

基于 Born-Markov 方程的生物分子间纠缠演化计算

廖昌要, 梁先庭*

(宁波大学 物理科学与技术学院, 浙江 宁波 315211)

摘要: 本文利用 Born-Markov 方程计算并分析了两个生物分子间的纠缠演化问题. Born-Markov 方程摒弃了传统方程中的久期近似, 并且重新计算了环境算符关联函数的傅里叶变换. 计算表明, 与经典的 Lindblad 方程相比, Born-Markov 方程得到的结果更加符合预期. 考虑两个相互耦合的发色团对(一种吸光分子)与一个多模的马尔可夫环境相互作用, 发现相比于不对称的生物分子, 对称的生物分子能够大大增加量子纠缠的持续时间.

关键词: Born-Markov 方程; 纠缠; 发色团对; 量子开放系统

中图分类号: O413.1

文献标志码: A

文章编号: 1001-5132 (2020) 03-0086-05

越来越多的研究表明, 生物分子间的能量传输是一个量子动力学过程^[1-3]. 这一认识为微观世界中能量传输的研究提供了广阔的空间. 这些对基本原理的探索将有助于阐明在各种光合作用系统中能量传输的微观机理. 最终, 人们期望发明出能有效传递能量的材料. 实验证明, 能量传输的高效性可归因于不同分子间的量子相干性以及量子纠缠^[4-5].

纠缠是量子力学最令人困惑的特征之一^[6-7]. 开放量子系统的纠缠动力学行为已经引起了广泛的关注, 因为它不仅是量子物理与经典物理的本质差别^[8], 也是一些量子系统中的核心问题^[9-11]. 通常两个量子系统相互作用可以产生纠缠^[12-13], 但是纠缠一般很脆弱. 所以, 纠缠在这些系统中能存在多久以及纠缠如何影响分子间的能量传输成为了人们关注的问题. 为了回答这些问题, 有必要对纠缠的动力学演化进行更深入的研究. 量子纠缠能大大提升捕光分子化学反应中心的能量传输效率^[14-15]. 在某些环境中, 两个相互耦合的发色团对会出现纠缠猝死(ESD)和纠缠猝生(ESB)现象. 然而, 目前还不清楚导致 ESD 和 ESB 现象的物理机制是什么.

本文研究了两个发色团对在热噪声环境下的纠缠动力学. 分别使用 Born-Markov 方程^[16]和 Lindblad 方程计算分析了两个对称的二能级发色团对分子在马尔可夫环境下的纠缠演化. 同时还对两个不对称的发色团对的纠缠演化进行了研究.

1 Born-Markov 方程

两个耦合强度为 J 的发色团对处于热噪声的环境中, 其哈密顿量可以描述为^[17]

$$H = \sum_{i=1,2} \frac{A_i}{2} \sigma_{x,i} + J(\sigma_{x,1} \sigma_{x,2} + \sigma_{y,1} \sigma_{y,2}) + \frac{1}{2}(\sigma_{z,1} + \sigma_{z,2}) \sum_k c_k (b_k^\dagger + b_k) + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k, \quad (1)$$

式中: A_i 为发色团对内部的耦合强度; $\sigma_{x,i}$ 、 $\sigma_{y,i}$ 、 $\sigma_{z,i}$ 为第 i 个发色团对的泡利算符; b_k 和 $b_k^\dagger$ 分别为第 k 个热噪声模的湮灭算符和产生算符; c_k 为系统与环境的耦合强度; ω_k 为环境谐振子的频率. 下文中, 利用谱密度函数 $J(\omega) = \sum_k [c_k^2 / (2m_k \omega_k)] \cdot \delta(\omega - \omega_k)$ 来描述量子热噪声环境的所有信息. 这里, 选择环境谱密度为洛伦兹谱,

$$J(\omega) = \frac{\zeta}{\pi \omega_0} \frac{\gamma^2 \omega}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (2)$$

收稿日期: 2019-10-08.

