho}_r$  к  $\hat{\rho}_r^j$ , где  $j$  принимает значение  $j = L$  для левого контакта и  $j = R$  для правого контакта. В этом случае результирующая SPDM будет иметь размер  $(M + L + M) \times (M + L + M)$ , и её можно будет разбить на девять блоков, а не на четыре, как в случае с одним контактом. Ток частиц через цепочку  $I(t)$  вычисляется через элементы SPDM системы:

$$I(t) = \frac{1}{L-1} \text{Tr}[\hat{\rho}_s(t) \hat{I}], \quad I_{l,m} = J \frac{\delta_{l,m+1} - \delta_{l,m-1}}{2i}, \quad (4.17)$$

где  $I_{l,m}$  - матричные элементы оператора  $\hat{I}$ .

## 4.3 Псевдоклассическое приближение

### 4.3.1 Уравнение Фоккера-Планка и уравнения Ланжевена

Для анализа системы в случае взаимодействующих частиц снова применим псевдоклассическое приближение, описанное в главе 1 (раздел 1.4) и главе 2 (раздел 2.2). В рамках данного приближения основное кинетическое уравнение (4.1) переходит в уравнение Фоккера-Планка на функцию Вигнера  $f = f(\mathbf{a}, \mathbf{a}^*, \mathbf{b}^{(j)}, (\mathbf{b}^{(j)})^*; t)$ . Уравнение Фоккера-Планка имеет следующий вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \{H, f\} + \sum_{j=L,R} \left[ \mathcal{D}^{(j)}(f) + \mathcal{G}^{(j)}(f) \right], \quad (4.18)$$

где  $H$  – классический гамильтониан, получаемый в результате замены операторов рождения и уничтожения классическими каноническими переменными,

$\mathcal{D}^{(j)}$  и  $\mathcal{G}^{(j)}$  – диффузионный и диссипативный члены:

$$\mathcal{D}^{(j)}(f) = \gamma \sum_{k=1}^M \left( \bar{n}_{j,k} + \frac{1}{2} \right) \frac{\partial^2 f}{\partial b_k^{(j)} \partial (b_k^{(j)})^*}, \quad (4.19)$$

$$\mathcal{G}^{(j)}(f) = \frac{\gamma}{2} \sum_{k=1}^M \left( b_k^{(j)} \frac{\partial f}{\partial b_k^{(j)}} + 2f + (b_k^{(j)})^* \frac{\partial f}{\partial (b_k^{(j)})^*} \right). \quad (4.20)$$

Индекс  $j$  в уравнениях (4.19) и (4.20), аналогично более ранним выкладкам в этой главе, указывает на левый или правый контакт. Полученные диффузионный (4.19) и диссипативный (4.20) члены аналогичны (2.9) и (2.10) и также описывают диффузию и трение, действующие на осцилляторы в кольцах. Снова перейдем от уравнения Фоккера-Планка (4.18) к системе уравнений Ланжевена:

$$i db_k^{(j)} = \left( E_k - i \frac{\gamma}{2} \right) b_k^{(j)} dt + \sqrt{\frac{\gamma \bar{n}_{j,k}}{2}} d\xi_k^{(j)} - \frac{\varepsilon}{2\sqrt{M}} a_{\ell_j} dt, \quad (4.21)$$

$$i da_1 = \left( \delta a_1 - \frac{J}{2} a_2 + g|a_1|^2 a_1 \right) dt - \frac{\varepsilon}{2} d\chi_L, \quad (4.22)$$

$$i da_l = \left( \delta a_l - \frac{J}{2} (a_{l-1} + a_{l+1}) + g|a_l|^2 a_l \right) dt, \quad 1 < l < L, \quad (4.23)$$

$$i da_L = \left( \delta a_L - \frac{J}{2} a_{L-1} + g|a_L|^2 a_L \right) dt - \frac{\varepsilon}{2} d\chi_R, \quad (4.24)$$

где  $\chi_j(t) = M^{-1/2} \sum_k b_k^{(j)}(t)$ ,  $g = U\bar{n}_L$ ,  $d\xi_k^{(j)}(t)$  – комплексный белый шум, причём

$$\langle d\xi_k^{(j)}(t) d\xi_{k'}^{(j')}(t') \rangle = 2\delta_{k,k'} \delta_{j,j'} \delta(t-t') dt, \quad (4.25)$$

а  $\langle \dots \rangle$  обозначает усреднение по различным реализациям случайного процесса. Величина  $\chi_j$  должна быть рассмотрена как случайная, так как она представляет собой сумму переменных  $b_k$ , которые подчиняются уравнениям Ланжевена (4.21).

### 4.3.2 Анализ характера шума и влияние температуры

Обсудим уравнения (4.21) – (4.24) подробнее для случая  $g = 0$ . При  $\varepsilon = 0$  уравнение (4.21) описывает затухающий гармонический осциллятор под воздействием случайной внешней силы. В этом случае существует стационарное

решение, для которого  $\langle b_k^* b_k \rangle = \bar{n}_k$ , где индекс кольца  $j = L, R$  опущен для краткости. Уравнения (4.22) — (4.24) представляют собой уравнения движения для цепочки связанных линейных осцилляторов, на первый и последний из которых действуют стохастические силы  $\chi_L(t)$  и  $\chi_R(t)$  соответственно.

Охарактеризуем стохастическую силу  $\chi_j(t)$  её спектральной плотностью  $P_j(\nu) = |\chi_j(\nu)|^2$ , где  $\chi_j(\nu)$  — преобразование Фурье от  $\chi_j(t)$ . На рисунке 4.2 представлена спектральная плотность  $P(\nu)$  для одного из идентичных контактов при фиксированном  $\gamma = 0.1$  и трёх различных значениях обратной температуры  $\beta = 0.1, 1, 10$ . Поскольку контакты идентичны, мы ограничимся рассмотрением только одного контакта. Из рисунка 4.2 видно, что конденса-

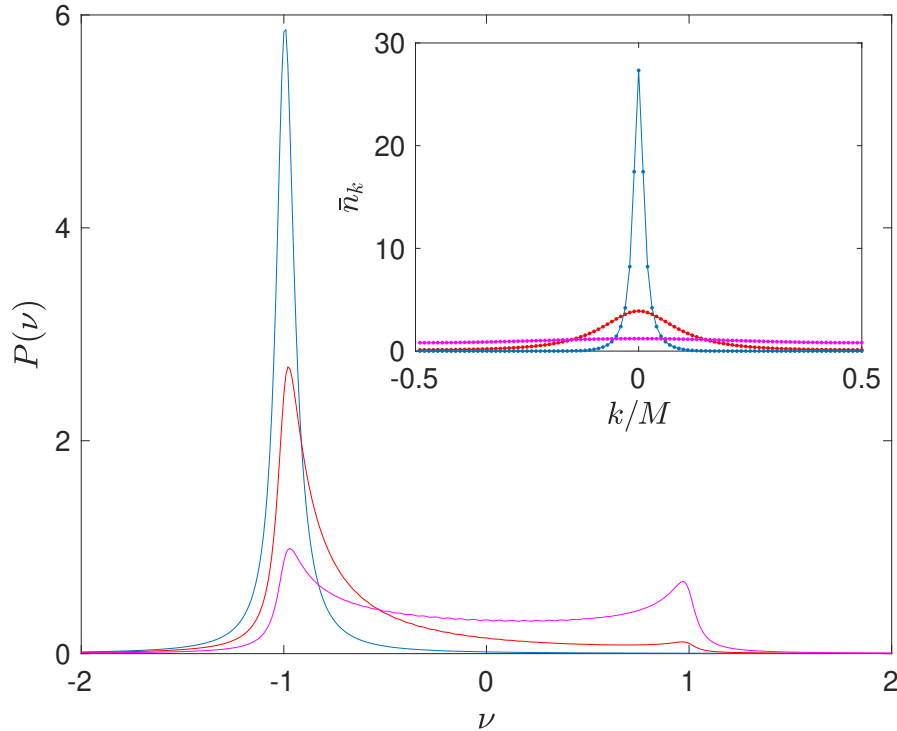


Рисунок 4.2 — Спектральная плотность стохастической силы  $\chi(t)$  для  $\bar{n} = 1$ ,  $\gamma = 0.1$ ,  $M = 100$  и различных  $\beta$  (синяя линия  $\beta = 10$ , красная линия  $\beta = 1$ , пурпурная линия  $\beta = 0.1$ ). На вставке: распределение Бозе—Эйнштейна для тех же температур.

ция бозонов в низкоэнергетические блоховские состояния приводит к изменению характера шума  $\chi(t)$  от широкополосного к узкополосному. Также стоит отметить, что дальнейшее понижение температуры ниже  $1/\beta = 0.1$  не влияет на вид кривой, поскольку в пределе  $\beta \rightarrow \infty$  её форма определяется значением  $\gamma$ , а не шириной распределения квазиимпульса, которая стремится к  $\delta$ -функции. Аналогичное утверждение справедливо и для температур выше  $1/\beta = 10$ , поскольку распределение квазиимпульса уже практически является плоским при

$\beta = 0.1$ . Стоит отметить, что для цепочки с кольцевыми контактами также существует некоторая свобода в выборе параметра  $\hbar_{\text{eff}} = 1/\bar{n}$ , о чем уже упоминалось в разделе 2.2; например, как это сделано в данной главе, можно принять  $\bar{n} = \bar{n}_L$ .

## 4.4 Стационарный ток

### 4.4.1 Зависимость тока от константы релаксации

В данном разделе рассматривается поведение стационарного тока  $I = I(t \rightarrow \infty)$ . На рисунке 4.3 представлена типовая зависимость стационарного тока от константы релаксации  $\gamma$  и обратной температуры  $\beta$  при фиксированной длине колец  $M$ . Рассмотрим предел  $\gamma \rightarrow 0$ , в котором стационарный ток

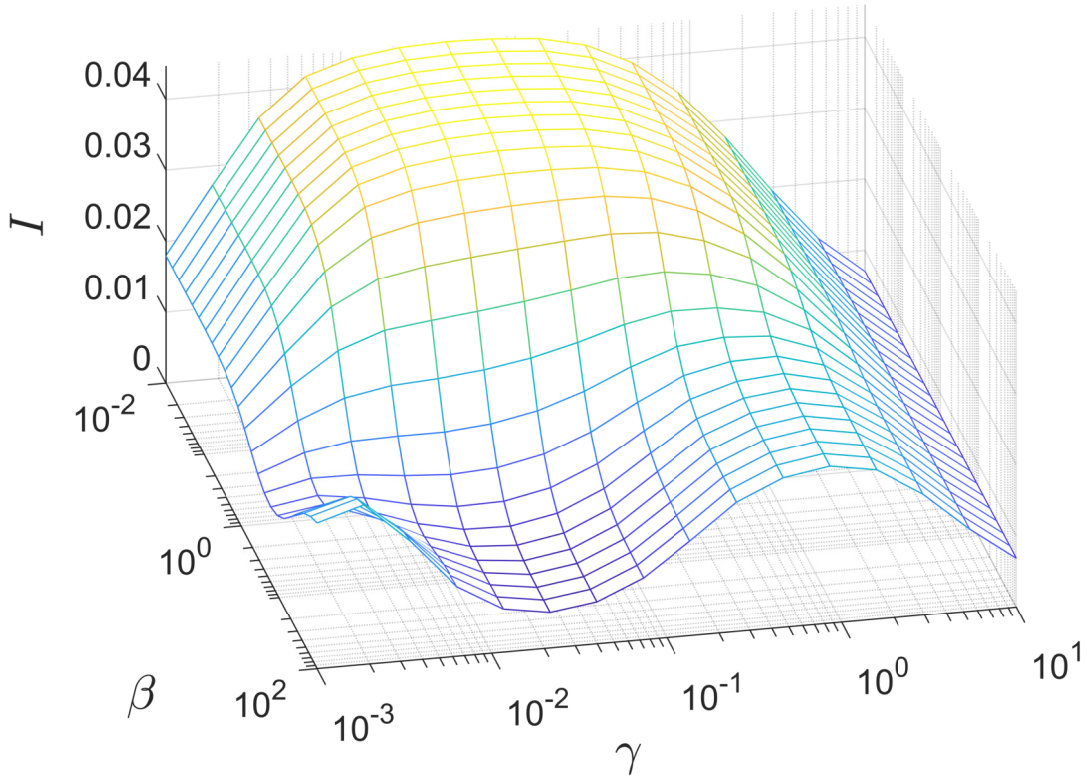


Рисунок 4.3 — Зависимость стационарного тока от  $\gamma$  и  $\beta$  для  $L = 5$ ,  $\varepsilon = 0.4$ ,  $\bar{n}_L = 1$ ,  $\bar{n}_R = 0.1$ , размер колец  $M = 100$ .

стремится к нулю,  $I \rightarrow 0$ . Данное поведение является прямым следствием конеч-



ности моделируемых резервуаров, где они представлены кольцами из  $M$  узлов. Механизм этого эффекта заключается в следующем: при  $\gamma \rightarrow 0$  разрешается спектр резервуара и его дискретные уровни не совпадают с дискретными уровнями системы, что приводит к подавлению тока. Этот эффект, связанный с дискретизацией спектра конечных резервуаров, подробно исследован в ряде работ. В частности, было показано, что критическое значение параметра релаксации  $\gamma$ , при котором наблюдается переход к режиму с подавленным током, уменьшается с ростом размера резервуара [91; 130; 131]. Таким образом, поведение стационарного тока при  $\gamma < 10^{-2}$  на рисунке 4.3 обусловлено конечным размером резервуаров.

