

Dinamika Puritas pada Sistem Materi Terkondensasi Banyak State: Studi Teoritik dengan Metode Ekspansi Puritas pada Interval Waktu Sangat Singkat dan Model Bath Harmonik = Purity Dynamics in Multi State System in Condensed Phases: Theoretical Study Based on Very Short Time Purity Expansion and Harmonic Bath Model

Muhammad Syahrul Zain, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920549304&lokasi=lokal>

Abstrak

Sistem kuantum yang berinteraksi dengan lingkungan dapat mengalami dekoherensi kuantum yang merusak sifat-sifat kuantum. Untuk menguantifikasi dekoherensi state elektronik pada sistem molekul, dapat digunakan ekspansi density matrix dan aproksimasi crude Born-Oppenheimer untuk memperoleh evolusi puritas pada skala waktu pendek. Pada laporan ini, dipelajari dekoherensi sistem elektronik pada molekul untuk sembarang jumlah state karena interaksi dengan lingkungan nuklir. Untuk model lingkungan nuklir, digunakan model yang dikembangkan oleh Hu, Brian, & Sun (2021) berupa bath harmonik yang konsisten dengan energi reorganisasi (model MSH). Pada penelitian ini diformulasikan bentuk eksplisit skala waktu dekoherensi berdasarkan dinamika puritas pada skala waktu pendek dan model MSH sebagai lingkungan nuklir. Selain itu, dilakukan juga perhitungan puritas menggunakan metode hierarchical equation of motion sebagai komparasi. Sejalan dengan hasil penelitian Gu & Franco (2018) untuk dua dan tiga state, skala waktu dekoherensi elektronik untuk waktu pendek bergantung pada kontribusi dari tiga jenis fluktuasi operator nuklir yaitu energy gap permukaan energi potensial, kopling elektron-nuklir off-diagonal, dan interferensi keduanya. Pada kasus tanpa kopling off-diagonal, diperoleh dinamika puritas yang cukup sesuai dengan metode hierarhical equation of motion khususnya pada lingkungan dengan fungsi korelasi waktu yang konvergen dan waktu korelasi lingkungan yang panjang. Ketika kopling off-diagonal linier diperhitungkan, kompetisi antara ketiga jenis kontribusi dapat teramati. Selain itu, kopling off-diagonal linier menyebabkan jumlah state dapat memengaruhi ketahanan skala waktu dekoherensi terhadap perubahan fase relatif.

.....A quantum system interacting with its surrounding environment may undergo quantum decoherence that leads to destruction of quantum properties. In quantifying electronic state decoherence for molecular systems, a method based on density matrix expansion and crude Born-Oppenheimer approximation can be used to obtain short time purity dynamics. In this report, we study electronic decoherence dynamics in molecular system for arbitrary number of states due to electron-nuclear interaction. For the nuclear enviroentment, a multistate harmonic bath model (MSH model) developed by Hu, Brian, & Sun (2021) that comply with reorganization energies constrain was used. In this work we formulated a more explicit decoherence timescale expression based on short time purity dynamics and MSH model as nuclear enviroentment. For comparison purposes, calculation using hierarchical equation of motion method was also carried out. In accordance with the work of Gu & Franco (2018) for two and three states, we obtain that short time electronic decoherence timescale for system with abritrary number of state depends on contributions from three types of nuclear operator fluctuation: potential energy surface gap, off-diagonal electron-nuclear coupling, dan interference of both types. In absence of off-diagonal coupling, the obtained purity dynamics is in good agreement with hierarchical equation of motion method especially for the case of

converging time correlation function and long environment correlation time. With the inclusion of linear off-diagonal coupling, competition between three types of contribution may be observed. We also obtain that the stability of decoherence timescale with respect to changes in relative phases of states may differ for different number of states.