

高效级联量子耗散动力学计算相干二维光谱方法的发展

Advancing Hierarchical Equations of Motion for Efficient Evaluation of Coherent Two-dimensional Spectroscopy

摘要点击 404 全文点击 155 投稿时间: 2011-9-24 采用时间: 2011-9-28

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/05/497-506

中文关键词 [级联量子耗散方程组](#) [二维光谱](#) [混合海森堡-薛定谔方案](#)

英文关键词 [Hierarchical equations of motion](#) [Two-dimensional spectroscopy](#) [Mixed Heisenberg-Schrödinger scheme](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
许健	香港科技大学化学系, 九龙	
徐瑞雪*	中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室(筹), 合肥230026	rxxu@ustc.edu.cn
Darius Abramavicius	立陶宛维尔纽斯大学物理学院; 吉林大学超分子结构与材料国家重点实验室, 长春130012	
张厚道	香港科技大学化学系, 九龙	
严以京*	香港科技大学化学系, 九龙; 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室(筹), 合肥230026; 吉林大学超分子结构与材料国家重点实验室, 长春130012	yyan@ust.hk

中文摘要

为了能够高效计算非线性光学响应函数, 提出了级联方程组的混合海森堡-薛定谔方案以及块矩阵操作方法. 同时, 这些方法也与最近发展的级联方程组的最优构建和过滤传播子相结合, 模拟了不同光学四波混频配置下激子二聚体模型体系的相干二维光谱, 重点研究了其中分子间转移耦合和激子-激子相互作用的影响.

英文摘要

To advance hierarchical equations of motion as a standard theory for quantum dissipative dynamics, we put forward a mixed Heisenberg-Schrödinger scheme with block-matrix implementation on efficient evaluation of nonlinear optical response function. The new approach is also integrated with optimized hierarchical theory and numerical filtering algorithm. Different configurations of coherent two-dimensional spectroscopy of model excitonic dimer systems are investigated, with focusing on the effects of intermolecular transfer coupling and bi-exciton interaction.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计