Основы теории открытых квантовых систем II. Лекция 11.

Теретёнков Александр Евгеньевич

11 апреля 2022 г.

На прошлой лекции...

Рассматривается уравнение вида

$$\frac{d}{dt}\rho_t = \lambda \mathcal{L}_t \rho_t$$

Утверждение. Уравнение Накажимы-Цванцига (Nakajima, 1958; Zwanzig, 1960):

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \lambda \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}\rho_t + \mathcal{I}_t\rho_{t_0} + \int_{t_0}^t \mathcal{K}_s^t \rho_s ds$$

$$\mathcal{K}_s^t = \lambda^2 \mathcal{P}\mathcal{L}_t \mathcal{G}_s^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}, \qquad \mathcal{I}_t = \lambda \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{G}_{t_0}^t\mathcal{Q},$$

$$\mathcal{G}_s^t = \overleftarrow{\mathrm{T}}\exp\left(\lambda \int_s^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_\tau d\tau\right), \quad \mathcal{G}_s^s = I$$

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

Если $\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P} = 0$ и $\mathcal{P}\rho_{t_0} = \rho_{t_0}$, то первый неисчезающий член — второго порядка по λ

$$\mathcal{K}_s^t = \lambda^2 \mathcal{P}\mathcal{L}_t \mathcal{G}_s^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} = \lambda^2 \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} + O(\lambda^3)$$

С учётом $\mathcal{L}_s\mathcal{P} = \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} + \mathcal{P}\mathcal{L}_s\mathcal{P} = \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}$, имеем

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \lambda^2 \int_{t_0}^t \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_s\mathcal{P}\rho_s ds$$

— уравнение в приближении Борна.

Метод проекционных операторов Накажимы — Цванцига

В случае $\mathcal{P} = \mathrm{tr}_B(\cdot) \otimes \rho_B$, то оно принимает вид

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) \otimes \rho_B = -\lambda^2 \int_{t_0}^{t} \mathrm{Tr}_B[H_I(t), [H_I(s), \rho_S(s) \otimes \rho_B]]ds \otimes \rho_B$$

"Сокращая" на ρ_B, имеем

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\lambda^2 \int_{t_0}^{t} \mathrm{Tr}_B[H_I(t), [H_I(s), \rho_S(s) \otimes \rho_B]]ds$$

— такое уравнение уже возникало в предыдущем семестре.

Локальное по времени кинетическое уравнение

Утверждение. (Метод устранение временной свёртки)

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \mathcal{K}_t \mathcal{P}\rho_t + \mathcal{I}'_t \mathcal{Q}\rho_{t_0}$$

$$\mathcal{K}_t = \lambda \mathcal{P}\mathcal{L}_t (I - \Sigma_t)^{-1} \Sigma_t \mathcal{P}, \qquad \mathcal{I}'_t = \lambda \mathcal{P}\mathcal{L}_t (I - \Sigma_t)^{-1} \mathcal{G}_{t_0}^t \mathcal{Q},$$

$$\Sigma_t = \lambda \int_{t_0}^t ds \mathcal{G}_s^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_s \mathcal{P} G_t^s, \qquad G_t^s = \overrightarrow{\mathrm{Texp}} \left(-\lambda \int_s^t \mathcal{L}_\tau d\tau \right)$$

(Если $(I - \Sigma_t)$ обратим!)

Локальное по времени кинетическое уравнение

Доказательство:

$$\rho_s = G_t^s \rho_t = G_t^s (\mathcal{P} + \mathcal{Q}) \rho_t$$

$$G_t^s = \overrightarrow{\mathrm{Texp}} \left(-\lambda \int_s^t \mathcal{L}_\tau d\tau \right), \quad G_s^s = I$$

$$\mathcal{Q}\rho_t = \mathcal{G}_{t_0}^t \mathcal{Q}\rho_{t_0} + \lambda \int_{t_0}^t ds \mathcal{G}_s^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_s \mathcal{P} G_t^s (\mathcal{P} + \mathcal{Q}) \rho_t$$

Локальное по времени кинетическое уравнение

Введём супероператор

$$\Sigma_t = \lambda \int_{t_0}^{t} ds \mathcal{G}_s^t \mathcal{Q} \mathcal{L}_s \mathcal{P} G_t^s,$$