Стоит подчеркнуть, что рассматриваемый случай конечных резервуаров не является лишь артефактом численной реализации. Модель конечных резервуаров, в свою очередь связанных с теперь уже марковскими внешними резервуарами через релаксацию, представляет также самостоятельный физический интерес. Она соответствует ряду реальных экспериментальных конфигураций в мезоскопических системах. Например, в работах [130; 132] рассматривается транспорт электронов через молекулярный мостик, соединяющий два контакта, в рамках подхода, в котором конечные электроды описываются дискретным набором своих собственных состояний. Эти состояния, в свою очередь, явно рассматриваются как открытая система, обменивающаяся частицами и энергией с окружением посредством релаксационных членов в основном кинетическом уравнении на матрицу плотности. Важно отметить, что ключевое отличие исследуемой модели от стандартного подхода заключается в явном учёте структуры резервуаров. Роль резервуаров здесь играют кольца с дискретным спектром, равновесие в которых поддерживается линдбладовскими членами. Это делает исследуемую модель немарковской по отношению к бозе-хаббардовской цепочке, поскольку динамика последней определяется не мгновенным, а запаздывающим откликом структурированных резервуаров.

Менее очевидным является исчезновение тока при  $\gamma \rightarrow \infty$ . Формально этот результат может быть получен с помощью борновского и марковского приближений, применённых теперь уже непосредственно к связи цепочки с кольцами. В этом пределе кольца могут быть исключены из явного рассмотрения, и задача сводится к стандартной открытой модели Бозе—Хаббарда, в которой цепочка непосредственно связана с бесструктурными резервуарами че-

рез эффективную константу релаксации:

$$\Gamma = \varepsilon^2/\gamma. \quad (4.26)$$

Стационарный ток в такой модели для невзаимодействующих частиц, как показано в главе 2, определяется выражением (2.16):

$$I = \frac{\Gamma J^2}{J^2 + \Gamma^2} \cdot \frac{\bar{n}_1 - \bar{n}_L}{2}.$$

Отсюда непосредственно видно, что при  $\gamma \rightarrow \infty$  ( $\Gamma \rightarrow 0$ ) ток стремится к нулю как  $I \sim 1/\gamma$ .

#### 4.4.2 Зависимость тока от температуры

Теперь проанализируем зависимость стационарного тока от температуры. При умеренных значениях  $\gamma$  на рисунке 4.3 наблюдается выраженная ступенька при  $\beta \sim J$ , где ток уменьшается на порядок величины (см. также рисунок 4.5). Этот ступенька обусловлена бозе-конденсацией в контактах при низких температурах.

Для детального анализа воспользуемся псевдоклассическим приближением. На рисунке 4.4 представлены спектральные плотности стохастических сил  $\chi_L(t)$  и  $\chi_R(t)$  (красные линии), а также спектральные плотности осцилляторов цепочки (синие линии), которые представляют собой квадрат модуля Фурье-образа  $a_\ell(t)$ . Левая колонка соответствует случаю  $\beta = 0.1$ . При этом значении обратной температуры можно идентифицировать собственные частоты  $\omega_i$  и собственные моды  $X^{(i)}$  изолированной цепочки, получаемые диагонализацией одночастичного гамильтониана цепочки  $H_s$ :

$$\hat{H}_s X^{(i)} = \omega_i X^{(i)}. \quad (4.27)$$

Положения пиков, хорошо аппроксимируемые лоренцианами с шириной  $\sim \varepsilon^2$ , совпадают с  $\omega_i$ , а высоты пиков пропорциональны  $|X_\ell^{(i)}|^2$ . Для  $\beta = 0.1$  широкополосная стохастическая сила возбуждает все собственные моды цепочки. Правый столбец на рисунке 4.4 относится к случаю  $\beta = 10$ , где узкополосная стохастическая сила способна возбудить только низшую моду. Поскольку

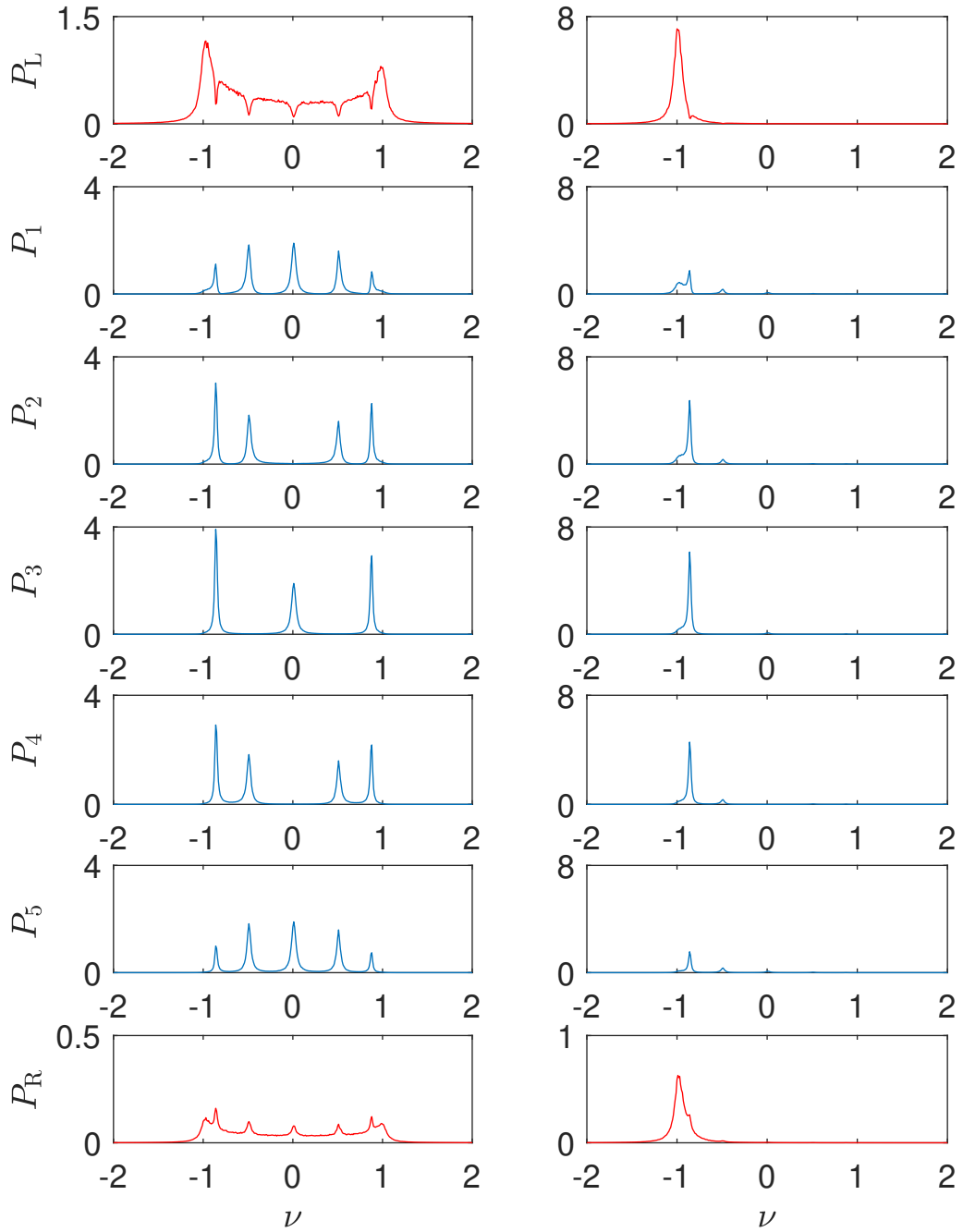


Рисунок 4.4 — Спектральные плотности шума и осцилляторов цепочки для  $\beta = 0.1$  (слева) и  $\beta = 10$  (справа).

групповая скорость на дне зоны проводимости стремится к нулю, в низкотемпературном пределе наблюдается значительно меньший ток. В представленных численных данных также проявляется эффект обратного влияния цепочки на кольца. Это влияние уменьшается с уменьшением  $\varepsilon$ . Однако даже для рассматриваемого значения  $\varepsilon = 0.4$  им можно пренебречь. Таким образом,

спектральная плотность стохастической силы может быть аппроксимирована зависимостью, показанной на рисунке 4.2 (см. также раздел 4.5).

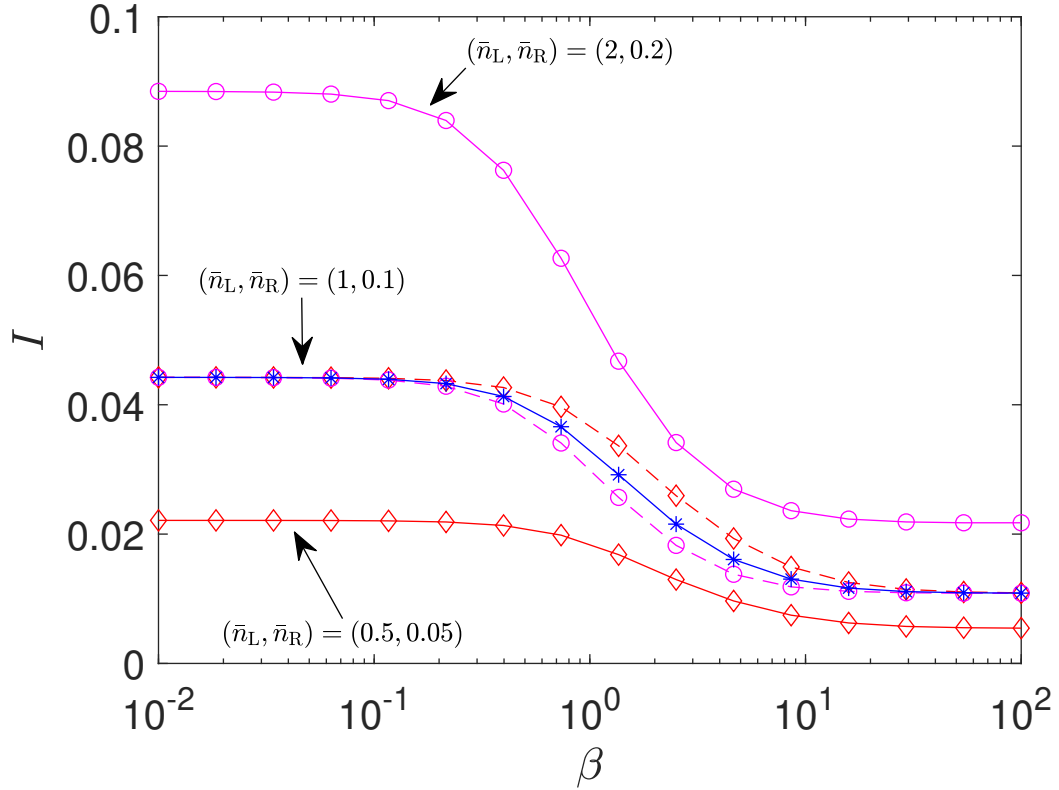


Рисунок 4.5 — Стационарный ток как функция обратной температуры для  $\gamma = 0.1$  и различных плотностей частиц:  $(\bar{n}_L, \bar{n}_R) = (2, 0.2)$  (верхняя сплошная линия с маркерами в виде кружков),  $(1, 0.1)$  (средняя сплошная линия с маркерами в виде звездочек),  $(0.5, 0.05)$  (нижняя сплошная линия с маркерами в виде ромбов). Штриховые линии – верхняя и нижняя кривые, умноженные на множители  $1/2$  и  $2$  соответственно.

#### 4.4.3 Зависимость тока от плотности частиц

Наконец, обсудим зависимость тока от плотности частиц в резервуарах. Из общих соображений следует, что стационарный ток через цепочку пропорционален разности  $\bar{n}_L - \bar{n}_R$ . Также хорошо известно, что при большей плотности частиц конденсация бозонов происходит при более высокой температуре. Следовательно, пропорциональное увеличение параметров  $\bar{n}_L$  и  $\bar{n}_R$  приведёт к пропорциональному увеличению тока. В подтверждение этого утверждения на

рисунке 4.5 показан ток как функция обратной температуры для различных плотностей частиц в резервуарах. Видно, что после линейного масштабирования вертикальной оси и соответствующего нелинейного масштабирования температурной оси все три кривые совпадают в областях больших и малых  $\beta$ .

#### 4.5 Немарковское основное кинетическое уравнение

Для невзаимодействующих бозонов вывод основного кинетического уравнения для одночастичной матрицы плотности цепочки

$$\rho_{l,l'} = \text{Tr}[\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \hat{\mathcal{R}}], \quad 1 \leq l, l' \leq L, \quad (4.28)$$

аналогичен выводу для фермионных носителей [91; 92]. Простая дифференциальная форма основного кинетического уравнения может быть получена только при выполнении определенных предположений, известных как марковское и борновское приближения. В рамках борновского приближения, которое предполагает слабую связь между цепочкой и резервуарами, обратным воздействием системы на резервуары можно пренебречь. Это позволяет аппроксимировать резервуары равновесными состояниями, в частности, использовать для одночастичной матрицы плотности бозонов в резервуарах равновесную матрицу плотности  $\hat{\rho}_r^{(0)}$  из уравнения (4.16)), определяемую распределением Бозе—Эйнштейна (4.8). Марковское же приближение, пренебрегающее эффектами памяти в динамике резервуаров, обеспечивает локальность полученного уравнения по времени.

