Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. С. Кирчанов, Применение уравнения Линблада
к квантовым диссипативным системам, *ТМФ*, 2006,
том 148, номер 2, 288–294

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf2086>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.210.77.194

26 апреля 2023 г., 09:25:51

© 2006 г.

В. С. Кирчанов*

ПРИМЕНЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ЛИНБЛАДА К КВАНТОВЫМ ДИССИПАТИВНЫМ СИСТЕМАМ

Для квантовых систем с линейной диссипацией получено представление уравнения Линблада в канонической форме через эрмитовы операторы, на основе которого выведены уравнения для плотности энтропии и проекционного статистического оператора. В качестве примера рассмотрен квантовый гармонический осциллятор с линейной диссипацией.

Ключевые слова: квантовое управляющее уравнение, уравнение для плотности энтропии, метод проекционных операторов.

1. ВВЕДЕНИЕ

Полное описание открытых квантовых систем, которые обмениваются со средой веществом, импульсом, энергией и информацией, представляет важную нерешенную задачу. Обзор различных подходов к описанию квантовых диссипативных систем содержится в работе [1]. Обзор [2] посвящен связи этих систем с квантовыми измерениями. Математическое описание квантовых диссипативных систем базируется на теории квантового случайного процесса и квантовой регрессионной теореме [3] (см. также работы [4], [5]).

Уравнение Линблада [6] для квантовых систем с линейной диссипацией, полученное с помощью марковских полугрупп, является в сущности некоммутативным аналогом прямого уравнения Неймана–Колмогорова [7] для квантовой решетки и принадлежит к иерархии квантовых управляющих уравнений. Однако диссипативные операторы в уравнении Линблада не являются эрмитовыми, поэтому математическая структура этого уравнения не оптимальна для его применения.

Данная работа посвящена представлению уравнения Линблада через эрмитовы операторы, применению к нему метода проекционных операторов и выводу уравнения для плотности квантовой энтропии.

*Пермский государственный университет, Пермь, Россия. E-mail: Kirchanovvs@pstu.ru

2. КАНОНИЧЕСКАЯ ФОРМА УРАВНЕНИЯ ЛИНБЛАДА

УТВЕРЖДЕНИЕ. Пусть ρ есть статистический оператор, эрмитовы операторы A и B , введенные в работе [2], образуют коммутаторы

$$\hat{A}\rho = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}[A, \rho], \quad \hat{B}\rho = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}[B, \rho] \quad (2.1)$$

и антикоммутаторы

$$\hat{A}_+\rho = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}[A, \rho]_+, \quad \hat{B}_+\rho = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}[B, \rho]_+. \quad (2.2)$$

Тогда уравнение Линблада можно представить в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i\hat{L}\rho - \hat{\Omega}\rho = -\hat{F}\rho, \quad (2.3)$$

где

$$\hat{F} = i\hat{L} + \hat{\Omega} \quad (2.4)$$

– оператор уравнения,

$$\hat{L} \cdot = \frac{1}{\hbar}[H, \cdot] \quad (2.5)$$

– линейный супероператор Лиувилля,

$$\hat{\Omega} = \hat{A}^2 + \hat{B}^2 + i\hat{B}\hat{A}_+ - i\hat{A}\hat{B}_+ = \hat{K} + i\hat{M} \quad (2.6)$$

– квадратичный супероператор Линблада.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Уравнение Линблада для статистического оператора имеет вид [6], [4]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] - \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{j=1}^n (L_j^+ L_j \rho - 2L_j \rho L_j^+ + \rho L_j^+ L_j), \quad (2.7)$$

где L_i – диссипативные операторы, введенные в работе [6]. Рассмотрим случай $n = 1$, $L_1 = L$ и введем полную производную по формуле

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[H, \rho]. \quad (2.8)$$

Если записать операторы L , L^+ через операторы A и B ,

$$L = A - iB, \quad L^+ = A + iB, \quad (2.9)$$

то из (2.7) получаем уравнение

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] - \frac{i}{2\hbar^2} \{ [A[A, \rho]] + [B[B, \rho]] + i[B[A, \rho]_+] - i[A[B, \rho]_+] \}. \quad (2.10)$$

Если ввести обозначение для двойных коммутаторов:

$$\hat{A}^2 = \frac{1}{2\hbar^2}[A[A, \rho]], \quad \hat{B}^2 = \frac{1}{2\hbar^2}[B[B, \rho]], \quad (2.11)$$

и учесть (2.1), (2.2), (2.4)–(2.6), то уравнение (2.10) можно переписать в виде (2.3).

