Основы теории открытых квантовых систем. Лекция 1

Теретёнков Александр Евгеньевич

15 сентября 2020 г.

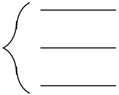
Порядок работы

1. Староста посылает список группы на адрес taeedu@mail.ru.
2. В процессе занятий я буду давать небольшие упражнения на дом. Их решения тоже нужно посылать на адрес taeedu@mail.ru одним .pdf-файлом с названием вида *оксФамилияИО*.
3. Зачёт по итогам сдачи этих задач, но можно и сдавать.
4. Есть видео моих лекций в НОЦ.

О чём курс?

$$\mathcal{H}_S \bigotimes \mathcal{H}_B$$

N-уровневая система



$\bigotimes$

Резервуар:
электромагнитное поле
фононы
...

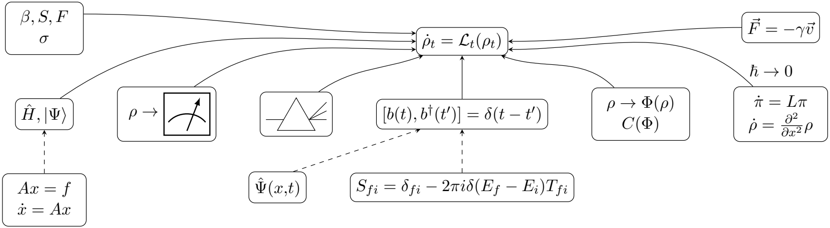
(И от резервуара мы хотим избавиться.)

О чём курс?

Уравнение Горини — Коссаковского — Сударшана — Линдблада

$$\frac{d}{dt}\rho_t = -i[H, \rho_t] + \sum_j \left(C_j \rho_t C_j^\dagger - \frac{1}{2} C_j^\dagger C_j \rho_t - \frac{1}{2} \rho_t C_j^\dagger C_j \right)$$

Связь с другими разделами физики и математики



Напоминание квантовой механики и линейной алгебры

Начнём с напоминания...

Чистые состояния

Как задаются *чистые* состояния?

Чистые состояния

$\mathcal{H}$ — гильбертово пространства на полем $\mathbb{C}$.

$$|\Psi\rangle \in \mathcal{H} : ||\Psi|| = 1,$$

где $||\Psi|| \equiv \sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle}$.

Предполагается, что $|\Psi\rangle$ и $e^{i\alpha}|\Psi\rangle$ соответствует одно и то же состояние, поэтому чистые состояния — элементы *проективного гильбертова пространства*.

Чистые состояния

Для простоты сконцентрируемся на случае $\dim \mathcal{H} = n < \infty$. В этом случае с точностью до изоморфизма

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \vdots \\ \Psi_n \end{pmatrix}, \qquad \langle\Psi| = \left(\overline{\Psi}_1 \ldots \overline{\Psi}_n\right)$$

$$||\Psi||^2 = \langle\Psi|\Psi\rangle = |\Psi_1|^2 + \cdots + |\Psi_n|^2$$

Смешанные состояния

Как задаются *смешанные* состояния?

Смешанные состояния

$\rho \in \mathbb{C}^{n\times n}$

1. $\rho^\dagger = \rho$
2. $\rho \geqslant 0$
3. $\operatorname{Tr} \rho = 1$

Что значит $\rho \geqslant 0$?

$$\langle v|\rho|v\rangle \geqslant 0, \qquad \forall |v\rangle \in \mathcal{H}$$

Эквивалентно все собственные числа положительны.

Смешанные состояния

Какие матрицы плотности соответствуют чистым состояниям?

Смешанные состояния

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

В базисе

$$\rho = \begin{pmatrix} |\Psi_1|^2 & \overline{\Psi}_1\Psi_2 & \dots & \overline{\Psi}_1\Psi_n \\ \overline{\Psi}_2\Psi_1 & |\Psi_2|^2 & \dots & \overline{\Psi}_2\Psi_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \overline{\Psi}_n\Psi_1 & \overline{\Psi}_n\Psi_2 & \dots & |\Psi_n|^2 \end{pmatrix}$$

Смешанные состояния

В общем случае эрмитову матрицу можно диагонализовать

$$\rho = \sum_i p_i |e_i\rangle\langle e_i|,$$

где $|e_i\rangle$ — собственные вектора, p_i — собственные значения матрицы ρ.
Более того, 2 ведёт к

$$p_i \geqslant 0,$$

а из 3:

$$\sum_i p_i = 1.$$

Смешанные состояния

В общем случае

$$\sum_i p_i A_i, \qquad p_i \geqslant 0, \sum_i p_i = 1$$

называется *выпуклой комбинацией*.
На выпуклую комбинацию можно смотреть как на математическое ожидание

$$\sum_i p_i A_i = \mathbb{E}_p A$$

В частности, это позволяет интерпретировать смешанное состояние ρ как случайное чистое состояние.