宁波大学学报(理工版)网址: <http://journal.g.nbu.edu.cn/>

基金项目: 国家自然科学基金(21773131); 宁波大学王宽诚幸福基金.

第一作者: 廖昌要(1994-), 男, 浙江温州人, 在读硕士研究生, 主要研究方向: 量子开放系统. E-mail: 13884417727@163.com

*通信作者: 梁先庭(1965-), 男, 湖南安化人, 教授, 主要研究方向: 量子耗散动力学理论与应用. E-mail: liangxianting@nbu.edu.cn

式中: ζ 为正比于系统-环境耦合强度的参数; γ 为热噪声环境谱密度的宽度, 与环境热噪声的相关时间有关, 即 $t_c = 1/\gamma$; ω_0 为特征频率.

利用 Born-Markov 方程计算约化密度矩阵的动力学演化. 系统-环境哈密顿量的一般形式可以写成

$$H = H_s + H_b + H_{sb}, \quad (3)$$

式中, H_s 、 H_b 、 H_{sb} 分别为系统、环境、系统环境之间相互作用的哈密顿量. 令

$$H_0 = H_s + H_b, H_1 = H_{sb}, H_1 = \sum_{\alpha} S_{\alpha} \otimes E_{\alpha}, \quad (4)$$

式中: H_0 为整个系统的自由哈密顿量; H_1 为相互作用哈密顿量; S_{α} 和 E_{α} 分别为系统和环境算符, 它们的相互作用表象形式为

$$\begin{aligned} S_{\alpha}(\tau) &= e^{iH_0\tau} S_{\alpha} e^{-iH_0\tau}, \\ E_{\alpha}(\tau) &= e^{iH_0\tau} E_{\alpha} e^{-iH_0\tau}. \end{aligned} \quad (5)$$

基于 Born 近似和 Markov 近似, 可以得到薛定谔表象的 Born-Markov 方程,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_s(t) &= -i[H_s, \rho_s(t)] - \\ &\sum_{\alpha} \{[S_{\alpha}, B_{\alpha} \rho_s(t)] + [\rho_s(t) C_{\alpha}, S_{\alpha}]\}, \end{aligned} \quad (6)$$

式中:

$$\begin{aligned} B_{\alpha} &= \int_0^{\infty} d\tau \sum_{\beta} W_{\alpha\beta}(\tau) S_{\beta}(-\tau), \\ C_{\alpha} &= \int_0^{\infty} d\tau \sum_{\beta} W_{\alpha\beta}(-\tau) S_{\beta}(-\tau), \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $W_{\alpha\beta}(\tau) = \text{Tr}_b \{E_{\alpha}(\tau) E_{\beta} \rho_b\}$ 为环境热噪声的时间关联函数. 假设不同模的环境热噪声的时间关联函数为 0, 即 $\alpha \neq \beta$ 时, $W_{\alpha\beta}(\tau) = 0$, 所以令 $W_{\alpha}(\tau) = W_{\alpha\alpha}(\tau)$. 根据文献[18], 假设热噪声环境是玻色环境, 满足玻色-爱因斯坦分布, 可以求出 $W_{\alpha}(\tau)$,

$$W_{\alpha}(\tau) = v_{\alpha}(\tau) - i\mu_{\alpha}(\tau). \quad (8)$$

为了实现多能级系统的数值求解, 文献[16]提出了一种可计算形式的 Born-Markov 方程. 首先求出 H_s 的对角化形式 $\tilde{H}_s$, 并得到对角化的哈密顿量主方程. 非对角化哈密顿量 H_s 的约化密度矩阵的演化可通过求解对角化的哈密顿量 $\tilde{H}_s$ 的 Born-Markov 方程得到.