В приложении показано, что оператор Линблада можно также представить в виде суммы двух некоммутативных операторных детерминантов.

СЛЕДСТВИЕ. Уравнение Линблада для операторов наблюдаемых величин D в представлении Гейзенберга [6], [4],

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[H, D] + \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{j=1}^n (2L_j^+ D L_j - L_j^+ L_j D - D L_j^+ L_j), \quad (2.12)$$

в условиях утверждения можно представить в виде

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[H, D] + \frac{1}{2\hbar^2} \{[A[A, D]] + [B[B, D]] + i[B[A, D]]_+ - i[A[B, D]]_+\}, \quad (2.13)$$

или в виде

$$\frac{\partial D}{\partial t} = i\hat{L}D - \hat{\Xi}D, \quad (2.14)$$

где супероператор

$$\hat{\Xi} \equiv \hat{A}^2 + \hat{B}^2 + i\hat{B}_+ \hat{A} - i\hat{A}_+ \hat{B} \quad (2.15)$$

отличается от оператора (2.6) косэрмитовой частью.

ПРИМЕР 1. Квантовый гармонический осциллятор с линейной диссипацией. Если произвольные эрмитовы операторы A и B выразить через операторы импульса p и координаты q [2] как

$$A = \alpha p, \quad B = \beta q, \quad (2.16)$$

где α и β – действительные числа, то уравнение (2.11) примет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar}[H + W, \rho] - \frac{1}{2\hbar^2} \{ \alpha^2 [p, [p, \rho]] + \beta^2 [q, [q, \rho]] - \\ & - i\alpha\beta [p[q, \rho]]_+ + i\alpha\beta [q, [p, \rho]]_+ \}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

где

$$H = \alpha p^2 + \beta q^2, \quad (2.18)$$

$$W = \frac{1}{2}c(pq + qp) \quad (2.19)$$

– оператор энергии диссипации [4],

$$\hat{K} \cdot = \{ \alpha^2 [p, [p, \cdot]] + \beta^2 [q, [q, \cdot]] \} (2\hbar^2)^{-1} \quad (2.20)$$

– оператор “диффузии импульса и координаты” в фазовом пространстве,

$$i\hat{M} \cdot = i\{ \alpha\beta [p, [p, \cdot]]_+ - \alpha\beta [q, [p, \cdot]]_+ \} (2\hbar^2)^{-1} \quad (2.21)$$

– оператор “скорости рассеяния импульса и координаты” в фазовом пространстве.

Уравнение (2.17) с точностью до коэффициентов совпадает с уравнением Менского [2].

ПРИМЕР 2. Уравнение для плотности энтропии квантовой системы. Пусть оператор плотности энтропии есть $\eta = -\ln \rho$, и его среднее значение имеет вид

$$S = \langle \eta \rangle = -\text{Sp}(\rho \ln \rho), \quad (2.22)$$

тогда, взяв частную производную по времени от выражения (2.22), считая, что она коммутирует со следом, используя уравнение Линблада в форме (2.10) и свойства следа [8], можно получить уравнение для плотности энтропии квантовой системы в виде

$$\frac{\partial \langle \eta \rangle}{\partial t} = -\frac{i}{2\hbar^2} \{ \langle 2[B, A]\eta \rangle + \langle B\eta A \rangle - \langle A\eta B \rangle \}. \quad (2.23)$$

Если положить, как и ранее, $A = \alpha p$, $B = \beta q$, то получаем следующее уравнение энтропии квантового гармонического осциллятора:

$$\frac{\partial \langle \eta \rangle}{\partial t} = +\delta \langle \eta \rangle + i\frac{\delta}{\hbar} (\langle q\eta p \rangle - \langle p\eta q \rangle), \quad (2.24)$$

где $\delta = \alpha\beta/\hbar$. Из уравнения (2.24) вытекает, что плотность энтропии, найденная из уравнения Линблада, возрастает в отличие от плотности энтропии, полученной из уравнения Неймана [9].