Согласно [91; 92], основное кинетическое уравнение для одночастичной матрицы плотности носителей в цепочке в борновском приближении имеет вид:

$$\frac{\partial \hat{\rho}_s}{\partial t} = -i[\hat{H}_s, \hat{\rho}_s] + \varepsilon^2 \sum_{\ell=1,L} (\hat{K}_\ell + \hat{K}_\ell^\dagger), \quad (4.29)$$

где  $\hat{H}_s$  — одночастичный гамильтониан цепочки (4.13), а оператор  $\hat{K}_\ell$  определяется выражением:

$$\hat{K}_\ell = \frac{|\ell\rangle\langle\ell|}{4} \int_{-t}^0 d\tau e^{\frac{\gamma}{2}\tau} [\mathcal{J}_F(J_r\tau) \hat{\mathbb{1}}_s - \mathcal{J}_0(J_r\tau) \hat{\rho}_s(\tau + t)] \hat{U}_s(\tau), \quad (4.30)$$

где  $\mathcal{J}_0$  – функция Бесселя первого рода нулевого порядка;  $\hat{\mathbb{1}}_s$  – единичная матрица размерности  $L \times L$ ;  $\hat{U}_s(\tau) = \exp(-i\hat{H}_s\tau)$  – оператор эволюции;  $\mathcal{J}_F$  задается выражением:

$$\mathcal{J}_F(J_{\text{r}}t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \frac{e^{-iJ_{\text{r}} \cos(\kappa)t}}{e^{\beta[J_{\text{r}} \cos(\kappa) + \mu]} - 1}. \quad (4.31)$$

Если пренебречь эффектами памяти, интегро-дифференциальное уравнение (4.29) преобразуется в марковское основное кинетическое уравнение. Формально это осуществляется с помощью общего соотношения для медленно меняющейся функции:

$$\int_{-t}^0 d\tau e^{\frac{\gamma}{2}\tau} \mathcal{A}(\tau + t) \approx \frac{2}{\gamma} \mathcal{A}(t), \quad (4.32)$$

которое становится точным в пределе  $\gamma \rightarrow \infty$ . В результате получаем:

$$\frac{\partial \hat{\rho}_s}{\partial t} = -i[\hat{H}_s, \hat{\rho}_s] - \Gamma \sum_{\ell=1, L} \left( \frac{1}{2} \{ |\ell\rangle \langle \ell|, \hat{\rho}_s \} - \bar{n}_{\ell} |\ell\rangle \langle \ell| \right), \quad (4.33)$$

где  $\Gamma = \varepsilon^2/\gamma$ ;  $\{..., \dots\}$  обозначает антикоммутатор. Уравнение (4.33) – другая форма записи уравнения (2.14), которое, как показано в главе 2, допускает аналитическое решение, приводящее к стационарному току (2.16).

Интересно обсудить применимость борновского и марковского приближений в связи с численными данными, представленными на рисунке 4.3. Сплошные линии на рис. 4.6 представляют сечения рисунка 4.3 для  $\beta = 0.1$  (высокая температура),  $\beta = 1$  (умеренная температура) и  $\beta = 10$  (низкая температура). Пунктирная линия соответствует решению, полученному на основе марковского уравнения ((4.33)). Видно, что марковское приближение справедливо лишь для достаточно больших значений  $\gamma > 5$ . В отличие от него, немарковское уравнение ((4.29)) остается адекватным вплоть до  $\gamma \approx 0.1$ . Следует отметить, что для описания ситуации при  $\gamma < 0.1$  также может быть использовано немарковское уравнение, однако это требует увеличения размера колец  $M$ , поскольку теория была получена в пределе  $M \rightarrow \infty$ . Таким образом, численная реализация с  $M = 100$  позволяет корректно описывать систему при  $\gamma \gtrsim 0.1$ . Немарковское основное кинетическое уравнение особенно эффективно для описания явления резонансного туннелирования, которое будет рассмотрено в следующем разделе.

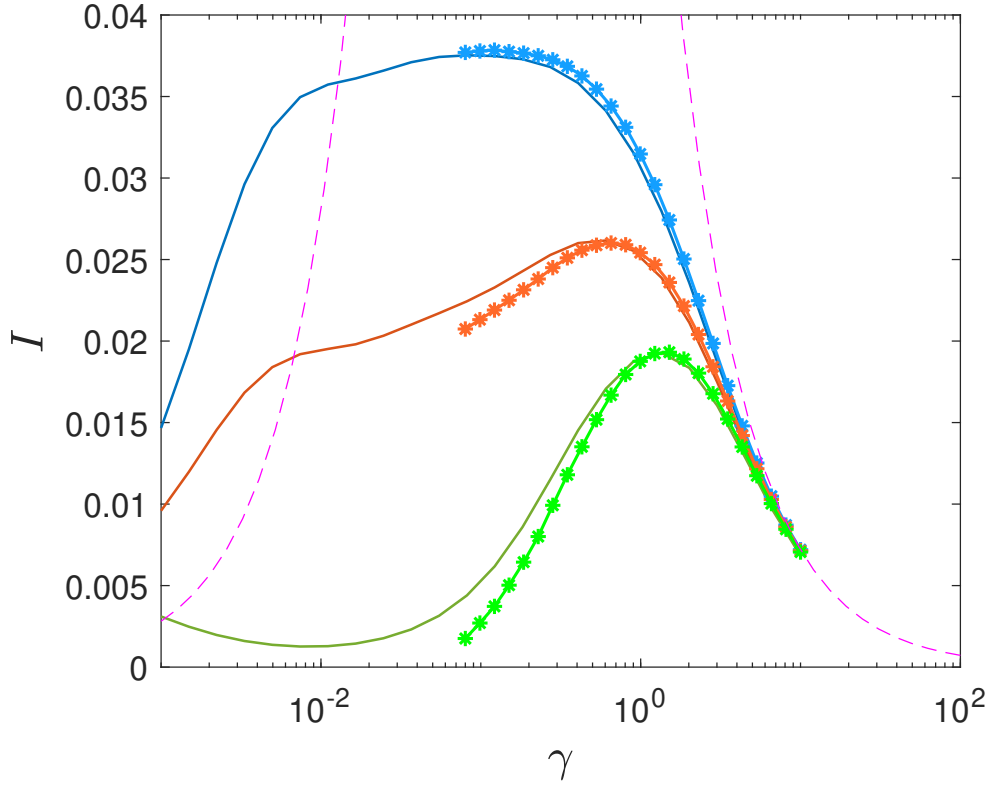


Рисунок 4.6 — Сравнение результатов, полученных на основе марковского уравнения (4.33) (штриховая линия) и немарковского уравнения (4.29) (сплошные линии с символами), с точными результатами для SPDM (сплошные линии). Разные сплошные линии соответствуют разным значениям обратной температуры  $\beta = 0.1, 1, 10$  (сверху вниз). Остальные параметры как на рисунке 4.3.

## 4.6 Резонансное туннелирование

### 4.6.1 Постановка задачи и условия резонанса

Резонансное туннелирование фермионов представляет собой хорошо изученное явление в физике твердого тела [16]. Оно возникает, когда энергия Ферми резервуаров совпадает с собственной энергией мезоскопического устройства. Интересно исследовать аналогичное явление для бозонов. Для этой цели во все уравнения включена отстройка от энергии нулевых колебаний  $\delta$ , определяющая локальную энергию в гамильтониане (4.3).

Как и в случае фермионов, для наблюдения этого эффекта необходимы определенные условия. Критическим условием является то, что расстояние

между энергетическими уровнями мезоскопического устройства меньше ширины распределения Бозе—Эйнштейна в резервуарах. Для рассматриваемой системы с двумя контактами эти условия выполняются, например, для параметров, используемых в правом столбце рисунка 4.4. Таким образом, можно ожидать резонансного поведения стационарного тока при изменении отстройки  $\delta$ . Численное моделирование динамики системы полностью подтверждает это предположение, как показано пунктирной линией на рисунке 4.7). Следует от-

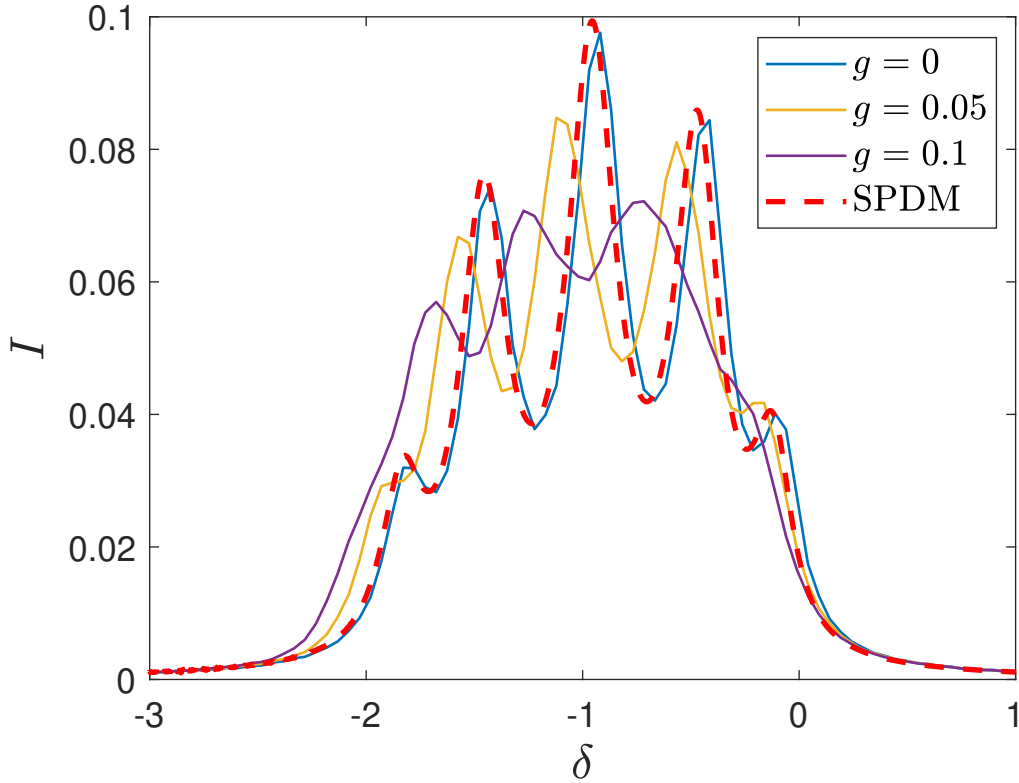


Рисунок 4.7 — Стационарный ток как функция отстройки  $\delta$ . Остальные параметры:  $\beta = 10$ ,  $\gamma = 0.2$  и  $\varepsilon = 0.4$ . Пунктирная линия соответствует решению для одночастичной матрицы плотности (SPDM). Сплошные линии – решения, полученные в псевдоклассическом приближении для разных значений макроскопической константы взаимодействия  $g$  (усреднение производилось по 6300 различным реализациям случайного процесса).

метить, что положения резонансных пиков несколько смещены относительно ожидаемых значений  $\delta = -(\omega_i + J)$ . Это смещение увеличивается с ростом  $\varepsilon$  или уменьшением  $\gamma$  и обусловлено обратным влиянием цепочки на контакты.



### 4.6.2 Влияние межчастичного взаимодействия

Теперь исследуем влияние межчастичных взаимодействий на наблюдаемый эффект резонансного туннелирования. Для этого используем псевдоклассический подход, в котором межчастичные взаимодействия характеризуются макроскопической константой взаимодействия  $g = U\bar{n}$ , где в качестве параметра  $\bar{n}$  выбрана средняя плотность частиц в левом резервуаре  $\bar{n}_L$ . Известно, что псевдоклассическое приближение является точным для  $g = 0$  и в пределе  $\bar{n} \rightarrow \infty$  при  $U = g/\bar{n} \rightarrow 0$ . Таким образом, для фиксированного  $\bar{n}$  метод дает корректные результаты лишь до некоторого критического значения  $U$ .

Синяя сплошная линия на рис. 4.7 соответствует  $g = 0$ , где отклонение от пунктирной линии обусловлено конечным числом реализаций стохастической силы. Это отклонение указывает на статистическую ошибку для выбранного ансамбля из 6300 реализаций. Штриховая и штрих-пунктирная линии на рисунке 4.7 соответствуют  $g \neq 0$ . Видно, что с увеличением  $g$  резонансные пики смещаются в сторону меньших значений  $\delta$ , одновременно происходит размывание резонансной картины.

Чтобы объяснить наблюдаемый эффект, следует проанализировать не спектральную плотность осцилляторов, как это делалось ранее, а спектральную плотность  $P_\ell(\nu)$  собственных мод цепочки при  $g \neq 0$ . Этот анализ показывает, что при малых значениях  $g \leq 0.1$  стохастическая сила  $\chi(t)$  в основном возбуждает коллективные моды системы. Более подробно, для  $g \neq 0$  и  $\delta \neq 0$  уравнение для осцилляторов преобразуется к виду:

$$i\dot{a}_\ell = (\delta + g|a_\ell|^2)a_\ell - \frac{J_s}{2}(a_{\ell-1} + a_{\ell+1}). \quad (4.34)$$

Перепишем уравнение (4.34) в представлении собственных мод (4.27):

$$i\dot{X}^{(i)} = (\delta + \omega_i + gA_i|X^{(i)}|^2)X^{(i)} + g \sum_{j,k \neq i} B_{i,j,k} X^{(j)} X^{(k)} (X^{(k)})^*, \quad (4.35)$$

где  $A_i$  и  $B_{i,j,k}$  — константы порядка единицы. При  $g = 0$  узкополосная стохастическая сила возбуждает каждую моду независимо. Например, для параметров кривых на рисунке 4.7 и  $\delta = -0.5$  возбуждается мода  $X^{(2)} = (-1/2, -1/2, 0, 1/2, 1/2)$ , а для  $\delta = -1$  — мода  $X^{(3)} = (1/\sqrt{3}, 0, -1/\sqrt{3}, 0, 1/\sqrt{3})$ . В случае, когда  $g \neq 0$  не превышает некоторого критического значения, а амплитуда одной из мод доминирует над остальными, взаимным влиянием мод,

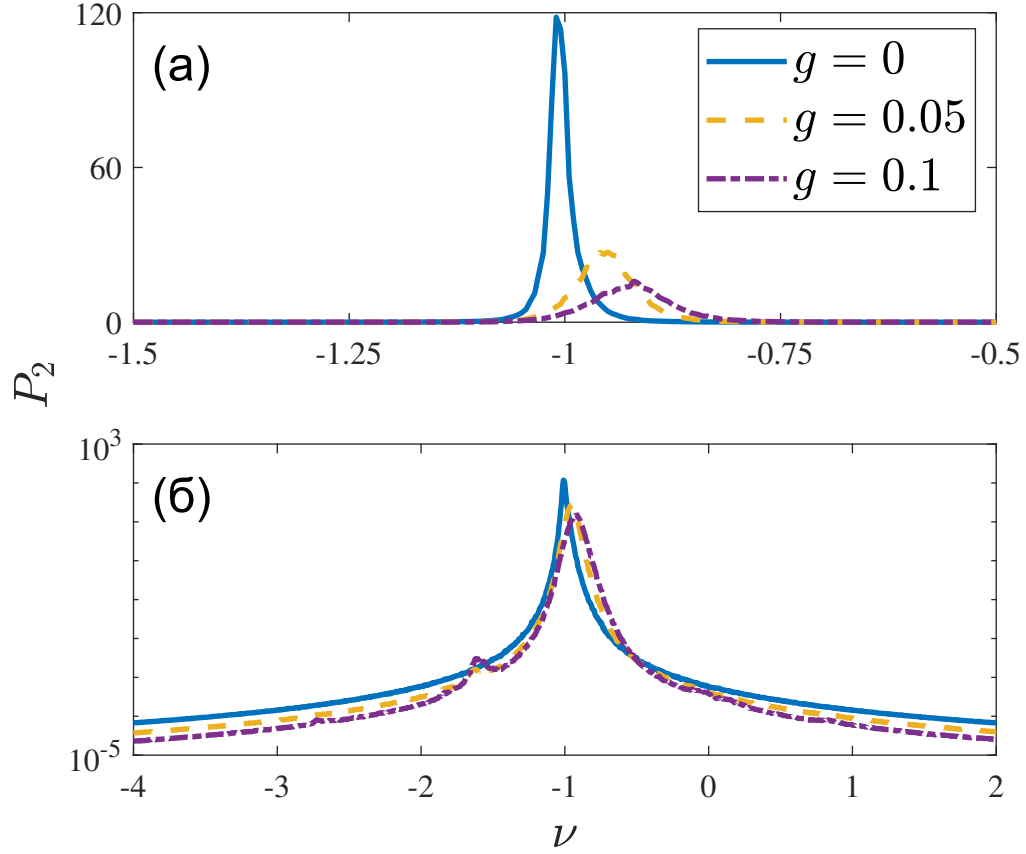


Рисунок 4.8 — Спектральная плотность собственной моды  $X^{(2)}(t)$  для  $g = 0$  и  $g > 0$  и  $\delta = -0.5$  в (а) линейном и (б) логарифмическом масштабах. Остальные параметры как на рисунке 4.7.