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}_s(t) = -i[\tilde{H}_s, \tilde{\rho}_s(t)] -$$

$$\sum_{\alpha} \{[\tilde{S}_{\alpha}, \tilde{B}_{\alpha} \tilde{\rho}_s(t)] + [\tilde{\rho}_s(t) \tilde{C}_{\alpha}, \tilde{S}_{\alpha}]\}, \quad (9)$$

其中算符满足如下关系:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_s(t) &= V \rho_s V^{-1}, \tilde{S}_{\alpha} = V S_{\alpha} V^{-1}, \\ \tilde{B}_{\alpha} &= V B_{\alpha} V^{-1}, \tilde{C}_{\alpha} = V C_{\alpha} V^{-1}. \end{aligned} \quad (10)$$

于是, 可以利用对角化的哈密顿量 $\tilde{H}_0$ 来计算相互作用表象下的 $\tilde{S}_{\alpha}$,

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{\alpha}(-\tau) &= e^{-i\tilde{H}_0\tau} \tilde{S}_{\alpha} e^{i\tilde{H}_0\tau} \equiv \\ &\sum_{mn} \tilde{S}_{\alpha}^{mn}(-\tau) \mathbf{A}^{(mn)} = \sum_{mn} \tilde{S}_{\alpha}^{(mn)}(-\tau), \end{aligned} \quad (11)$$

式中: $\tilde{S}_{\alpha}^{mn}$ 表示 $\tilde{S}_{\alpha}$ 的矩阵元; $\mathbf{A}^{(mn)}$ 表示一个只在矩阵元 (m, n) 拥有值并且大小为 1 的矩阵. 为了方便计算, 将矩阵元 $\tilde{S}_{\alpha}^{mn}(-\tau)$ 以及相应矩阵 $\tilde{S}_{\alpha}^{(mn)}(-\tau)$ 表示成如下形式:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{\alpha}^{mn}(-\tau) &= \tilde{S}_{\alpha x}^{mn} \cos(\omega_{mn}\tau) + \tilde{S}_{\alpha y}^{mn} \sin(\omega_{mn}\tau), \\ \tilde{S}_{\alpha}^{(mn)}(-\tau) &= \tilde{S}_{\alpha x}^{(mn)} \cos(\omega_{mn}\tau) + \tilde{S}_{\alpha y}^{(mn)} \sin(\omega_{mn}\tau), \end{aligned} \quad (12)$$

式中, $\omega_{mn} = \lambda_n - \lambda_m$, λ_n 是哈密顿量 H_s 的本征值. 通过式(12)易得, $\tilde{S}_{\alpha x}^{(mn)}$ 和 $\tilde{S}_{\alpha y}^{(mn)}$ 的矩阵形式可表示为:

$$\tilde{S}_{\alpha x}^{(mn)} = \tilde{S}_{\alpha x}^{mn} \mathbf{A}^{(mn)}, \tilde{S}_{\alpha y}^{(mn)} = \tilde{S}_{\alpha y}^{mn} \mathbf{A}^{(mn)}. \quad (13)$$

由此可以计算 $\tilde{B}_{\alpha}$ 和 $\tilde{C}_{\alpha}$:

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{\alpha} &= \int_0^{\infty} d\tau [v_{\alpha}(\tau) - i\mu_{\alpha}(\tau)] \times \\ &\sum_{mn} [\tilde{S}_{\alpha x}^{(mn)} \cos(\omega_{mn}\tau) - \tilde{S}_{\alpha y}^{(mn)} \sin(\omega_{mn}\tau)] = \\ &\sum_{mn} (\bar{D}_{\alpha}^{mn} - i\bar{\kappa}_{\alpha}^{mn}) \tilde{S}_{\alpha x}^{mn} + (-\bar{f}_{\alpha}^{mn} + i\bar{\gamma}_{\alpha}^{mn}) \tilde{S}_{\alpha y}^{mn}, \\ \tilde{C}_{\alpha} &= \int_0^{\infty} d\tau [v_{\alpha}(\tau) + i\mu_{\alpha}(\tau)] \times \\ &\sum_{mn} [\tilde{S}_{\alpha x}^{(mn)} \cos(\omega_{mn}\tau) - \tilde{S}_{\alpha y}^{(mn)} \sin(\omega_{mn}\tau)] = \\ &\sum_{mn} (\bar{D}_{\alpha}^{mn} + i\bar{\kappa}_{\alpha}^{mn}) \tilde{S}_{\alpha x}^{mn} + (-\bar{f}_{\alpha}^{mn} - i\bar{\gamma}_{\alpha}^{mn}) \tilde{S}_{\alpha y}^{mn}. \end{aligned} \quad (14)$$