3. КВАНТОВОЕ УПРАВЛЯЮЩЕЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СОКРАЩЕННОГО СТАТОПЕРАТОРА

ТЕОРЕМА. Пусть

1) P и Q – проекторы, не зависящие от времени, причем

$$P + Q = 1, \quad PQ = QP; \quad (3.1)$$

2) сокращенные статистические операторы имеют вид

$$\rho_1(t) = P\rho(t), \quad \rho_2(t) = Q\rho(t), \quad \rho = \rho_1 + \rho_2; \quad (3.2)$$

3) начальные условия следующие:

$$\rho_1(0) = \rho_{10}, \quad \rho_2(0) = 0; \quad (3.3)$$

4) статистический оператор подчиняется уравнению Линблада

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\hat{F}\rho. \quad (3.4)$$

Тогда для оператора $\rho_1(t)$ справедливо уравнение

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + P\hat{F}\rho_1 = \int_0^1 P\hat{F}e^{-Q\hat{F}\tau}Q\hat{F}\rho_1(t-\tau) d\tau. \quad (3.5)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Применяя к уравнению (3.4) последовательно операторы P и Q , получим

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + P\hat{F}\rho_1 = -P\hat{F}\rho_2, \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + Q\hat{F}\rho_2 = -Q\hat{F}\rho_1. \quad (3.7)$$

С учетом условия $\rho_2(0) = 0$ решение уравнения (3.7) имеет вид

$$\rho_2(t) = - \int_0^t e^{-Q\hat{F}\tau} Q\hat{F}\rho_1(t - \tau) d\tau. \quad (3.8)$$

Если подставить это решение в (3.6), получаем уравнение (3.5).

Обозначим ядро уравнения (3.5) как

$$K(\tau) = \frac{d}{d\tau}(e^{-Q\hat{F}\tau}) = -Q\hat{F}e^{-Q\hat{F}\tau}, \quad (3.9)$$

тогда, вводя для интегрального члена уравнения (3.5) свертку

$$K(t) * \rho_1(t) = \int_0^t K(\tau)\rho_1(t - \tau) d\tau, \quad (3.10)$$

перепишем уравнение (3.5) в виде

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + P\hat{F}\rho_1 + P\hat{F}K * \rho_1 = 0. \quad (3.11)$$

Таким образом, тождественные выражения (3.5) и (3.11) представляют собой квантовое управляющее уравнение для сокращенного статистического оператора, которое является интегродифференциальным уравнением типа свертки. При $\Omega = 0$ это уравнение превращается в уравнение Цванцига [10].

Получим формальное решение уравнения (3.11) методом преобразования Лапласа. Используя формулы (мы применяем для преобразования Лапласа обозначение $\circ\bullet$ из работы [11])

$$\rho_1(t) \circ\bullet sR(s) - \rho_{10}, \quad P\hat{F}\rho_1(t) \circ\bullet P\hat{F}R(s), \quad K * \rho_1 \circ\bullet K(s)R(s), \quad (3.12)$$

получаем

$$R(s) = \left(s + P\hat{F} \left(\frac{s}{s + Q\hat{F}} \right) \right)^{-1} \rho_{10}. \quad (3.13)$$

Если ввести обозначения

$$x(s) = b \frac{1}{s + a}, \quad b = P\hat{F}, \quad a = Q\hat{F}, \quad (3.14)$$

то изображение можно представить в виде ряда:

$$R(s) = (1 + x)^{-1} s^{-1} \rho_{10} = \left(\frac{1}{s} - \frac{x}{s} + \frac{x^2}{s} - \frac{x^3}{s} + \dots \right) \rho_{10}, \quad x^2 < 1. \quad (3.15)$$

Используя формулы обратного преобразования

$$\begin{aligned} \frac{1}{s} \circ \bullet 1, \quad -\frac{x}{s} \circ \bullet -b(1 - e^{-at})a^{-1}, \\ \frac{x^2}{s} = b\left(\frac{1}{s+a}\right)b\left(\frac{1}{s+a}\right)\frac{1}{s} \circ \bullet \int_0^t be^{-a\tau}b(1 - e^{-a(t-\tau)})a^{-1} d\tau, \end{aligned} \quad (3.16)$$