которое описывается последним членом в уравнении (4.35), можно пренебречь. Это позволяет свести задачу к модели одного стохастически возбуждаемого нелинейного осциллятора. Основными эффектами в такой системе являются уширение спектральной линии, сопровождающееся уменьшением её высоты, а также сдвиг всей полосы спектральной плотности в сторону положительных частот при  $g > 0$ , как показано на рисунке 4.8. Это объясняет уменьшение тока при фиксированном  $\delta = -0.5$ , наблюдаемое на рисунке 4.7. Важно отметить, что сдвиг может быть скомпенсирован подстройкой  $\delta$  к новому значению, что приводит к более эффективному возбуждению выбранной моды и, как следствие, к появлению пика пропускания при этом значении отстройки.

#### 4.7 Выводы по главе

В настоящей главе в рамках немарковской открытой модели Бозе—Хаббарда исследован стационарный ток бозонных носителей через одномерную цепочку, соединённую с двумя резервуарами частиц, моделируемыми как замкнутые в кольцо цепочки в приближении сильной связи. Обнаружено и исследовано явление резонансного туннелирования, при котором стационарный ток через цепочку резко возрастает, когда напряжение затвора  $\delta$  настраивает одну из собственных частот цепочки в резонанс с пиком низкотемпературной спектральной плотности шума. Таким образом, продемонстрировано, что для бозонных носителей, аналогично фермионным, возможна резонансное туннелирование через мезоскопическое устройство. Исследовано влияние межчастичного взаимодействия на резонансное туннелирование. Показано, что взаимодействие вызывает сдвиг и уширение резонансных пиков тока в зависимости от напряжения затвора, что в конечном итоге приводит к размыванию резонансной картины при увеличении константы взаимодействия  $g$ . Проведенное исследование расширяет понимание квантового транспорта бозонных носителей, демонстрируя богатую физику, связанную с немарковскими эффектами, бозе-конденсацией в резервуарах и ролью межчастичных взаимодействий.

Результаты главы опубликованы в работах [129; 133].

## Глава 5. Открытая одномерная цепочка с сохраняющимся числом частиц

Как уже было отмечено в предыдущих главах, центральным вопросом, представляющим как теоретический, так и экспериментальный интерес, является стационарный ток бозонных частиц через цепочку и его зависимость от силы межчастичного взаимодействия. Свойства замкнутой системы Бозе-Хаббарда критически зависят от отношения матричного элемента перескока  $J$  к константе взаимодействия  $U$  [106–108].

В частности, при целом значении числа заполнения  $\bar{n} = N/L$  в системе наблюдается квантовый фазовый переход для основного состояния между сверхтекучим состоянием ( $J \gg U$ ) и состоянием изолятора Мотта ( $U \gg J$ ). Возбужденные состояния системы демонстрируют качественное изменение от регулярных к хаотическим при увеличении взаимодействия. Естественно ожидать, что стационарный ток в открытой цепочке Бозе-Хаббарда также должен существенно зависеть от константы взаимодействия.

В главе 2 в рамках псевдоклассического приближения было показано, что даже слабое взаимодействие приводит к существенному подавлению стационарного тока. Для дальнейшего исследования этого явления в настоящей главе рассматривается специфическая модель Бозе–Хаббарда с граничным возбуждением, сохраняющая полное число частиц в системе. Хотя предложенная модель не имеет прямой экспериментальной реализации, она позволяет провести детальный сравнительный анализ с замкнутой системой Бозе–Хаббарда. Важно отметить, что в отличие от подхода предыдущих глав, основанного на псевдоклассическом приближении, данная модель исследуется точными методами.

В данной главе показано, что спектр стационарной матрицы плотности демонстрирует те же структурные изменения, что и энергетический спектр гамильтониана Бозе–Хаббарда при изменении управляющего параметра, в данном случае – константы взаимодействия  $U$ . Обнаруженные изменения в статистике спектра находят непосредственное отражение в поведении стационарного тока через цепочку, который, в отличие от статистических характеристик спектра, является непосредственно измеримой величиной.

Важным преимуществом предложенной модели является возможность точного численного анализа относительно больших систем, что затруднительно

для стандартной модели с граничным возбуждением. Например, для стандартной модели с  $L = 10$  и средним числом частиц во всей цепочке  $\langle N \rangle = 5$  необходимо учитывать флуктуации числа частиц как минимум до  $N_{\max} = 10$ , что приводит к матрице плотности размером  $184\,756 \times 184\,756$ . В то же время в рассматриваемой в данной главе модели с фиксированным  $N = 5$  размер матрицы составляет всего  $2002 \times 2002$ , что делает задачу вычислительно более легкой.

## 5.1 Модель

### 5.1.1 Основные уравнения

Рассмотрим цепочку Бозе—Хаббарда длины  $L$  с некогерентной связью между первым и  $L$ -м узлами, см. рисунок 5.1. Эволюция матрицы плотности системы  $\hat{\mathcal{R}}$  описывается основным кинетическим уравнением вида

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{R}}}{\partial t} = -i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{R}}] - \Gamma_1 \hat{\mathcal{L}}_1(\hat{\mathcal{R}}) - \Gamma_2 \hat{\mathcal{L}}_2(\hat{\mathcal{R}}), \quad (5.1)$$

где  $\hat{\mathcal{H}}$  — гамильтониан Бозе—Хаббарда, определяемый выражением (1.18) с  $E_\ell = 0$ .

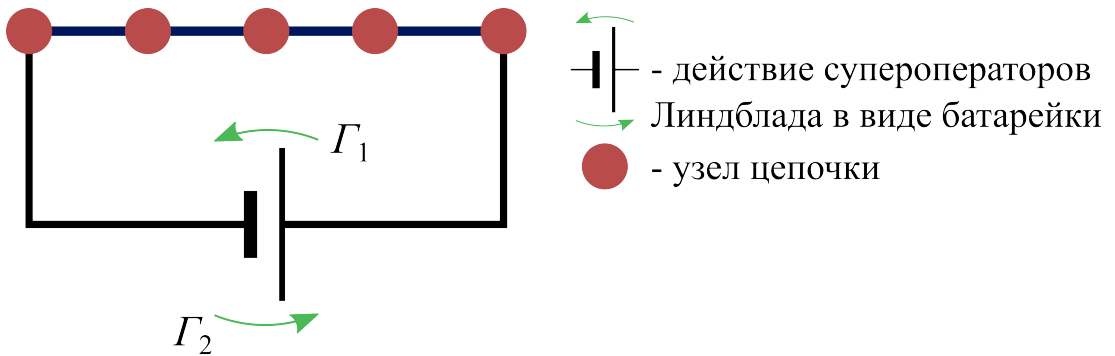


Рисунок 5.1 — Схематическое изображение цепочки Бозе—Хаббарда с реализацией эффекта "батарейки" через асимметричную некогерентную связь между первым и последним узлами. Стрелки иллюстрируют направления потоков частиц, индуцируемых операторами  $\hat{\mathcal{L}}_1$  и  $\hat{\mathcal{L}}_2$ .

Для описания некогерентной связи между первым и  $L$ -м узлами используются супероператоры Линдблада, которые задаются следующими выраже-

ниями:

$$\hat{\mathcal{L}}_1(\hat{\mathcal{R}}) = \hat{V}^\dagger \hat{V} \hat{\mathcal{R}} + \hat{\mathcal{R}} \hat{V}^\dagger \hat{V} - 2\hat{V} \hat{\mathcal{R}} \hat{V}^\dagger, \quad (5.2)$$

$$\hat{\mathcal{L}}_2(\hat{\mathcal{R}}) = \hat{V} \hat{V}^\dagger \hat{\mathcal{R}} + \hat{\mathcal{R}} \hat{V} \hat{V}^\dagger - 2\hat{V}^\dagger \hat{\mathcal{R}} \hat{V}, \quad (5.3)$$

где  $\Gamma_{1,2}$  – константы релаксации, которые в данной модели понимаются как скорость обмена частицами, а оператор  $\hat{V}$  определён как  $\hat{V} = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_L$  [85; 134; 135].

Физический смысл этих операторов заключается в следующем: супероператор  $\hat{\mathcal{L}}_1(\hat{\mathcal{R}})$  индуцирует некогерентный перенос бозонов от последнего узла к первому, в то время как супероператор  $\hat{\mathcal{L}}_2(\hat{\mathcal{R}})$  ответственен за перенос в обратном направлении. Данный некогерентный процесс можно интерпретировать как туннелирование, опосредованное взаимодействием с внешним резервуаром.

Ключевой момент заключается в том, что при  $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$  в системе возникает ненулевой стационарный ток. Направление тока зависит от того, какая из констант больше: если  $\Gamma_1 > \Gamma_2$ , то процесс переброса частиц с последнего узла на первый преобладает над обратным процессом, что создаёт результирующий ток в направлении от первого сайта к последнему. Именно асимметрия в скоростях этих двух процессов,  $\Delta\Gamma = \Gamma_1 - \Gamma_2$ , выполняет роль "батарейки" или эффективной разности химических потенциалов, поддерживающей ток в цепи. По аналогии с электронными устройствами, эта асимметрия создаёт постоянный ток, подобно тому, как батарея создаёт напряжение в электрической цепи. Основным интерес представляет стационарный ток  $I$  через цепочку, определяемый как  $I = \text{Tr}[\hat{I}\hat{\mathcal{R}}]$ , где  $\hat{\mathcal{R}} = \hat{\mathcal{R}}(t \rightarrow \infty)$  – стационарная матрица плотности, а оператор тока задаётся стандартным выражением:

$$\hat{I} = \frac{J}{2i} \sum_{\ell=1}^{L-1} (\hat{a}_{\ell+1}^\dagger \hat{a}_\ell - \text{h.c.}). \quad (5.4)$$

### 5.1.2 Режим линейного отклика

Заметим, что в случае симметричной связи,  $\Gamma_1 = \Gamma_2$ , стационарная матрица плотности является максимально смешанным состоянием и пропорциональна единичной матрице:  $\hat{\mathcal{R}} = \hat{\mathbb{1}}/\mathcal{N}$ , где  $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$  – размерность гильбертова пространства. В этом состоянии ток отсутствует.

Для создания ненулевого тока мы фокусируемся на режиме линейного отклика, полагая:

$$\Gamma_1 = \Gamma + \Delta\Gamma/2, \quad \Gamma_2 = \Gamma - \Delta\Gamma/2, \quad \text{где} \quad \Delta\Gamma \ll \Gamma. \quad (5.5)$$

В этом приближении матрица плотности может быть представлена в виде:

$$\hat{\mathcal{R}} = \frac{\hat{\mathbb{1}}}{\mathcal{N}} + \Delta\Gamma \hat{\mathcal{R}}^{(1)}, \quad (5.6)$$

где  $\text{Tr}[\hat{\mathcal{R}}^{(1)}] = 0$ . Подстановка (5.6) в основное кинетическое уравнение (5.1) дает:

$$-i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{R}}^{(1)}] - \Gamma[\mathcal{L}_1(\hat{\mathcal{R}}^{(1)}) + \mathcal{L}_2(\hat{\mathcal{R}}^{(1)})] - \frac{2(\hat{n}_L - \hat{n}_1)}{\mathcal{N}} = O(\Delta\Gamma). \quad (5.7)$$

В пределе  $\Delta\Gamma \rightarrow 0$  уравнение (5.7) значительно упрощается и преобразуется в уравнение на элементы неизвестной матрицы  $\hat{\mathcal{R}}^{(1)}$ , которую далее будем называть неравновесной матрицей плотности. В нашем численном подходе мы не решаем это уравнение непосредственно, а эволюционируем матрицу плотности  $\hat{\mathcal{R}}(t)$  в соответствии с уравнением (5.1) и используем уравнение (5.7) для проверки достижения истинного стационарного состояния. Этот метод оказывается более эффективным, чем прямое решение алгебраического уравнения.