在环境谱密度取洛伦兹谱且不考虑二阶极点的情况下, $\bar{D}_{\alpha}^{mn}$ 、 $\bar{\kappa}_{\alpha}^{mn}$ 、 $\bar{f}_{\alpha}^{mn}$ 、 $\bar{\gamma}_{\alpha}^{mn}$ 可以精确计算^[16].

$$\begin{aligned} \bar{D}_{\alpha}^{mn} &= \frac{\pi}{2} J(\omega_{mn}) \coth\left(\frac{\omega_{mn}}{2T}\right), \\ \bar{\kappa}_{\alpha}^{mn} &= \frac{\eta\pi\Omega^2}{2(\Omega^2 + \omega_{mn}^2)}, \\ \bar{f}_{\alpha}^{mn} &= \sum_i \frac{2\pi\eta\Omega\bar{\omega}_i\omega_{mn}}{(\bar{\omega}_i^2 - \Omega^2)(\bar{\omega}_i^2 + \omega_{mn}^2)}, \\ \bar{\gamma}_{\alpha}^{mn} &= \frac{\pi}{2} J(\omega_{mn}), \end{aligned} \quad (15)$$

式中, $\bar{\omega}_n = 2n\pi k_B T$. 综上, 将式(13)代入式(9), 可以得到在薛定谔表象下可计算形式的 Born-Markov 方程,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_s(t) = & -i[\tilde{H}_s, \tilde{\rho}_s(t)] - \\ & \sum_{\alpha} \sum_{mn} \{ \bar{D}_{\alpha}^{mn} [\tilde{S}_{\alpha}, [\tilde{S}_{\alpha x}^{(mn)}, \tilde{\rho}_s(t)]] - \\ & i\bar{K}_{\alpha}^{mn} [\tilde{S}_{\alpha}, [\tilde{S}_{\alpha x}^{(mn)}, \tilde{\rho}_s(t)]] - \\ & \bar{f}_{\alpha}^{mn} [\tilde{S}_{\alpha}, [\tilde{S}_{\alpha y}^{(mn)}, \tilde{\rho}_s(t)]] + \\ & i\bar{y}_{\alpha}^{mn} [\tilde{S}_{\alpha}, [\tilde{S}_{\alpha x}^{(mn)}, \tilde{\rho}_s(t)]] \}. \end{aligned} \quad (16)$$

最后利用么正变换, 将对角化哈密顿量 $\tilde{H}_s$ 系统回到非对角化的哈密顿量 H_s 系统. 在非对角化的哈密顿量下, 约化密度为

$$\rho_s(t) = V^{-1} \tilde{\rho}_s(t) V. \quad (17)$$

可计算形式的 Born-Markov 方程可以用来求解一般的开放多能级系统. 由于没有使用久期近似, 并且对系数进行了精确的计算, 相比于传统的 Lindblad 方程, Born-Markov 方程包含了更多的信息. 这对更好地模拟开放系统态的演化有着非常重要的意义, 特别是在计算两体纠缠演化、量子关联等问题时具有巨大的优势.

2 两个对称发色团对的纠缠

Lindblad 方程由于形式简洁而被广泛用于求解量子开放系统^[19-20]. 其形式为

$$\frac{d}{dt} \rho_s(t) = -i[H, \rho_s(t)] + L(t)\rho_s(t), \quad (18)$$

式中, $L(t)$ 是一个超算符,

$$\begin{aligned} L(t)\rho_s(t) = & \sum_i (A_i \rho_s(t) A_i^{\dagger} - \\ & \frac{1}{2} A_i^{\dagger} A_i \rho_s(t) - \frac{1}{2} \rho_s(t) A_i^{\dagger} A_i), \end{aligned} \quad (19)$$

式中, A_i 和 $A_i^{\dagger}$ 是 Lindblad 算子. 利用前面得到的 Born-Markov 方程和 Lindblad 方程, 通过数值方法计算两个相同的发色团对系统的动力学演化.