получаем решение уравнения (3.11) в виде ряда Неймана [11]:

$$\begin{aligned} \rho_1(t) = \{1 - b(1 - e^{at})a^{-1} + be^{-at} * b(1 - e^{-at})a^{-1} - \\ - be^{-at} * be^{-at} * b(1 - e^{-at})a^{-1} + \dots\} \rho_{10}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Уравнение

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + P(i\hat{L} + \hat{\Omega})\rho_1 = + \int_0^1 P(i\hat{L} + \hat{\Omega})e^{-(1-P)(i\hat{L} + \hat{\Omega})\tau}(1 - P)(i\hat{L} + \hat{\Omega})\rho_1(t - \tau) d\tau \quad (3.18)$$

имеет решение, содержащее супероператоры L и Q в общем виде, которое можно записать как сходящийся ряд:

$$\begin{aligned} \rho_1(t) = \left\{ 1 - P(i\hat{L} + \hat{\Omega})(1 - e^{-(1-P)(i\hat{L} + \hat{\Omega})t})[(1 - P)(i\hat{L} + \hat{\Omega})]^{-1} + \right. \\ \left. + \int_0^1 P(i\hat{L} + \hat{\Omega})e^{-(1-P)(i\hat{L} + \hat{\Omega})\tau}(1 - e^{-(1-P)(i\hat{L} + \hat{\Omega})(t-\tau)}) \times \right. \\ \left. \times [(1 - P)(i\hat{L} + \hat{\Omega})]^{-1} d\tau + \dots \right\} \rho_{10}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

В заключение отметим, что уравнение Линблада имеет безупречное математическое и физическое обоснование. Простое введение пары выбираемых эрмитовых операторов придает уравнению Линблада форму, удобную для применения к квантовым системам, что позволяет получить квантовые управляющие уравнения и диссипативное уравнение для плотности квантовой энтропии.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Пусть $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ – матрица не коммутирующих друг с другом операторов a, b, c, d .

Зададим определитель этой матрицы операторов как

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - cb. \quad (\text{П.1})$$

Тогда коммутатор двух операторов a и b можно представить в виде определителя:

$$[a, b] = ab - ba = \begin{vmatrix} a & a \\ b & b \end{vmatrix}, \quad (\text{П.2})$$

а антикоммутатор этих операторов принимает вид

$$[a, b]_+ = ab + ba = \begin{vmatrix} a & -a \\ b & b \end{vmatrix}. \quad (\text{П.3})$$

Преимущество такого обозначения состоит в том, что с помощью единой конструкции описываются коммутаторы, антикоммутаторы и определители матриц операторов.

Например, уравнение Линблада (2.10) можно представить в виде

$$\frac{d\rho}{dt} = \begin{vmatrix} \hat{A} & -\hat{B} \\ \hat{B} & \hat{A} \end{vmatrix} \rho + i \begin{vmatrix} \hat{B} & \hat{B}_+ \\ \hat{A} & \hat{A}_+ \end{vmatrix} \rho. \quad (\text{П.4})$$

Список литературы

- [1] В. Е. Тарасов, *ТМФ*, **100**:3 (1994), 402.
- [2] М. Б. Менский, *УФН*, **173**:11 (2003), 1199.
- [3] *Квантовые случайные процессы и открытые системы*, Сб. статей 1982–84 г.г., ред. А. Н. Колмогоров, С. П. Новиков, Мир, М., 1988.
- [4] R. L. Stratonovich, *Physica A*, **236** (1997), 335.
- [5] А. С. Холево, *Вероятностные и статистические аспекты квантовой теории*, Наука, М., 1980.
- [6] G. Linblad, *Commun. Math. Phys.*, **48**:2 (1976), 119.
- [7] В. С. Кирчанов, *Изв. Вузов, Физика*, 2000, № 9, 89.
- [8] И. В. Александров, *Теория магнитной релаксации*, Наука, М., 1975.
- [9] Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, М., 1971.
- [10] R. L. Zwanzig, *J. Chem. Phys.*, **33** (1960), 1388.
- [11] Г. Деч, *Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования*, Наука, М., 1971.

Поступила в редакцию 2.12.2004,
после доработки 10.01.2006