## 5.2 Спектральные свойства стационарной матрицы плотности

### 5.2.1 Анализ в базисе оператора тока

Поскольку основной интерес представляет стационарный ток через цепочку, мы анализируем матрицу  $\hat{\mathcal{R}}^{(1)}$  в базисе собственных состояний оператора тока:

$$\hat{I} = \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} \sigma_j |\Phi_j\rangle \langle \Phi_j|. \quad (5.8)$$

Отметим, что при отсутствии взаимодействия  $U = 0$  в гамильтониане (1.18) справедливо следующие коммутационное соотношение:

$$-i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{I}] - \frac{(\hat{n}_L - \hat{n}_1)}{2} = 0. \quad (5.9)$$

На рисунке 5.2 представлены два примера матрицы  $\hat{\mathcal{R}}^{(1)}$  в этом базисе для случаев  $U = 0$  (левая панель) и  $U = J$  (правая панель). Качественное различие между этими случаями хорошо видно из рисунков. В случае отсутствия взаимодействия матрица имеет регулярную структуру и представляет собой диагональную матрицу. Напротив, при включении взаимодействия проявляется сложная нерегулярная картина с значительными недиагональными элементами, свидетельствующая о сильном перемешивании состояний.

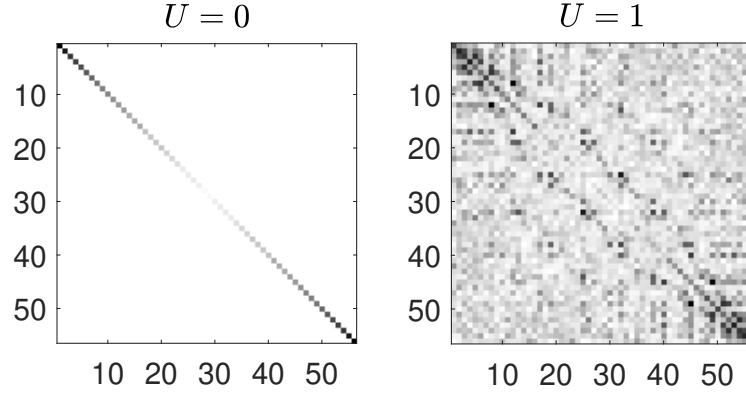


Рисунок 5.2 — Абсолютные значения матричных элементов матрицы  $\hat{\mathcal{R}}^{(1)}$  в базисе оператора тока. Параметры системы:  $L = 6$ ,  $N = 3$  (размерность гильбертова пространства  $\mathcal{N} = 56$ ),  $J = 1$ ,  $\Gamma = 0.04$  ( $\Delta\Gamma = 0.002$ ), и  $U = 0$  (слева) и  $U = 1$  (справа). Верхний предел цветовой оси равен 0.2.

### 5.2.2 Переход к квантовому хаосу

Известно, что гамильтониан Бозе—Хаббарда (1.18) проявляет переход от регулярной динамики к квантовому хаосу при увеличении  $U$  [107; 108]. Мы ожидаем аналогичный переход для неравновесной матрицы плотности, что подтверждается визуальным анализом матриц на рисунке 5.2 и результатами исследований гранично возбужденных спиновых цепочек [136; 137].

Классический подход к определению квантового хаоса в открытых системах основан на анализе спектра супероператора Лиувилля  $\mathcal{L}(\hat{\mathcal{R}})$  [134; 136–140], который задаёт эволюцию матрицы плотности:  $\mathcal{L}(\hat{\mathcal{R}}) = -i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{R}}] + \sum_j \mathcal{D}[\hat{L}_j](\hat{\mathcal{R}})$ . Однако в данной главе мы фокусируемся на непосредственном исследовании спектра неравновесной матрицы плотности (5.10), поскольку



именно она содержит полную информацию о состоянии открытой многочастичной системы. Таким образом, мы исследуем спектр и собственные состояния:

$$\hat{\mathcal{R}}^{(1)} = \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} \lambda_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j|. \quad (5.10)$$

В дальнейшем мы ограничиваемся случаем  $\Gamma \ll J$ . При  $U = 0$  состояния  $|\Psi_j\rangle$  практически совпадают с собственными состояниями оператора тока  $|\Phi_j\rangle$ , а собственные значения связаны соотношением:

$$\lambda_j \approx 4\sigma_j/\mathcal{N}. \quad (5.11)$$

Чтобы убедиться в этом, масштабируем матрицу плотности  $\hat{\mathcal{R}}^{(1)} \rightarrow \mathcal{N}/4 \cdot \hat{\mathcal{R}}^{(1)}$  и положим  $\Delta\Gamma = 0$  в уравнении (5.7). Полученное алгебраическое уравнение отличается от коммутационного соотношения (5.9), справедливого для  $U = 0$ , лишь малым членом  $\sim \Gamma$ , который может быть учтен в рамках теории возмущений. Как и ожидалось, применение теории возмущений снимает вырождение собственных значений оператора тока, см. вставку (б) на рисунке 5.3). Пурпурная ступенчатая кривая на рисунке 5.3 иллюстрирует случай  $U \neq 0$ . Видно, что ширина спектра увеличивается с ростом  $U$ , что свидетельствует о сильном отклонении системы от равновесия. Однако основное различие заключается не в ширине спектра, а в его статистических свойствах.

### 5.2.3 Статистика спектра

Следуя стандартной процедуре анализа спектральных свойств, мы исследовали распределения расстояний между ближайшими уровнями  $s = (\lambda_{j+1} - \lambda_j)f(\lambda_j)$ , где  $f(\lambda)$  – средняя плотность состояний. На рисунке 5.4 показано кумулятивное распределение уровней спектра

$$I(s) = \int_0^s ds' P(s'), \quad (5.12)$$

матрицы  $\hat{\mathcal{R}}^{(1)}$  для центральной энергетической области, охватывающей 60% состояний (сплошная линия), в сравнении с распределением Пуассона (штриховая линия):

$$P_P(s) = e^{-s}, \quad (5.13)$$

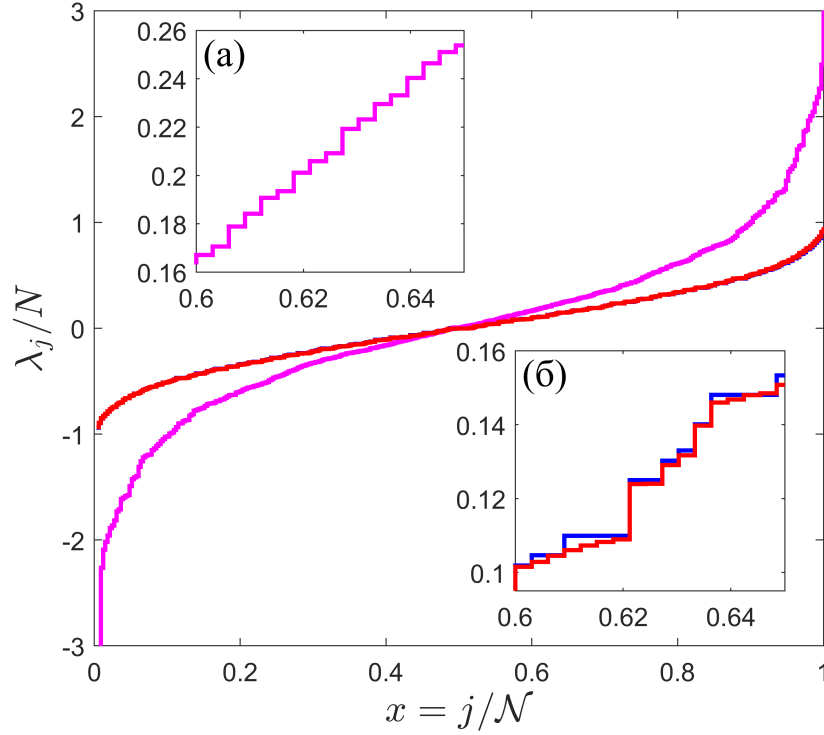


Рисунок 5.3 — Масштабированные собственные значения матрицы  $\hat{\mathcal{R}}^{(1)}$  для  $U = 0$  (красная линия) и  $U = 1$  (фиолетовая линия) по сравнению с собственными значениями оператора тока (синяя линия). Параметры:  $L = 8, N = 4$  ( $\mathcal{N} = 330$ ),  $J = 1$ , и  $\Gamma = 0.04$  ( $\Delta\Gamma = 0.002$ ). На вставках показано увеличенное изображение центральной области спектра.

и распределением Вигнера—Дайсона [141] (штрихпунктирная линия) для гауссова унитарного ансамбля (ГУА):

$$P_{\text{WD}}(s) = \frac{32s^2}{\pi^2} e^{-4s^2/\pi}. \quad (5.14)$$

Для  $U = 0$  кумулятивное распределение уровней спектра  $I(s)$  прекрасно согласуется с кумулятивным распределением Пуассона, рисунок 5.4(а), что и ожидалось для регулярной системы. Напротив, для  $U = J$  наблюдается хорошее согласие с распределением ГУА Вигнера—Дайсона, рисунок 5.4(б). Это означает, что собственные значения  $\lambda_j$  матрицы  $\hat{\mathcal{R}}^{(1)}$  отталкиваются друг от друга, а распределение расстояний между ними  $P(s)$  принимает универсальную форму Вигнера—Дайсона. Данная универсальность является ключевой чертой квантового хаоса [142; 143]: глобальная структура спектра перестает зависеть от микроскопических деталей гамильтониана системы и подчиняется общим статистическим закономерностям, характерным для широкого класса сложных квантовых систем с нарушенной симметрией относительно обращения времени.

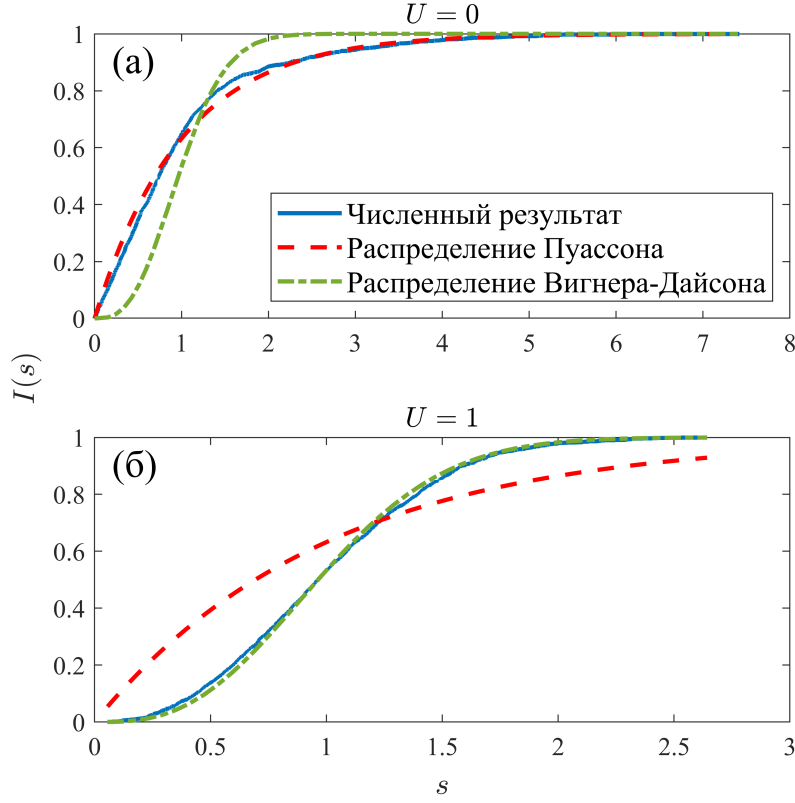


Рисунок 5.4 — Сравнение кумулятивного распределения уровней спектра матрицы  $\widehat{\mathcal{R}}^{(1)}$  с кумулятивными распределениями Пуассона и ГУА Вигнера—Дайсона для  $U = 0$  (а) и для  $U = 1$  (б). Другие параметры:  $L = 10$ ,  $N = 5$  ( $\mathcal{N} = 2002$ ), и  $\Gamma = 0.04$ . Для статистического анализа взято 60% собственных значений из центральной части спектра.

### 5.3 Стационарный ток и его зависимость от взаимодействия

Перейдем теперь к анализу стационарного тока  $I$  через цепочку:

$$I = \text{Tr}[\hat{I}\widehat{\mathcal{R}}] = \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} \lambda_j \langle \Psi_j | \hat{I} | \Psi_j \rangle \equiv \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} \lambda_j I_j. \quad (5.15)$$

В случае отсутствия межчастичных взаимодействий, используя уравнение (5.11), можно получить следующее полуаналитическое выражение:

$$I = 4JN^2\Delta\Gamma \int_0^1 \sigma^2(x)dx, \quad (5.16)$$

где  $x = j/\mathcal{N}$ , а  $\sigma(x)$  — обратная функция к интегрированной плотности состояний оператора тока, интерполирующая синюю линию на рисунке 5.3. Таким

образом, как и интуитивно ожидается, для  $U = 0$  полный ток увеличивается с числом частиц в системе. Случай  $U \neq 0$  является более сложным и демонстрирует нетривиальное поведение. На рисунке 5.5 представлена полученная численно зависимость стационарного тока от константы взаимодействия  $U$  для  $L = 6$  и различного числа частиц  $N$ . На рисунке 5.5(б) четко идентифицируется критическое значение  $U_{cr} = U_{cr}(\bar{n})$ ,  $\bar{n} = N/L$ , выше которого ток резко уменьшается. Это критическое взаимодействие отмечает переход от статистики спектра Пуассона к статистике Вигнера—Дайсона для неравновесной матрицы плотности  $\hat{\mathcal{R}}^{(1)}$ . Неожиданным результатом является то, что для  $U \gg U_{cr}$  ток не только уменьшается, но и демонстрирует котринтуитивную зависимость от числа частиц – с ростом  $N$  ток уменьшается. Более того, мы обнаруживаем, что для этих больших значений  $U$  статистика спектра снова становится пуассоновской, что указывает на восстановление регулярности динамики в пределе сильного взаимодействия.