Смешанные состояния

Если фиксировать базис и рассматривать только диагональные матрицы в этом базисе

$$\begin{pmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & p_n \end{pmatrix}$$

то такие матрицы соответствуют классическим распределениям p_i. Так классическая теория вероятности вкладывается в квантовую.
В общем случае произвольного базиса ρ_{ii} — населённости (уровня, узла) = population, ρ_{ij} — когерентности между (уровнями, узлами) i и j.

Функции от матриц

Как определить функцию от диагонализуемой матрицы?

Функции от матриц

$$f(\rho) = \sum_i f(p_i) |e_i\rangle\langle e_i|,$$

Кроме того, отметим, что

$$\operatorname{Tr} f(\rho) = \sum_i f(p_i)$$

Функции от матриц

В случае, если ряд Тейлора функции f существует и сходится в круге (а может ли ряд Тейлора сходиться не в круге) с центром в точке 0, то можно дать другое определение (не требующее диагонализуемости)

$$f(\rho) = \sum_j \frac{f^{(j)}(0)}{j!} \rho^j,$$

где $\rho^j = \rho \cdot \ldots \cdot \rho$ понимается в смысле умножения матриц. Эти определения совпадают. В частности если $\rho = \sum_i p_i |e_i\rangle\langle e_i|$, то

$$\rho^j = \sum_i p_i^j |e_i\rangle\langle e_i|.$$

Функции от матриц

$\operatorname{Tr}\rho^2$ называется *чистотой (purity)*.
Упражнение $\operatorname{Tr}\rho^2 \leqslant 1$ и $\operatorname{Tr}\rho^2 = 1 \Leftrightarrow \rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$.
Ещё одна важная величина — энтропия фон Неймана

$$S = -\operatorname{Tr}\rho\ln\rho = -\sum_i p_i \ln p_i$$

Справа стоит классическое (не квантовое) определение. Важна в физике.

Функции от матриц

Вообще можно ввести энтропии Реньи

$$S_\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \ln \operatorname{Tr} \rho^\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \ln \sum_i p_i^\alpha$$

Упражнение

$$\lim_{\alpha \to 1} S_\alpha = S$$

— энтропия Шенона.

$$\lim_{\alpha \to +0} S_\alpha = \ln \#\{i : p_i \neq 0\} = \ln \dim \operatorname{supp} \rho$$

— энтропия Хартли.

Некоторые специальные состояния

Хаотическое состояние (Характерно для конечномерных г.п.)

$$\rho = \frac{I}{n}$$

Далее мы будем задавать динамику системы с помощью гамильтониана $H = H^\dagger$. Если $H \geqslant 0$ и состояние $|0\rangle$ такое, что $H|0\rangle = 0$ единственно, то его можно называть вакуумным или основным (graund state) состоянием.

Какое смешанное состояние играет центральную роль в статистической физике?

Некоторые специальные состояния

Гиббсовское состояние

$$\rho_\beta = \frac{e^{-\beta H}}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H}}$$

где β — обратная температура. $Z = \operatorname{Tr} e^{-\beta H}$ — статистическая сумма.
Если $H = \sum_{i=0}^{N-1} \varepsilon_i |i\rangle\langle i|$, то $\rho = \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta \varepsilon_i} |i\rangle\langle i|$, $Z = \sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}$.
Упражнение

$$\lim_{\beta \to +0} \rho_\beta \to ? \qquad \lim_{\beta \to +\infty} \rho_\beta \to ?$$

Наблюдаемые

(Чёткие) наблюдаемые — эрмитовы матрицы в $\mathcal{H}$.
Каково средние значение? (Статистический постулат Борна)
Пусть X— (чёткая) наблюдаемая, тогда

$$\langle X\rangle = \operatorname{Tr} X\rho$$

— статистический постулат Борна - фон Неймана.
В частности, если $[X,\rho]=0$, то приходим к формуле из классической теории вероятностей

$$\langle X\rangle = \sum_i x_i p_i$$

Наблюдаемые

С какой вероятностью мы получаем значения? Для этого необходимо разложить

$$X = \sum_x x \Pi_x$$

$$\Pi_x = \sum_{i: x_i = x} |i\rangle\langle i|$$

Вероятность получить значение x наблюдаемой равна

$$\mu_\rho(x) = \operatorname{Tr} \Pi_x \rho$$

В частности, если $[X, \rho] = 0$, то получим классический ответ

$$\mu_p(x) = \sum_{i: x_i = x} p_i$$

Наблюдаемые

Отметим, что операторы Π_x обладают свойствами

1. $\Pi_x \geqslant 0$
2. $\Pi_x \Pi_y = \delta_{xy} \Pi_x$
3. $\sum_x \Pi_x = I$

поэтому будем говорить об ортогональном разложении единицы.

Наблюдаемые

Селективные измерения (Коллапс волновой функции):
Апостериорное состояние, если прибор показал x

$$\frac{\Pi_x \rho \Pi_x}{\mathrm{Tr}\,\Pi_x \rho \Pi_x}$$

по предыдущему это состояние возникнет с вероятностью $\mathrm{Tr}\,\Pi_x \rho \Pi_x$ — проекционный постулат Людерса-фон Неймана.
В случае диагональной матрицы плотности в собственном базисе наблюдаемой получим

$$\frac{p_i}{\sum_{j:x_j=x} p_j}, \qquad \forall i : x_i = x,$$

то есть также как и в классике.