тогда

$$\mathcal{Q}\rho_t = \mathcal{G}_{t_0}^t \mathcal{Q}\rho_{t_0} + \Sigma_t(\mathcal{P} + \mathcal{Q})\rho_t$$

$$(I - \Sigma_t)\mathcal{Q}\rho_t = \mathcal{G}_{t_0}^t \mathcal{Q}\rho_{t_0} + \Sigma_t \mathcal{P}\rho_t$$

Локальное по времени кинетическое уравнение

Оператор $(I - \Sigma_t)$ обратим при достаточно малых λ, либо при достаточно малых $t - t_0$.

$$\mathcal{Q}\rho_t = (I - \Sigma_t)^{-1}\mathcal{G}_{t_0}^t \mathcal{Q}\rho_{t_0} + (I - \Sigma_t)^{-1}\Sigma_t \mathcal{P}\rho_t$$

Подставляя в уравнение

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \lambda \mathcal{P}\mathcal{L}_t \mathcal{Q}\rho_t$$

имеем

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho_t = \lambda \mathcal{P}\mathcal{L}_t (I - \Sigma_t)^{-1}\mathcal{G}_{t_0}^t \mathcal{Q}\rho_{t_0} + \lambda \mathcal{P}\mathcal{L}_t (I - \Sigma_t)^{-1}\Sigma_t \mathcal{P}\rho_t$$

Локальное по времени кинетическое уравнение

Обозначая

$$\mathcal{K}_t = \lambda \mathcal{P} \mathcal{L}_t (I - \Sigma_t)^{-1} \Sigma_t \mathcal{P}, \qquad \mathcal{I}'_t = \lambda \mathcal{P} \mathcal{L}_t (I - \Sigma_t)^{-1} \mathcal{G}_{t_0}^t \mathcal{Q},$$

получаем

$$\frac{d}{dt} \mathcal{P} \rho_t = \mathcal{K}_t \mathcal{P} \rho_t + \mathcal{I}'_t \mathcal{Q} \rho_{t_0}$$

$\square$

Локальное по времени кинетическое уравнение

Утверждение. (Chaturvedi, Shibata, 1979)

$$\mathcal{K}_t = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \mathcal{K}_t^{(n)},$$

$$\mathcal{K}_t^{(1)} = \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P}$$

$$\mathcal{K}_t^{(2)} = \int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P}$$

$$\mathcal{K}_t^{(3)} = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 (\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P})$$

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_t^{(4)} = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 (&\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P} - \\ &- \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P} + \\ &+ \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P} - \\ &- \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P})\end{aligned}$$

Доказательство:

$$(I - \Sigma_t)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \Sigma_t^n$$

$$\mathcal{K}_t = \lambda \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{P}\mathcal{L}_t \Sigma_t^n \mathcal{P} = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \mathcal{K}_t^{(n)},$$

где $\mathcal{K}_t^{(n)}$ — коэффициенты разложения $\mathcal{K}_t$ по степеням λ.

$$\mathcal{K}_t^{(n)} = \mathcal{P}\mathcal{L}_t \sum_{\substack{k_j \geqslant 1, \\ \sum_j^{n-1} k_j = n-1}} \Sigma_t^{(k_1)} \cdots \Sigma_t^{(k_{n-1})} \mathcal{P},$$

где $\Sigma_t^{(n)}$ — коэффициенты разложения Σ_t по степеням λ.

Локальное по времени кинетическое уравнение

В частности,

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}_t^{(1)} &= \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{P},\\
\mathcal{K}_t^{(2)} &= \mathcal{P}\mathcal{L}_t\Sigma_t^{(1)}\mathcal{P},\\
\mathcal{K}_t^{(3)} &= \mathcal{P}\mathcal{L}_t(\Sigma_t^{(2)} + (\Sigma_t^{(1)})^2)\mathcal{P},\\
\mathcal{K}_t^{(4)} &= \mathcal{P}\mathcal{L}_t(\Sigma_t^{(3)} + \Sigma_t^{(2)}\Sigma_t^{(1)} + \Sigma_t^{(1)}\Sigma_t^{(2)} + (\Sigma_t^{(1)})^3)\mathcal{P}.
\end{aligned}
$$

Остаётся только вычислить $\Sigma_t^{(n)}$.