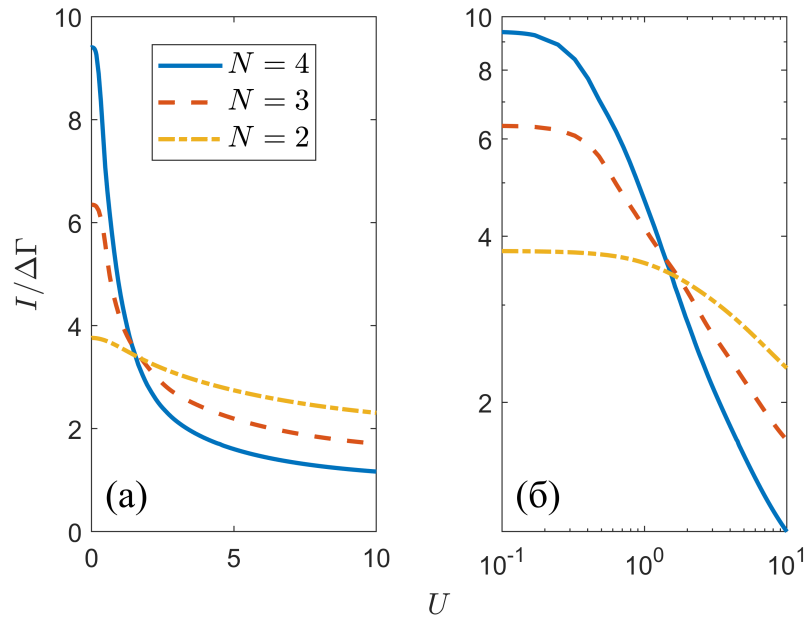


Рисунок 5.5 — Полный ток как функция константы взаимодействия  $U$  для трех различных значений числа частиц  $N = 2, 3, 4$  в линейном (а) и логарифмическом (б) масштабах. Параметры:  $L = 6$ ,  $\Gamma = 0.04$  ( $\Delta\Gamma = 0.002$ ).

## 5.4 Фермионизация и локализация состояний

Наблюдаемое изменение статистики спектра и контринтуитивная зависимость тока от числа частиц объясняются индуцированной взаимодействием локализацией собственных состояний  $|\Psi_j\rangle$  и фермионизацией сильно взаимодействующих бозонных частиц [144]. Очевидным следствием локализации собственных состояний является то, что среднее значение  $I_j = \langle \Psi_j | \hat{I} | \Psi_j \rangle$  стремится к нулю и строго равно нулю, если все бозоны занимают один узел цепочки. На рисунке 5.6 показаны величины  $I_j$  для  $(L, N) = (6, 3)$  и  $U = 0, 0.5, 10$ . Видно, что доля делокализованных состояний, поддерживающих ток, уменьшается в пользу локализованных состояний, для которых  $I_j \approx 0$ . Например, на рисунке 5.6(в) состояния, соответствующие минимальному и

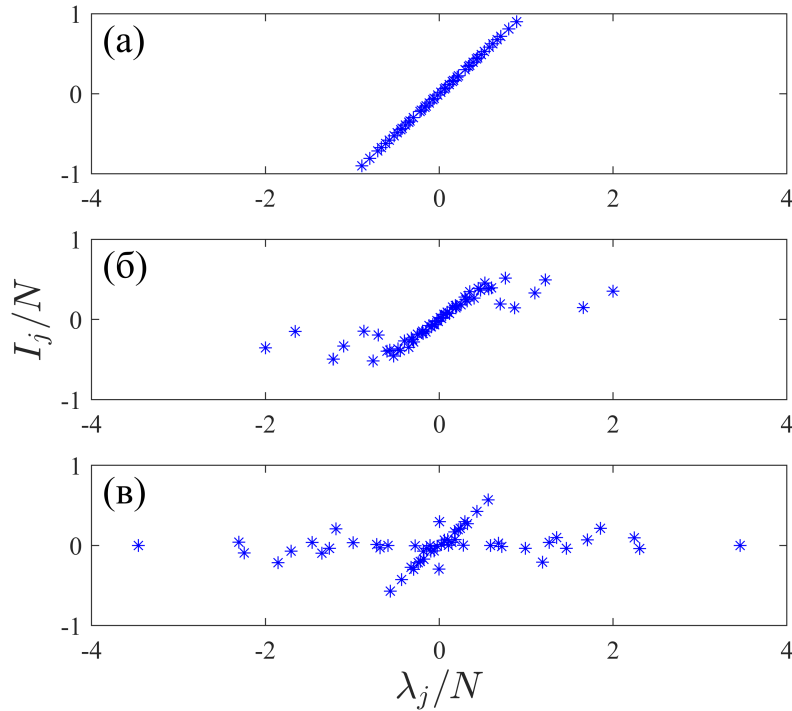


Рисунок 5.6 — Величины  $I_j = \langle \Psi_j | \hat{I} | \Psi_j \rangle$  для  $U = 0$  (а),  $U = 0.5$  (б), и  $U = 10$  (в). Параметры системы:  $L = 6$ ,  $N = 3$ , и  $\Gamma = 0.04$  ( $\Delta\Gamma = 0.002$ ).

максимальному собственным значениям, — это состояния  $|\Psi_1\rangle \approx |0,0,0,0,0,3\rangle$  и  $|\Psi_N\rangle \approx |3,0,0,0,0,0\rangle$ . Наряду с полностью локализованными состояниями, присутствуют частично локализованные состояния и ряд делокализованных состояний. Более детальный анализ этих состояний показывает, что они являются суперпозицией состояний Фока, населенности узлов цепочки в которых

равны либо нулю, либо единице. Поскольку это подпространство гильбертова пространства соответствует гильбертову пространству локальных бозонов (hardcore bosons), мы заключаем, что остаточная проводимость системы при больших  $U$  в основном обусловлена наличием локальных бозонов. Как известно, спектральные и транспортные свойства локальных бозонов аналогичны таковым для невзаимодействующих фермионов и, следовательно, они могут поддерживать баллистический транспорт при сколь угодно больших  $U$ , если  $N/L < 1$  [144].

Мы также отмечаем, что появление локализованных состояний и интегрируемых состояний, связанных с локальными бозонами, согласуется с наблюдаемым изменением распределения расстояний между уровнями от распределения Вигнера—Дайсона обратно к распределению Пуассона в пределе больших  $U$ . Это восстановление регулярной статистики спектра отражает фундаментальное свойство системы – переход к фермионизированному режиму, где сильно взаимодействующие бозоны ведут себя как невзаимодействующие фермионы.

## 5.5 Выводы по главе

В настоящей главе представлена модель квантового транспорта бозонных частиц через цепочку Бозе—Хаббарда, которая сохраняет число частиц в системе. Подобно стандартной транспортной модели, где цепочка Бозе—Хаббарда соединяет два резервуара частиц с разными химическими потенциалами, введенная модель демонстрирует различные транспортные режимы в зависимости от отношения между константой туннелирования  $J$  и константой взаимодействия  $U$  в гамильтониане Бозе—Хаббарда (1.18). Показано, что для  $U \sim J$  стационарный ток бозонных частиц резко уменьшается по сравнению со случаем  $U = 0$ . В главе 2, которая основана на работе [82], уже наблюдалось подобное поведение в том же диапазоне значений параметров ( $U \sim J$ ). Там было показано с помощью псевдоклассического приближения, что уменьшение тока соответствует переходу от баллистического режима транспорта к диффузионному. В данной же главе, при использовании строгого квантового подхода, показано, что уменьшение тока сопровождается переходом от регулярной динамики к

квантовому хаосу, что проявляется в изменении статистики спектра матрицы плотности от распределения Пуассона к распределению Вигнера—Дайсона. Это позволяет сделать следующее заключение: увеличение межчастичного взаимодействия в гранично-возбуждаемых бозонных системах приводит к переходу от баллистического режима транспорта к диффузионному, что является следствием перехода от регулярной динамики к хаотической. В рамках введенной модели мы также наблюдали интересный эффект – остаточную проводимость, обусловленную фермионизацией бозонных частиц. В пределе сильного взаимодействия ( $U \gg J$ ) система демонстрирует восстановление регулярной динамики, проявляющиеся в переходе к пуассоновской статистике спектра, и уменьшение тока с ростом числа частиц. Это явление представляет собой чисто квантовый эффект, который не может быть описан в рамках классического или псевдоклассического подходов, рассмотренных в предыдущих главах. Полученные результаты демонстрируют глубокую связь между статистическими свойствами неравновесной матрицы плотности и транспортными характеристиками системы, открывая новые перспективы для исследования сложных квантовых систем в условиях сильного взаимодействия и диссипации. Предложенная модель и методика анализа могут быть применены к другим классам гранично-возбуждаемых систем, что представляет значительный интерес для дальнейших исследований.

Результаты главы опубликованы в работах [86; 145].

## Заключение

Настоящая диссертационная работа посвящена теоретическому исследованию квантового транспорта бозонных частиц в низкоразмерных системах, в частности, в открытых цепочках Бозе-Хаббарда и их обобщениях. Были изучены различные аспекты данной проблемы, начиная от перехода между баллистическим и диффузионным режимами транспорта под влиянием межчастичного взаимодействия, заканчивая ролью синтетических калибровочных полей, немарковских эффектов и квантового хаоса в неравновесной динамике. Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. Для одномерной цепочки Бозе-Хаббарда, соединяющей два атомных резервуара, в рамках псевдоклассического приближения показано, что умеренное межчастичное взаимодействие ( $U \sim J$ ) приводит к значительному подавлению стационарного тока и смене транспортного режима. Анализ спектральных плотностей осцилляторов выявил разрушение коллективных мод и исчезновение резонансных пиков, что свидетельствует о переходе от баллистического переноса к диффузионному механизму.
2. Исследована ромбическая цепочка под действием внешнего искусственного магнитного поля. Показано, что в отсутствие взаимодействия ток демонстрирует интерференционную зависимость  $\sim \cos^2 \Phi/2$  и полностью подавляется при  $\Phi = \pi$  из-за деструктивной интерференции. При  $\Phi = 0$  получено аналитическое выражение. Показано, что межчастичное взаимодействие разрушает локализацию, индуцированную магнитным потоком, и восстанавливает ток в области  $\Phi \approx \pi$ .
3. Предложена немарковская модель открытой системы с контактами, которая адекватно описывает низкотемпературные резервуары близкие к бозе-конденсации. Обнаружено явление резонансного туннелирования бозонов, аналогичное фермионному случаю, и показано, что межчастичное взаимодействие вызывает сдвиг и уширение резонансных пиков, вплоть до полного размытия картины при увеличении взаимодействия.
4. На примере открытой модели с сохранением числа частиц продемонстрировано, что увеличение межчастичного взаимодействия приводит



к переходу от интегрируемой динамики ( $U = 0$ ) к квантовому хаосу ( $U \sim J$ ), что отражается в изменении статистики спектра матрицы плотности от распределения Пуассона к распределению Вигнера-Дайсона. В пределе сильного взаимодействия ( $U \gg J$ ) наблюдается фермионизация бозонов, приводящая к восстановлению интегрируемости, и сопровождающаяся нетривиальной зависимостью тока от числа частиц.

5. Результаты, полученные для моделей из глав 2 и 5, показывают, что увеличение межчастичного взаимодействия в гранично-возбуждаемых бозонных системах вызывает переход от баллистического режима транспорта к диффузионному. Этот переход является следствием перехода от регулярной динамики к хаотической — как в смысле классического, так и в смысле квантового хаоса.

Предложенные модели и предсказания потенциально могут быть проверены в экспериментах с ультрахолодными атомами в оптических решетках, а также на платформах, использующих сверхпроводящие цепи либо фотонные структуры. Проведенное исследование вносит вклад в фундаментальное понимание квантового транспорта в системах с взаимодействующими частицами и открывает новые направления для изучения сложных неравновесных квантовых явлений.

## Благодарности

Автор выражает искреннюю благодарность своему научному руководителю — Коловскому Андрею Радиевичу — за ценные советы, терпение и мудрое руководство на всех этапах исследования. Особую признательность автор выражает Максимову Дмитрию Николаевичу за наставничество и неоценимую поддержку в различных аспектах научной деятельности.

Автор с благодарностью вспоминает своих школьных учителей физики и математики — Патрушева Глеба Олеговича и Подольского Николая Николаевича, — которые открыли ему удивительный мир физики и пробудили интерес к науке. Отдельно автор хотел бы поблагодарить Плеханова Василя Гранитовича за бесценные знания и важные жизненные уроки, полученные от него, а также всех преподавателей Сибирского федерального университета, у которых автору посчастливилось учиться на протяжении десяти лет.

Наконец, автор глубоко благодарен своим родителям и брату за их неизменное терпение и поддержку, без которых эта работа не была бы возможна.

## Список сокращений и условных обозначений

$\hat{\rho}$	одночастичная матрица плотности, SPDM
$\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{a}_\ell$	бозонные операторы рождения и уничтожения действующие на узле с индексом $\ell$
$\hat{H}$	одночастичный гамильтониан
$\hat{\mathcal{H}}$	многочастичный гамильтониан
$\hat{\mathcal{L}}$	супероператор Линдблада
$\hat{\mathcal{R}}$	матрица плотности
$a_\ell$	комплексная амплитуда $\ell$ -го осциллятора
$H$	классический гамильтониан
$L$	длина цепочки
BBR	Bogoliubov back-reaction method
RWA	rotating-wave approximation, приближение вращающейся волны
SPDM	single-particle density matrix, одночастичная матрица плотности
БЭК	конденсат Бозе-Эйнштейна
ГУА	гауссов унитарный ансамбль
ЭДС	электродвижущая сила

## Список литературы

1. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms [Текст] / M. Greiner [и др.] // nature. — 2002. — Т. 415, № 6867. — С. 39—44.
2. *Gross, C.* Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices [Текст] / C. Gross, I. Bloch // Science. — 2017. — Т. 357, № 6355. — С. 995—1001.
3. *Breuer, H.-P.* The theory of open quantum systems [Текст] / H.-P. Breuer, F. Petruccione. — OUP Oxford, 2002.
4. *Landi, G. T.* Nonequilibrium boundary-driven quantum systems: Models, methods, and properties [Текст] / G. T. Landi, D. Poletti, G. Schaller // Reviews of Modern Physics. — 2022. — Т. 94, № 4. — С. 045006.
5. *Lindblad, G.* On the generators of quantum dynamical semigroups [Текст] / G. Lindblad // Communications in mathematical physics. — 1976. — Т. 48. — С. 119—130.
6. *Gorini, V.* Completely positive dynamical semigroups of N-level systems [Текст] / V. Gorini, A. Kossakowski, E. C. G. Sudarshan // Journal of Mathematical Physics. — 1976. — Т. 17, № 5. — С. 821—825.
7. Atomtronics: Ultracold-atom analogs of electronic devices [Текст] / B. Seaman [и др.] // Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2007. — Т. 75, № 2. — С. 023615.
8. Roadmap on Atomtronics: State of the art and perspective [Текст] / L. Amico [и др.] // AVS Quantum Science. — 2021. — Т. 3, № 3.
9. *Bloch, F.* Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern [Текст] / F. Bloch // Zeitschrift für physik. — 1929. — Т. 52, № 7. — С. 555—600.
10. *Zener, C.* A theory of the electrical breakdown of solid dielectrics [Текст] / C. Zener // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character. — 1934. — Т. 145, № 855. — С. 523—529.