首先计算发色团对开放系统的约化密度矩阵的演化. 根据文献[21-22], 选择以下参数, $T = 300 \text{ K}$, $\gamma = 500$, $\omega_0 = 2\zeta/3$, $J = 100$, $A_1 = A_2 = 500 \text{ cm}^{-1}$, 并且选择初态 $|\Phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$, 系统的约化密度矩阵元 $\rho_{11}(t)$ 和 $\rho_{22}(t)$ 的时间演化如图 1 所示, 可见图 1(a)所示的退相干时间更长.

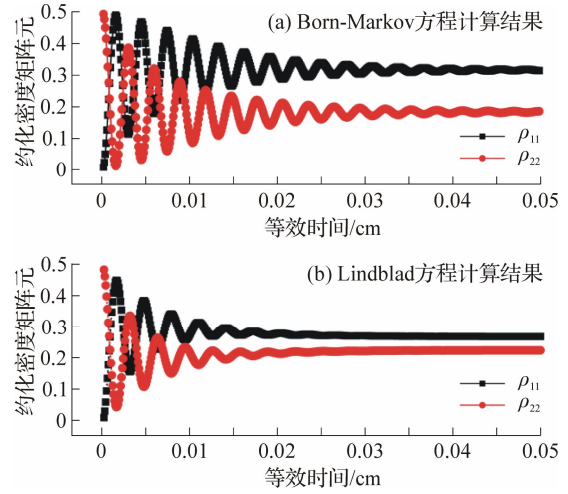


图 1 约化密度矩阵元的演化

接下来计算基于上述两个发色团对约化密度动力学的纠缠演化. Wootters 等^[23]首先于 1998 年提出 $C(t)$ 的概念, 可以通过计算 $C(t)$ 来描述二体纠缠度.

$$C(t) = \text{Max} \{0, 2\text{Max} \{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\} - \sum_{j=1}^4 \lambda_j\}, \quad (20)$$

式中, λ_i 为厄密算符 $R = \sqrt{\rho_s} \tilde{\rho}_s \sqrt{\rho_s}$ 的本征值, 定义 $\tilde{\rho}_s = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho_s^* (\sigma_y \otimes \sigma_y)$, σ_y 是泡利算符, ρ_s^* 是约化密度矩阵 ρ_s 的复共轭. 于是可以画出 $C(t)$ 的演化(图 2). 这里使用了与上一步相同的系数和初态.

在图 2(a)中, 可以清楚地看到 ESD 和 ESB 现象, 而且纠缠持续的时间远远长于图 2(b)中的纠缠演化. 对比图 1 与图 2, 可以看到纠缠的存活时间略微短于系统的退相干时间.

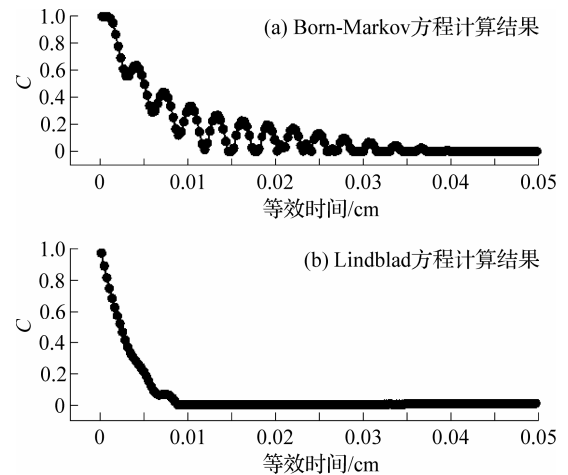


图 2 $C(t)$ 随时间的演化

3 不对称发色团对的纠缠

在一些生物分子中, 量子纠缠效应能够存在相当长的时间. 那么, 是什么因素造成了长寿命的量子纠缠效应? 一些研究表明, 生物分子所处的特殊环境会有益于纠缠的产生^[4-5,14-15]. 本文发现两个发色团对越相似, 它们之间的纠缠能够保持得越久.