Локальное по времени кинетическое уравнение

При $t \geqslant s$

$$\mathcal{G}_s^t = \overleftarrow{\mathrm{Texp}} \left(\lambda \int_s^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_\tau d\tau \right) =$$

$$= 1 + \lambda \int_s^t dt_1 \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1} + \lambda^2 \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2} + \cdots =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \int_s^t dt_1 \ldots \int_s^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1} \ldots \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_n}$$

$$G_t^s = \overrightarrow{\mathrm{Texp}} \left(-\lambda \int_s^t \mathcal{L}_\tau d\tau \right) =$$

$$= 1 - \lambda \int_s^t dt_1 \mathcal{L}_{t_1} + \lambda^2 \int_s^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \mathcal{L}_{t_1} \mathcal{L}_{t_2} + \cdots =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (-\lambda)^n \int_s^t dt_1 \ldots \int_{t_{n-1}}^t dt_n \mathcal{L}_{t_1} \ldots \mathcal{L}_{t_n}$$

Локальное по времени кинетическое уравнение

$$\Sigma_t = \lambda \int_{t_0}^{t} ds \mathcal{G}_s^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_s \mathcal{P} G_t^s =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^{n+1} \sum_{m=0}^{n} (-1)^{n-m} \int_{t_0}^{t} ds \int_s^t dt_1 \ldots \int_s^{t_{m-1}} dt_m \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1} \ldots \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_m} \cdot$$

$$\cdot \mathcal{Q}\mathcal{L}_s \mathcal{P} \int_s^t dt'_1 \ldots \int_{t'_{n-m-1}}^{t} dt'_{n-m} \mathcal{L}_{t'_1} \ldots \mathcal{L}_{t'_{n-m}}$$

Локальное по времени кинетическое уравнение

$$\Sigma_t^{(1)} = \int_{t_0}^{t} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}$$

$$\Sigma_t^{(2)} = \int_{t_0}^{t} ds \int_{s}^{t} dt_1 \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} - \int_{t_0}^{t} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} \int_{s}^{t} dt_1' \mathcal{L}_{t_1'} =$$
$$= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} - \int_{t_0}^{t} dt_1' \int_{t_0}^{t_1} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1'} =$$
$$= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 (\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{P} - \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1})$$

Локальное по времени кинетическое уравнение

$$\Sigma_t^{(3)} = \int_{t_0}^{t} ds \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} -$$
$$- \int_{t_0}^{t} ds \int_s^t dt_1 \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} \int_s^t dt_2 \mathcal{L}_{t_2} +$$
$$+ \int_{t_0}^{t} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} \int_s^t dt_1 \int_{t_1}^{t} dt_2 \mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_2}$$

Локальное по времени кинетическое уравнение

$$\int_{t_0}^{t} ds \int_{s}^{t} dt_1 \int_{s}^{t_1} dt_2 = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} ds \int_{s}^{t_1} dt_2 = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} ds$$

$$\begin{aligned}
\int_{t_0}^{t} ds \int_{s}^{t} dt_1 \int_{s}^{t} dt_2 &= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} ds \int_{s}^{t} dt_2 = \\
&= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} ds \int_{s}^{t_1} dt_2 + \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} ds \int_{t_1}^{t} dt_2 = \\
&= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} ds + \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_1}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_1} ds = \\
&= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} ds + \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} ds
\end{aligned}$$

Локальное по времени кинетическое уравнение

$$\int_{t_0}^{t} ds \int_{s}^{t} dt_1 \int_{t_1}^{t} dt_2 = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} ds \int_{t_1}^{t} dt_2 =$$
$$= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_1}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_1} ds = \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} ds$$

Локальное по времени кинетическое уравнение

$$\Sigma_t^{(3)} = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} -$$

$$- \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_2} -$$

$$- \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_2} +$$

$$+ \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_2} =$$

$$= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 (\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P} - \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_2} -$$

$$- \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1} + \mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_1})$$

Локальное по времени кинетическое уравнение

$$\mathcal{K}_t^{(2)} = \mathcal{P}\mathcal{L}_t\Sigma_t^{(1)}\mathcal{P} = \mathcal{P}\mathcal{L}_t\int_{t_0}^{t} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} = \int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{Q}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P}$$

$$(\Sigma_t^{(1)})^2 = \int_{t_0}^{t} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P}\int_{t_0}^{t} ds \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{P} = 0$$