11. *Slater, J. C.* Simplified LCAO method for the periodic potential problem [Текст] / J. C. Slater, G. F. Koster // Physical review. — 1954. — Т. 94, № 6. — С. 1498.
12. *Gersch, H. A.* Quantum cell model for bosons [Текст] / H. A. Gersch, G. C. Knollman // Physical Review. — 1963. — Т. 129, № 2. — С. 959.
13. *Hubbard, J.* Electron correlations in narrow energy bands [Текст] / J. Hubbard // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. — 1963. — Т. 276, № 1365. — С. 238—257.
14. Cold bosonic atoms in optical lattices [Текст] / D. Jaksch [и др.] // Physical Review Letters. — 1998. — Т. 81, № 15. — С. 3108.
15. *Rammer, J.* Quantum transport theory of electrons in solids: A single-particle approach [Текст] / J. Rammer // Reviews of Modern Physics. — 1991. — Т. 63, № 4. — С. 781.
16. *Datta, S.* Electronic transport in mesoscopic systems [Текст] / S. Datta. — Cambridge university press, 1997.
17. *Datta, S.* Quantum transport: atom to transistor [Текст] / S. Datta. — Cambridge university press, 2005.
18. Observation of h e aharonov-bohm oscillations in normal-metal rings [Текст] / R. A. Webb [и др.] // Physical Review Letters. — 1985. — Т. 54, № 25. — С. 2696.
19. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas [Текст] / B. Van Wees [и др.] // Physical Review Letters. — 1988. — Т. 60, № 9. — С. 848.
20. Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure [Текст] / M. Reed [и др.] // Physical Review Letters. — 1988. — Т. 60, № 6. — С. 535.
21. *Aspuru-Guzik, A.* Photonic quantum simulators [Текст] / A. Aspuru-Guzik, P. Walther // Nature physics. — 2012. — Т. 8, № 4. — С. 285—291.
22. *Lei, C. U.* A quantum photonic dissipative transport theory [Текст] / C. U. Lei, W.-M. Zhang // Annals of Physics. — 2012. — Т. 327, № 5. — С. 1408—1433.

23. Spontaneous mirror-symmetry breaking in coupled photonic-crystal nanolasers [Текст] / P. Hamel [и др.] // Nature Photonics. — 2015. — Т. 9, № 5. — С. 311—315.
24. Quantum transport simulations in a programmable nanophotonic processor [Текст] / N. C. Harris [и др.] // Nature Photonics. — 2017. — Т. 11, № 7. — С. 447—452.
25. Controlled transport based on multiorbital Aharonov-Bohm photonic caging [Текст] / G. Cáceres-Aravena [и др.] // Physical Review Letters. — 2022. — Т. 128, № 25. — С. 256602.
26. *Žutić, I.* Spintronics: Fundamentals and applications [Текст] / I. Žutić, J. Fabian, S. D. Sarma // Reviews of modern physics. — 2004. — Т. 76, № 2. — С. 323.
27. Observation of a dissipation-induced classical to quantum transition [Текст] / J. Raftery [и др.] // Physical Review X. — 2014. — Т. 4, № 3. — С. 031043.
28. Observation of a dissipative phase transition in a one-dimensional circuit QED lattice [Текст] / M. Fitzpatrick [и др.] // Physical Review X. — 2017. — Т. 7, № 1. — С. 011016.
29. Photon transport in a Bose-Hubbard chain of superconducting artificial atoms [Текст] / G. P. Fedorov [и др.] // Physical Review Letters. — 2021. — Т. 126, № 18. — С. 180503.
30. Finite-temperature transport in one-dimensional quantum lattice models [Текст] / B. Bertini [и др.] // Reviews of Modern Physics. — 2021. — Т. 93, № 2. — С. 025003.
31. Preparation of entangled states by quantum Markov processes [Текст] / B. Kraus [и др.] // Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2008. — Т. 78, № 4. — С. 042307.
32. Quantum states and phases in driven open quantum systems with cold atoms [Текст] / S. Diehl [и др.] // Nature Physics. — 2008. — Т. 4, № 11. — С. 878—883.
33. *Talkington, S.* Dissipation-induced flat bands [Текст] / S. Talkington, M. Claassen // Physical Review B. — 2022. — Т. 106, № 16. — С. L161109.

34. *König, R.* Generating topological order: no speedup by dissipation [Текст] / R. König, F. Pastawski // Physical Review B. — 2014. — Т. 90, № 4. — C. 045101.
35. *Keeling, J.* Fermionic superradiance in a transversely pumped optical cavity [Текст] / J. Keeling, M. Bhaseen, B. Simons // Physical review letters. — 2014. — Т. 112, № 14. — C. 143002.
36. *Nava, A.* Mpemba effects in open nonequilibrium quantum systems [Текст] / A. Nava, R. Egger // Physical Review Letters. — 2024. — Т. 133, № 13. — C. 136302.
37. Dark state transport between unitary Fermi superfluids [Текст] / M. Talebi [и др.] // Physical Review Letters. — 2024. — Т. 133, № 22. — C. 223403.
38. *Verstraete, F.* Quantum computation and quantum-state engineering driven by dissipation [Текст] / F. Verstraete, M. M. Wolf, J. Ignacio Cirac // Nature physics. — 2009. — Т. 5, № 9. — C. 633—636.
39. A possible route towards dissipation-protected qubits using a multidimensional dark space and its symmetries [Текст] / R. A. Santos [и др.] // Nature communications. — 2020. — Т. 11, № 1. — C. 5899.
40. *Bloch, I.* Many-body physics with ultracold gases [Текст] / I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger // Reviews of modern physics. — 2008. — Т. 80, № 3. — C. 885—964.
41. *Metcalf, H. J.* Laser cooling and trapping [Текст] / H. J. Metcalf, P. Van der Straten. — Springer Science & Business Media, 1999.
42. *Ketterle, W.* Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates [Текст] / W. Ketterle, D. S. Durfee, D. Stamper-Kurn // Bose-Einstein condensation in atomic gases. — IOS Press, 1999. — C. 67—176.
43. *Torma, P.* Quantum Gas Experiments: Exploring Many-Body States [Текст]. Т. 3 / P. Torma, K. Sengstock. — World Scientific, 2014.
44. *Chu, S.* Nobel Lecture: The manipulation of neutral particles [Текст] / S. Chu // Reviews of Modern Physics. — 1998. — Т. 70, № 3. — C. 685.
45. *Cohen-Tannoudji, C. N.* Nobel Lecture: Manipulating atoms with photons [Текст] / C. N. Cohen-Tannoudji // Reviews of Modern Physics. — 1998. — Т. 70, № 3. — C. 707.

46. *Phillips, W. D.* Nobel Lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms [Текст] / W. D. Phillips // Reviews of Modern Physics. — 1998. — Т. 70, № 3. — С. 721.
47. Fermionic transport and out-of-equilibrium dynamics in a homogeneous Hubbard model with ultracold atoms [Текст] / U. Schneider [и др.] // Nature Physics. — 2012. — Т. 8, № 3. — С. 213–218.
48. Observing the drop of resistance in the flow of a superfluid Fermi gas [Текст] / D. Stadler [и др.] // Nature. — 2012. — Т. 491, № 7426. — С. 736–739.
49. Hysteresis in a quantized superfluid ‘atomtronic’ circuit [Текст] / S. Eckel [и др.] // Nature. — 2014. — Т. 506, № 7487. — С. 200–203.
50. Interferometric measurement of the current-phase relationship of a superfluid weak link [Текст] / S. Eckel [и др.] // Physical Review X. — 2014. — Т. 4, № 3. — С. 031052.
51. Optical transport and manipulation of an ultracold atomic cloud using focus-tunable lenses [Текст] / J. Léonard [и др.] // New Journal of Physics. — 2014. — Т. 16, № 9. — С. 093028.
52. *Ryu, C.* Integrated coherent matter wave circuits [Текст] / C. Ryu, M. G. Boshier // New Journal of Physics. — 2015. — Т. 17, № 9. — С. 092002.
53. Controlling the dynamics of an open many-body quantum system with localized dissipation [Текст] / G. Barontini [и др.] // Physical review letters. — 2013. — Т. 110, № 3. — С. 035302.
54. Negative differential conductivity in an interacting quantum gas [Текст] / R. Labouvie [и др.] // Physical review letters. — 2015. — Т. 115, № 5. — С. 050601.
55. Bistability in a driven-dissipative superfluid [Текст] / R. Labouvie [и др.] // Physical review letters. — 2016. — Т. 116, № 23. — С. 235302.
56. Experimental observation of a dissipative phase transition in a multi-mode many-body quantum system [Текст] / J. Benary [и др.] // New Journal of Physics. — 2022. — Т. 24, № 10. — С. 103034.
57. Dynamic hysteresis across a dissipative multi-mode phase transition [Текст] / M. Röhrle [и др.] // SciPost Physics. — 2024. — Т. 16, № 6. — С. 158.



58. *Amato, G.* Many-particle quantum transport between finite reservoirs [Текст] : дис. . . . канд. / Amato Giulio. — Dissertation, Universität Freiburg, 2021, 2021.
59. One dimensional bosons: From condensed matter systems to ultracold gases [Текст] / М. А. Cazalilla [и др.] // Reviews of Modern Physics. — 2011. — Т. 83, № 4. — С. 1405—1466.
60. *Husmann, D.* Mesoscopic transport phenomena in a unitary Fermi gas [Текст] : дис. . . . канд. / Husmann Dominik. — ETH Zurich, 2018.
61. Inducing an optical Feshbach resonance via stimulated Raman coupling [Текст] / G. Thalhammer [и др.] // Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2005. — Т. 71, № 3. — С. 033403.
62. Feshbach resonances in ultracold gases [Текст] / C. Chin [и др.] // Reviews of Modern Physics. — 2010. — Т. 82, № 2. — С. 1225—1286.
63. *Greiner, M.* Optical lattices [Текст] / M. Greiner, S. Fölling // Nature. — 2008. — Т. 453, № 7196. — С. 736—738.
64. *Windpassinger, P.* Engineering novel optical lattices [Текст] / P. Windpassinger, K. Sengstock // Reports on progress in physics. — 2013. — Т. 76, № 8. — С. 086401.
65. Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond [Текст] / M. Lewenstein [и др.] // Advances in Physics. — 2007. — Т. 56, № 2. — С. 243—379.
66. *Krinner, S.* Two-terminal transport measurements with cold atoms [Текст] / S. Krinner, T. Esslinger, J.-P. Brantut // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2017. — Т. 29, № 34. — С. 343003.
67. Band and correlated insulators of cold fermions in a mesoscopic lattice [Текст] / M. Lebrat [и др.] // Physical Review X. — 2018. — Т. 8, № 1. — С. 011053.
68. High-resolution scanning electron microscopy of an ultracold quantum gas [Текст] / T. Gericke [и др.] // Nature Physics. — 2008. — Т. 4, № 12. — С. 949—953.

69. In situ observation of incompressible Mott-insulating domains in ultracold atomic gases [Текст] / N. Gemelke [и др.] // Nature. — 2009. — Т. 460, № 7258. — С. 995—998.
70. Single-spin addressing in an atomic Mott insulator [Текст] / C. Weitenberg [и др.] // Nature. — 2011. — Т. 471, № 7338. — С. 319—324.
71. Conduction of ultracold fermions through a mesoscopic channel [Текст] / J.-P. Brantut [и др.] // Science. — 2012. — Т. 337, № 6098. — С. 1069—1071.
72. A thermoelectric heat engine with ultracold atoms [Текст] / J.-P. Brantut [и др.] // Science. — 2013. — Т. 342, № 6159. — С. 713—715.
73. Quantized conductance through a spin-selective atomic point contact [Текст] / M. Lebrat [и др.] // Physical review letters. — 2019. — Т. 123, № 19. — С. 193605.
74. Quantized conductance through a dissipative atomic point contact [Текст] / L. Corman [и др.] // Physical Review A. — 2019. — Т. 100, № 5. — С. 053605.
75. Interaction-assisted reversal of thermopower with ultracold atoms [Текст] / S. Häusler [и др.] // Physical Review X. — 2021. — Т. 11, № 2. — С. 021034.
76. Irreversible entropy transport enhanced by fermionic superfluidity [Текст] / P. Fabritius [и др.] // Nature Physics. — 2024. — Т. 20, № 7. — С. 1091—1096.
77. *Kraus, K.* General state changes in quantum theory [Текст] / K. Kraus // Annals of Physics. — 1971. — Т. 64, № 2. — С. 311—335.
78. *Nielsen, M. A.* Quantum computation and quantum information [Текст] / M. A. Nielsen, I. L. Chuang. — Cambridge university press, 2010.
79. *Nakajima, S.* On quantum theory of transport phenomena: Steady diffusion [Текст] / S. Nakajima // Progress of Theoretical Physics. — 1958. — Т. 20, № 6. — С. 948—959.
80. *Zwanzig, R.* Ensemble method in the theory of irreversibility [Текст] / R. Zwanzig // The Journal of Chemical Physics. — 1960. — Т. 33, № 5. — С. 1338—1341.
81. The dissipative Bose-Hubbard model: Methods and examples [Текст] / G. Kordas [и др.] // The European Physical Journal Special Topics. — 2015. — Т. 224. — С. 2127—2171.