为了研究这一问题, 计算中参数设置如下: $T = 300 \text{ K}$, $\gamma = 500$, $\omega_0 = 2\zeta/3$, $J = 100$, 并选取初态 $|\Phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$. 然后比较 Δ_1 与 Δ_2 取不同差值时两个不对称的发色团对的纠缠演化. 这里固定 Δ_2 不变, 通过调节 Δ_1 的值来控制 Δ_1 与 Δ_2 的差值.

图 3 中, 固定 Δ_2 为 500 cm^{-1} , 然后依次取 $\Delta_1 = 400, 300, 200, 100 \text{ cm}^{-1}$. 由图 3 可知, 两个发色团对越不对称, 生物分子之间保持纠缠的时间越短.

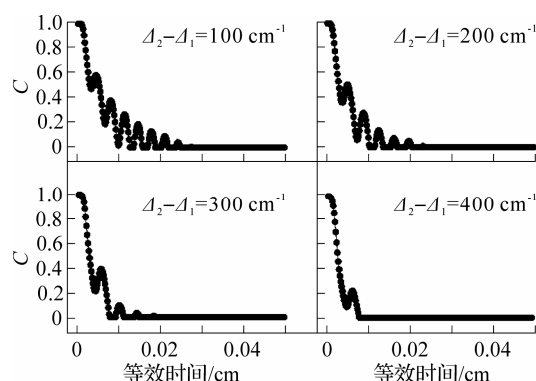


图 3 Δ_1 与 Δ_2 取不同差值时 $C(t)$ 随时间的演化

4 结论

本文利用 Born-Markov 方程计算了两个不对称的发色团对的纠缠演化. 相比于 Lindblad 方法, 未使用久期近似的 Born-Markov 方程能够更准确地描述系统的纠缠现象. 本文结果与文献[24]中使用路径积分方法得到的计算结果相吻合, 但是大大减少了计算量. 并且本研究还观察到了系统的 ESD 和 ESB 现象, 说明 Born-Markov 方程用于研究量子系统的纠缠演化动力学具有可行性. 最后, 计算发现生物分子的对称结构能够大大增加量子纠缠的持续时间. 这可为以后研发高效率能量传输材料提供一些理论依据.

参考文献:

- [1] van Grondelle R, Novoderezhkin V I. Energy transfer in photosynthesis: Experimental insights and quantitative models[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2006, 8(7):793-807.
- [2] Zhang W M, Meier T, Chemyak V, et al. Exciton-migration and three-pulse femtosecond optical spectroscopies of photosynthetic antenna complexes[J]. *Journal of Chemical Physics*, 1998, 108(18):7763-7774.
- [3] Liang X T. Non-Markov environment helps excitation energy transfer between chromophores of photosynthesis systems[J]. *Physical Review E*, 2010, 82(5):2889-2898.
- [4] Engel G S, Calhoun T R, Read E L, et al. Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems[J]. *Nature*, 2007, 446(7137): 782-786.
- [5] Lee H, Cheng Y C, Fleming G R. Coherence dynamics in photosynthesis: Protein protection of excitonic coherence [J]. *Science*, 2007, 316(5830):1462-1465.
- [6] Schrödinger E. Discussion of probability relations between separated systems[J]. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1935, 31(4):555-563.
- [7] Albert E, Boris P, Rosen N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete[J]. *Physical Review*, 1935, 47(10):696-702.
- [8] Bell J S. On the Einstein-Podolski-Rosen paradox[J]. *Physics*, 1964, 1(1):195.
- [9] Nielsen M A, Chuang I L. *Quantum Computation and Quantum Information*[M]. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2000.
- [10] Dodd P J, Halliwell J J. Disentanglement and decoherence by open system dynamics[J]. *Physical Review A*, 2004, 69(5):521-524.
- [11] Ghosh S, Rosenbaum T F, Aeppli G. Entangled quantum state of magnetic dipoles[J]. *Nature*, 2003, 425(6953):48-51.
- [12] Štelmachovič P, Bužek V. Quantum-information approach to the Ising model: Entanglement in chains of qubit[J/OL]. *Physical Review A*, 2004, 70(3):032313 [2018-09-21]. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.70.032313>.
- [13] Hutton A, Bose S. Mediated Entanglement and correlations in a star network of interacting spins[J]. *Physical Review A*, 2004, 69(4):361-367.
- [14] Brixner T, Stenger J, Vaswani H M, et al. Two-dimensional spectroscopy of electronic couplings in photosynthesis[J]. *Nature*, 2005, 434(7033):625-628.