Наблюдаемые

Неселективные измерения (если провели измерение, но не посмотрели на прибор):

$$\sum_x \operatorname{Tr} \Pi_x \rho \Pi_x \frac{\Pi_x \rho \Pi_x}{\operatorname{Tr} \Pi_x \rho \Pi_x} = \sum_x \Pi_x \rho \Pi_x$$

Для диагональных (в базисе наблюдаемой) матриц плотности $\sum_x \Pi_x \rho \Pi_x = \rho$.

Наблюдаемые

В невырожденном случае ($\Pi_x = |i\rangle\langle i|$)

$$\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1n} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \cdots & \rho_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{n1} & \rho_{2n} & \cdots & \rho_{nn} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \rho_{nn} \end{pmatrix}$$

Таким образом, процесс измерения связан с распадом (стремлением к нулю) когеретностей. Такой процесс называется *декогерентностью* (иногда дефазировкой). В классическом случае (если ρ диагонально) такое неселективное измерение не оказывает влияния. В результате, процесс (чёткого) измерения помимо чисто классического эффекта селекции (отбора) приводит к квантовому влиянию на систему (декогеренции).
В вырожденном случае — блочно-диагональный вид.

Динамика

Как задаётся динамика чистых состояний?

Динамика

Уравнение Шрёдингера

$$\frac{d}{dt}|\Psi\rangle = -\frac{i}{\hbar}H|\Psi\rangle$$

мы положим постоянную Планка $\hbar$ равной 1

$$\frac{d}{dt}|\Psi\rangle = -iH|\Psi\rangle$$

Его решение

$$|\Psi\rangle = e^{-iHt}|\Psi_0\rangle$$

Можно ввести эволюционную матрицу $U_t = e^{-iHt}$. Такая матрица является унитарной. Если разложить $H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i|$, то $U_t = \sum_i e^{-i\varepsilon_i t}|i\rangle\langle i|$.

Как задаётся динамика смешанных состояний?

Динамика

Уравнение фон Неймана

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[H, \rho]$$

Его решение

$$\rho(t) = e^{-iHt}\rho(0)e^{iHt}$$

Упражнение. Проверить.

Динамика

Динамика в собственном базисе $H = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i |i\rangle\langle i|$
(**Упражнение**. Проверить для матриц 2×2.)

$$\rho(t) = e^{-iHt}\rho(0)e^{iHt} =$$

$$\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12}e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t} & \cdots & \rho_{1n}e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_n)t} \\ \rho_{21}e^{-i(\varepsilon_2-\varepsilon_1)t} & \rho_{22} & \cdots & \rho_{2n}e^{-i(\varepsilon_2-\varepsilon_n)t} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{n1}e^{-i(\varepsilon_n-\varepsilon_1)t} & \rho_{n2}e^{-i(\varepsilon_n-\varepsilon_2)t} & \cdots & \rho_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\neq$$

$$\begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \rho_{nn} \end{pmatrix}$$

Динамика

Селективное измерение: получили значение ε_1

$$\rho \to \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

Таким образом, унитарная динамика не способна описывать процесс селективного измерения энергии и декогеренцию. Кроме того, диагональные элементы матрицы плотности постоянны, поэтому невозможно описывать с помощью унитарной динамики и перенос населённостей. Отметим, также что процесс неселективного измерения являются необратимым.

Динамика

На самом деле верна **теорема Вигнера**: пусть Φ — взаимооднозначное аффинное отображение выпуклого множества матриц плотности, тогда $\Phi(\rho) = U\rho U^\dagger$ или $\Phi(\rho) = U\rho^T U^\dagger$.
Выпуклое множество: выпуклая комбинация $\sum_i p_i \rho_i$ — тоже матрица плотности. Аффинное отображение $\Phi(\sum_i p_i \rho_i) = \sum_i p_i \Phi(\rho_i)$.

Динамика

$$(U_t\rho^T U_t^\dagger)^T = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12}e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t} & \cdots & \rho_{1n}e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_n)t} \\ \rho_{21}e^{i(\varepsilon_2-\varepsilon_1)t} & \rho_{22} & \cdots & \rho_{2n}e^{i(\varepsilon_2-\varepsilon_n)t} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{n1}e^{i(\varepsilon_n-\varepsilon_1)t} & \rho_{n2}e^{i(\varepsilon_n-\varepsilon_2)t} & \cdots & \rho_{nn} \end{pmatrix} =$$

$$= U_{-t}\rho U_{-t}^\dagger$$

— обращение времени.

Однако каков смысл действия именно на состояния $\rho(\hat{p}) = \rho(-i\frac{d}{dx})$. $\rho^T(\hat{p}) = \rho(-\hat{p})$ — квантовый аналог отображения Лошмидта $p \to -p$.