

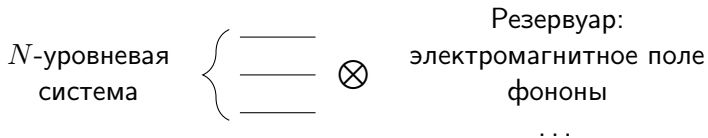
Основы теории открытых квантовых систем. Лекция 1

Теретёнков Александр Евгеньевич

7 сентября 2021 г.

О чём курс?

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



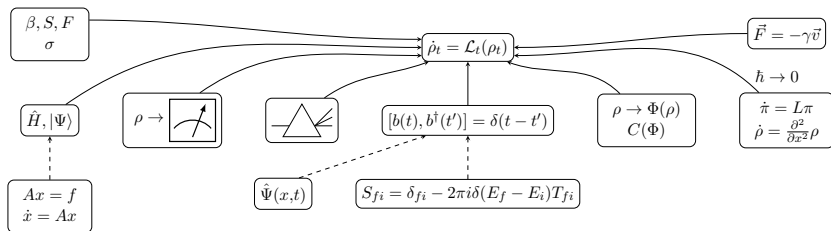
(И от резервуара мы хотим избавиться.)

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...

Как задаются *чистые* состояния?

Чистые состояния

\mathcal{H} — гильбертово пространства на поле \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

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \vdots \\ \Psi_n \end{pmatrix}, \quad \langle\Psi| = (\overline{\Psi}_1 \dots \overline{\Psi}_n)$$

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

Как задаются *смешанные* состояния?

Смешанные состояния

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

① $\rho^\dagger = \rho$

② $\rho \geq 0$

③ $\text{Tr } \rho = 1$

Что значит $\rho \geq 0$?

$$\langle v | \rho | v \rangle \geq 0, \quad \forall |v\rangle \in \mathcal{H}$$

Эквивалентно все собственные числа неотрицательны.

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 диагонализировать

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

где $|e_i\rangle$ — собственные вектора, p_i — собственные значения матрицы ρ .

Более того, 2 ведёт к

$$p_i \geq 0,$$

а из 3:

$$\sum_i p_i = 1.$$

Смешанные состояния

В общем случае

$$\sum_i p_i A_i, \quad p_i \geq 0, \sum_i p_i = 1$$

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 .

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

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

Функции от матриц

В случае, если ряд Тейлора функции f существует и сходится 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 $\rho^j = \rho \cdot \dots \cdot \rho$ 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

$\text{Tr } \rho^2$ называется *чистотой* (*purity*).

Упражнение $\text{Tr } \rho^2 \leq 1$ и $\text{Tr } \rho^2 = 1 \Leftrightarrow \rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$.

Ещё одна важная величина — энтропия фон Неймана

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

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

Функции от матриц

Вообще можно ввести энтропии Реньи

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

Упражнение

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

— энтропия Шенона.

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

— 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 $H \geq 0$ и состояние $|0\rangle$ такое, что $H|0\rangle = 0$ единственно, то его можно называть вакуумным или основным (ground state) состоянием.

Какое смешанное состояние играет центральную роль в статистической физике?

Некоторые специальные состояния

Гиббсовское состояние

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

где β — обратная температура. $Z = \text{Tr } e^{-\beta H}$ — 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

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

Наблюдаемые

(Чёткие) наблюдаемые — эрмитовы матрицы в \mathcal{H} .

Каково среднее значение? (Статистический постулат Борна)

Пусть X — (чёткая) наблюдаемая, тогда

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

— 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

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

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

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

Отметим, что операторы Π_x обладают свойствами

- ❶ $\Pi_x \geq 0$
- ❷ $\Pi_x \Pi_y = \delta_{xy} \Pi_x$
- ❸ $\sum_x \Pi_x = I$

поэтому будем говорить об ортогональном разложении единицы.