- [15] Herek J L, Wohlleben W, Cogdell R J, et al. Quantum control of energy flow in light harvesting[J]. *Nature*, 2002, 417 (6888):533-535.
- [16] Liang X T. Computable form of the Born-Markov master equation for open multilevel quantum systems[J/OL]. *Physical Review A*, 2019, 99:022118 [2018-09-21]. <https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.99.022118>.
- [17] Thorwart M, Eckel J, Reina J H, et al. Enhanced quantum entanglement in the non-Markovian dynamics of biomolecular excitons[J]. *Chemical Physics Letters*, 2009, 478(4/5/6):234-237.
- [18] Breuer H P, Petruccione F. *The Theory of Open Quantum System*[M]. Oxford: Oxford University Press, 2006.
- [19] Mohseni M, Rebentrost P, Lloyd S, et al. Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer [J/OL]. *The Journal of Chemical Physics*, 2008, 129(17): 174106 [2018-09-21]. <https://doi.org/10.1063/1.3002335>.
- [20] Lindblad G. On the generators of quantum dynamical semigroups[J]. *Communications in Mathematical Physics*, 1976, 48(2):119-130.
- [21] Ishizaki A, Tanimura Y. Quantum dynamics of system strongly coupled to low-temperature colored noise bath: Reduced hierarchy equations approach[J]. *Journal of the Physical Society of Japan*, 2005, 74(12):3131-3134.
- [22] Liang X T. Initial decoherence and disentanglement of open two-qubit systems[J]. *Physics Letters A*, 2006, 349(1/2/3/4):98-103.
- [23] Wootters W K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits[J]. *Physics Review Letters*, 1998, 80:2245-2248.
- [24] Liu Z Q, Liang X T. Non-Markovian and non-perturbative entanglement dynamics of biomolecular excitons[J/OL]. *Chinese Physics Letters*, 2011, 28(8): 089201 [2018-09-21]. <http://cpl.iphy.ac.cn/CN/abstract/abstract44600.shtml>.

Computation of entanglement evolution between biomolecules based on Born-Markov equation

LIAO Changyao, LIANG Xianting*

(Faculty of Physical Science and Technology, Ningbo University, Ningbo 315211, China)

Abstract: In this paper Born-Markov equation is used to calculate and analyze the entanglement evolution between two biological molecules. The Born-Markov equation abandons the secular approximation used in the traditional equation and recalculates the Fourier transform of the environmental operator correlation function. Comparing with the classical Lindblad equation, the results obtained by the Born-Markov equation are more in line with expectations. In this paper, the interaction of two coupled chromophore pairs (an absorptive molecule) with a multimode Markov environment is taken into consideration. Finally, it is found that the symmetric structure of biological molecules can greatly enhance the duration of quantum entanglement as compared with that of the asymmetric biological molecules.

Key words: Born-Markov equation; entanglement; chromophore pairs; quantum open system

(责任编辑 韩 超)