82. Open Bose-Hubbard chain: Pseudoclassical approach [Текст] / A. A. Bychek [и др.] // Physical Review E. — 2020. — Т. 101, № 1. — С. 012208.
83. *Lledó, C.* A dissipative time crystal with or without Z2 symmetry breaking [Текст] / C. Lledó, M. H. Szymańska // New Journal of Physics. — 2020. — Т. 22, № 7. — С. 075002.
84. *Lacerda, A. M.* Dephasing enhanced transport in boundary-driven quasiperiodic chains [Текст] / A. M. Lacerda, J. Goold, G. T. Landi // Physical Review B. — 2021. — Т. 104, № 17. — С. 174203.
85. The bosonic skin effect: Boundary condensation in asymmetric transport [Текст] / L. Garbe [и др.] // SciPost Physics. — 2024. — Т. 16, № 1. — С. 029.
86. *Muraev, P. S.* Signatures of quantum chaos and fermionization in the incoherent transport of bosonic carriers in the Bose-Hubbard chain [Текст] / P. S. Muraev, D. N. Maksimov, A. R. Kolovsky // Physical Review E. — 2024. — Т. 109, № 3. — С. 1032107.
87. *Боголюбов, Н. Н.* Избранные труды по статистической физике [Текст] / Н. Н. Боголюбов. — Москва : Московский университет, 1979. — 344 с.
88. *Tikhonenkov, I.* Quantum dynamics of Bose-Hubbard Hamiltonians beyond the Hartree-Fock-Bogoliubov approximation: the Bogoliubov back-reaction approximation [Текст] / I. Tikhonenkov, J. Anglin, A. Vardi // Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2007. — Т. 75, № 1. — С. 013613.
89. Beyond mean-field dynamics in open Bose-Hubbard chains [Текст] / D. Witthaut [и др.] // Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2011. — Т. 83, № 6. — С. 063608.
90. *Kolovsky, A. R.* Open Fermi-Hubbard model: Landauer’s versus master equation approaches [Текст] / A. R. Kolovsky // Physical Review B. — 2020. — Т. 102, № 17. — С. 174310.
91. *Kolovsky, A. R.* Resonant transmission of fermionic carriers: Comparison between solid-state physics and quantum optics approaches [Текст] / A. R. Kolovsky, D. N. Maksimov // Physical Review B. — 2021. — Т. 104, № 11. — С. 115115.

92. *Maksimov, D. N.* Non-Markovian master equation for quantum transport of fermionic carriers [Текст] / D. N. Maksimov, S. Aksenov, A. Kolovsky // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2023. — Т. 36, № 4. — С. 045301.
93. *Kolovsky, A. R.* Deriving Landauer's formula by using the master equation approach [Текст] / A. R. Kolovsky // Europhysics Letters. — 2024. — Т. 146, № 6. — С. 61001.
94. *Gross, E. P.* Structure of a quantized vortex in boson systems [Текст] / E. P. Gross // Il Nuovo Cimento (1955-1965). — 1961. — Т. 20, № 3. — С. 454—477.
95. *Питаевский, Л. П.* Вихревые линии в неидеальном бозе-газе [Текст] / Л. П. Питаевский // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1961. — Т. 40, № 2. — С. 646—651.
96. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases [Текст] / F. Dalfovo [и др.] // Reviews of modern physics. — 1999. — Т. 71, № 3. — С. 463.
97. *Vogel, K.* Quantum-tunneling rates and stationary solutions in dispersive optical bistability [Текст] / K. Vogel, H. Risken // Physical Review A. — 1988. — Т. 38, № 5. — С. 2409.
98. Dynamical quantum noise in trapped Bose-Einstein condensates [Текст] / M. J. Steel [и др.] // Physical Review A. — 1998. — Т. 58, № 6. — С. 4824.
99. *Trimborn, F.* Exact number-conserving phase-space dynamics of the M-site Bose-Hubbard model [Текст] / F. Trimborn, D. Witthaut, H. Korsch // Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2008. — Т. 77, № 4. — С. 043631.
100. *Weinbub, J.* Recent advances in Wigner function approaches [Текст] / J. Weinbub, D. Ferry // Applied Physics Reviews. — 2018. — Т. 5, № 4.
101. *Kolovsky, A. R.* Bloch oscillations of Bose-Einstein condensates: Quantum counterpart of dynamical instability [Текст] / A. R. Kolovsky, H. J. Korsch, E.-M. Graefe // Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2009. — Т. 80, № 2. — С. 023617.
102. Interaction-induced quantum phase revivals and evidence for the transition to the quantum chaotic regime in 1D atomic Bloch oscillations [Текст] / F. Meinert [и др.] // Physical Review Letters. — 2014. — Т. 112, № 19. — С. 193003.

103. *Kruglikov, L.* Chaos and quantum regimes in  $n$ -photon driven, dissipative bosonic chains [Текст] / L. Kruglikov, F. Ferrari, V. Savona. — 08/2025. — arXiv preprint arXiv:2508.13398.
104. *Graefe, E.* Semiclassical quantization of an N-particle Bose-Hubbard model [Текст] / E. Graefe, H. Korsch // Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2007. — Т. 76, № 3. — С. 032116.
105. Colloquium: Artificial gauge potentials for neutral atoms [Текст] / J. Dalibard [и др.] // Reviews of Modern Physics. — 2011. — Т. 83, № 4. — С. 1523—1543.
106. Boson localization and the superfluid-insulator transition [Текст] / M. P. Fisher [и др.] // Physical Review B. — 1989. — Т. 40, № 1. — С. 546.
107. *Kolovsky, A. R.* Quantum chaos in the Bose-Hubbard model [Текст] / A. R. Kolovsky, A. Buchleitner // Europhysics Letters. — 2004. — Т. 68, № 5. — С. 632.
108. *Kolovsky, A. R.* Bose-Hubbard hamiltonian: quantum chaos approach [Текст] / A. R. Kolovsky // International Journal of Modern Physics B. — 2016. — Т. 30, № 10. — С. 1630009.
109. Recent progress on quantum simulations of non-standard Bose-Hubbard models [Текст] / T. Chanda [и др.] // Reports on Progress in Physics. — 2024.
110. *Kolovsky, A. R.* Landauer-Büttiker equation for bosonic carriers [Текст] / A. R. Kolovsky, Z. Denis, S. Wimberger // Physical Review A. — 2018. — Т. 98, № 4. — С. 043623.
111. *Bixon, M.* Brownian motion of a nonlinear oscillator [Текст] / M. Bixon, R. Zwanzig // Journal of Statistical Physics. — 1971. — Т. 3, № 3. — С. 245—260.
112. *Ахманов, С. А.* Введение в статистическую радиофизику и оптику [Текст] / С. А. Ахманов, Ю. Е. Дьяков, А. С. Чиркин. — Москва : Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1981. — 640 с.
113. Interaction induced delocalization for two particles in a periodic potential [Текст] / J. Vidal [и др.] // Physical review letters. — 2000. — Т. 85, № 18. — С. 3906.

114. *Longhi, S.* Effective magnetic fields for photons in waveguide and coupled resonator lattices [Текст] / S. Longhi // Optics letters. — 2013. — Т. 38, № 18. — С. 3570—3573.
115. *Mukherjee, S.* Observation of localized flat-band modes in a quasi-one-dimensional photonic rhombic lattice [Текст] / S. Mukherjee, R. R. Thomson // Optics letters. — 2015. — Т. 40, № 23. — С. 5443—5446.
116. *Khomeriki, R.* Landau-Zener Bloch oscillations with perturbed flat bands [Текст] / R. Khomeriki, S. Flach // Physical Review Letters. — 2016. — Т. 116, № 24. — С. 245301.
117. *Kolovsky, A. R.* Topological flat wannier-stark bands [Текст] / A. R. Kolovsky, A. Ramachandran, S. Flach // Physical Review B. — 2018. — Т. 97, № 4. — С. 045120.
118. *Kim, K. W.* Anomalous transport in a topological Wannier-Stark ladder [Текст] / K. W. Kim, A. Andreanov, S. Flach // Physical Review Research. — 2020. — Т. 2, № 2. — С. 023067.
119. *Danieli, C.* Many-body flatband localization [Текст] / C. Danieli, A. Andreanov, S. Flach // Physical Review B. — 2020. — Т. 102, № 4. — С. 041116.
120. *Bychek, A. A.* Decay of symmetry-protected quantum states [Текст] / A. A. Bychek, D. N. Maksimov, A. R. Kolovsky // Physical Review A. — 2020. — Т. 102, № 3. — С. 033324.
121. Experimental realization of strong effective magnetic fields in an optical lattice [Текст] / M. Aidelsburger [и др.] // Physical review letters. — 2011. — Т. 107, № 25. — С. 255301.
122. Flat-band localization and interaction-induced delocalization of photons [Текст] / J. G. Martinez [и др.] // Science Advances. — 2023. — Т. 9, № 50. — eadj7195.
123. Compact localized states in electric circuit flat-band lattices [Текст] / C. Chase-Mayoral [и др.] // Physical Review B. — 2024. — Т. 109, № 7. — С. 075430.
124. Realization and characterization of an all-bands-flat electrical lattice [Текст] / N. Lape [и др.] // Physical Review B. — 2025. — Т. 112. — С. 184309.

125. *Muraev, P. S.* Quantum transport in a one-dimensional flux rhombic lattice [Текст] / P. S. Muraev, A. R. Kolovsky // Quantum Electronics. — 2021. — Т. 51, № 6. — С. 502—505.
126. *Мураев, П. С.* Квантовый транспорт холодных бозе-атомов в ромбической оптической решетке под действием внешнего искусственного магнитного поля [Текст] / П. С. Мураев, А. Р. Коловский // Физика ультрахолодных атомов - 2020. Тезисы докладов 14-ой Всероссийской научной конференции. Новосибирск, 2020. — 2020.
127. *Мураев, П. С.* Квантовый транспорт холодных бозе-атомов в ромбической решетке под действием внешнего искусственного магнитного поля [Текст] / П. С. Мураев // Междисциплинарная конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXIV). — 2021.
128. *Мураев, П. С.* Переход изолятор-проводник для взаимодействующих бозонов в ромбической решетке [Текст] / П. С. Мураев // Междисциплинарная конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXVI). — 2023.
129. *Muraev, P. S.* Resonant transport of bosonic carriers through a quantum device [Текст] / P. S. Muraev, D. N. Maksimov, A. R. Kolovsky // Physical Review A. — 2022. — Т. 105, № 1. — С. 013307.
130. *Zelovich, T.* State representation approach for atomistic time-dependent transport calculations in molecular junctions [Текст] / T. Zelovich, L. Kronik, O. Hod // Journal of chemical theory and computation. — 2014. — Т. 10, № 8. — С. 2927—2941.
131. *Gruss, D.* Landauer's formula with finite-time relaxation: Kramers' crossover in electronic transport [Текст] / D. Gruss, K. A. Velizhanin, M. Zwolak // Scientific Reports. — 2016. — Т. 6, № 1. — С. 24514.
132. *Zelovich, T.* Driven Liouville von Neumann approach for time-dependent electronic transport calculations in a nonorthogonal basis-set representation [Текст] / T. Zelovich, L. Kronik, O. Hod // The Journal of Physical Chemistry C. — 2016. — Т. 120, № 28. — С. 15052—15062.

133. *Мураев, П. С.* Некоторые особенности проводимости в двухтерминальном фермионном транспорте [Текст] / П. С. Мураев, Д. Н. Максимов, А. Р. Колосский // Физика ультрахолодных атомов - 2024. Программа и тезисы докладов 18-ой Всероссийской научной конференции с международным участием. Новосибирск, 2024. — 2024.
134. Liouvillian skin effect: Slowing down of relaxation processes without gap closing [Текст] / Т. Haga [и др.] // Physical Review Letters. — 2021. — Т. 127, № 7. — С. 070402.
135. Unified Interface Model for Dissipative Transport of Bosons and Fermions [Текст] / Y. Minoguchi [и др.] // Physical Review Letters. — 2025. — Т. 134, № 20. — С. 207102.
136. *Prosen, T.* Eigenvalue statistics as an indicator of integrability of nonequilibrium density operators [Текст] / T. Prosen, M. Žnidarič // Physical review letters. — 2013. — Т. 111, № 12. — С. 124101.
137. *Žnidarič, M.* Magnetization transport in spin ladders and next-nearest-neighbor chains [Текст] / M. Žnidarič // Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. — 2013. — Т. 88, № 20. — С. 205135.
138. *Sá, L.* Complex spacing ratios: A signature of dissipative quantum chaos [Текст] / L. Sá, P. Ribeiro, T. Prosen // Physical Review X. — 2020. — Т. 10, № 2. — С. 021019.
139. *Li, J.* Spectral statistics of non-hermitian matrices and dissipative quantum chaos [Текст] / J. Li, T. Prosen, A. Chan // Physical review letters. — 2021. — Т. 127, № 17. — С. 170602.
140. *Richter, J.* Integrability versus chaos in the steady state of many-body open quantum systems [Текст] / J. Richter, L. Sá, M. Haque // Physical Review E. — 2025. — Т. 111, № 6. — С. 064103.
141. *Wigner, E. P.* On the statistical distribution of the widths and spacings of nuclear resonance levels [Текст] / E. P. Wigner // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. Т. 47. — Cambridge University Press. 1951. — С. 790—798.
142. *Haake, F.* Quantum signatures of chaos [Текст] / F. Haake // Quantum coherence in mesoscopic systems. — Springer, 1991. — С. 583—595.



143. *Stöckmann, H.-J.* Quantum Chaos: An Introduction [Текст] / H.-J. Stöckmann. — Cambridge : Cambridge University Press, 1999.
144. Tonks–Girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice [Текст] / B. Paredes [и др.] // Nature. — 2004. — Т. 429, № 6989. — С. 277–281.
145. *Мураев, П. С.* Признаки квантового хаоса и фермионизации в некогерентном транспорте бозонов в цепочке Бозе-Хаббарда [Текст] / П. С. Мураев, Д. Максимов, А. Р. Коловский // Физика ультрахолодных атомов - 2023. Тезисы докладов 17-ой Всероссийской научной конференции с международным участием. Новосибирск, 2023. — 2023.