Основы теории открытых квантовых систем. Лекция 3. Уравнение ГКСЛ и его свойства. Декогерентность. Лоренцевский спектр

Теретёнков Александр Евгеньевич

27 сентября 2022 г.

В прошлой серии...

Динамика в собственном базисе $H = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i |i\rangle\langle i|$

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

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

$$\neq$$

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

Уравнение Горини – Коссаковского – Сударшана – Линдблада

В форме Линдблада:

$$\frac{d}{dt}\rho_t = -i[H,\rho_t] + \underbrace{\sum_j \left(C_j \rho_t C_j^\dagger - \frac{1}{2} C_j^\dagger C_j \rho_t - \frac{1}{2} \rho_t C_j^\dagger C_j \right)}_{=\mathcal{D}(\rho_t)\text{ — Диссипатор}}$$

На самом деле можно показать, что достаточно суммировать по j от 1 до n^2-1.

Уравнение Горини – Коссаковского – Сударшана – Линдблада

В форме Коссаковского:

$$\frac{d}{dt}\rho_t = -i[H, \rho_t] + \sum_{i=1,k=1}^{n^2-1} a_{ik} \left([F_i, \rho_t F_k^\dagger] + [F_i \rho_t, F_k^\dagger] \right), \qquad (1)$$

где матрица $a = a^\dagger \geqslant 0$.

Упражнение. Показать, что две эти формы эквивалентны.

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

Пусть $C_{ij} = \sqrt{\gamma_{ij}}|i\rangle\langle j|$, $\gamma_{ij} \geqslant 0$

$$\mathcal{D}(\rho) = \sum_{ij} \gamma_{ij} \left(|i\rangle\langle j|\rho|j\rangle\langle i| - \frac{1}{2}|j\rangle\langle j|\rho - \frac{1}{2}\rho|j\rangle\langle j| \right)$$

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i|$$

Такого вида генераторы ГКСЛ получаются в пределе слабой связи в случае общего положения.

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

$$\langle k|[H,\rho]|m\rangle = \sum_i \varepsilon_i \langle k|[|i\rangle\langle i|,\rho]|m\rangle =$$
$$= \sum_i \varepsilon_i(\delta_{ik}\rho_{im} - \delta_{im}\rho_{ki}) = (\varepsilon_k - \varepsilon_m)\rho_{km}$$

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|m\rangle = \sum_{ij} \gamma_{ij} \langle k| \left(|i\rangle\langle j|\rho|j\rangle\langle i| - \frac{1}{2}|j\rangle\langle j|\rho - \frac{1}{2}\rho|j\rangle\langle j| \right) |m\rangle =$$

$$= \sum_{ij} \gamma_{ij} \left(\delta_{ik}\rho_{jj}\delta_{im} - \frac{1}{2}\delta_{kj}\rho_{jm} - \frac{1}{2}\rho_{kj}\delta_{jm} \right)$$

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|m\rangle = \sum_{ij}\gamma_{ij}\langle k|\left(|i\rangle\langle j|\rho|j\rangle\langle i| - \frac{1}{2}|j\rangle\langle j|\rho - \frac{1}{2}\rho|j\rangle\langle j|\right)|m\rangle =$$

$$= \sum_{ij}\gamma_{ij}\left(\delta_{ik}\rho_{jj}\delta_{im} - \frac{1}{2}\delta_{kj}\rho_{jm} - \frac{1}{2}\rho_{kj}\delta_{jm}\right)$$

$k \neq m$

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|m\rangle = -\frac{1}{2}\sum_{i}\left(\gamma_{ik} + \gamma_{im}\right)\rho_{km}$$

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|m\rangle = \sum_{ij}\gamma_{ij}\langle k|\left(|i\rangle\langle j|\rho|j\rangle\langle i| - \frac{1}{2}|j\rangle\langle j|\rho - \frac{1}{2}\rho|j\rangle\langle j|\right)|m\rangle =$$

$$= \sum_{ij}\gamma_{ij}\left(\delta_{ik}\rho_{jj}\delta_{im} - \frac{1}{2}\delta_{kj}\rho_{jm} - \frac{1}{2}\rho_{kj}\delta_{jm}\right)$$

$k \neq m$

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|m\rangle = -\frac{1}{2}\sum_{i}\left(\gamma_{ik} + \gamma_{im}\right)\rho_{km}$$

$k = m$

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|k\rangle = \sum_{j}\gamma_{kj}\rho_{jj} - \left(\sum_{i}\gamma_{ik}\right)\rho_{kk}$$

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

В результате получаем уравнение Паули для населённостей

$$\frac{d}{dt}\rho_{kk} = \sum_j \gamma_{kj}\rho_{jj} - \left(\sum_i \gamma_{ik}\right)\rho_{kk}$$

и динамику когерентностей

$$\frac{d}{dt}\rho_{km} = \left(-i(\varepsilon_k - \varepsilon_m) - \frac{1}{2}\sum_i (\gamma_{ik} + \gamma_{im})\right)\rho_{km}$$

Таким образом, мы получили возможность описывать как перенос, так и декогерентность.

Декогерентность и спектроскопия

$$\frac{d}{dt}\rho_{km} = \left(-i(\varepsilon_k - \varepsilon_m) - \frac{1}{2}\sum_i (\gamma_{ik} + \gamma_{im})\right)\rho_{km}$$

Обозначим, $\omega_{km} = \varepsilon_m - \varepsilon_k$, $\frac{1}{2}\sum_i (\gamma_{ik} + \gamma_{im}) = \Gamma_{km}$. Тогда решение имеет вид

$$\rho_{km}(t) = e^{-(\Gamma_{km} - i\omega_{km})t}\rho_{km}(0)$$

Декогерентность и спектроскопия

$$\frac{d}{dt}\rho_{km} = \left(-i(\varepsilon_k - \varepsilon_m) - \frac{1}{2}\sum_i (\gamma_{ik} + \gamma_{im})\right)\rho_{km}$$

Обозначим, $\omega_{km} = \varepsilon_k - \varepsilon_m$, $\frac{1}{2}\sum_i (\gamma_{ik} + \gamma_{im}) = \Gamma_{km}$. Тогда решение имеет вид

$$\rho_{km}(t) = e^{-(\Gamma_{km} - i\omega_{km})t}\rho_{km}(0)$$

Декогерентность и спектроскопия

N-уровненвая система обычно получается аппроксимациями из непрерывной, тогда оператора дипольного момента ex и

$$d_{km} = \int e\phi_k(x)^* x\phi_m(x)dx$$

Если оператор пространственной чётности коммутирует с гамильтонианом системы, то $\phi_i(x)$ имеют фиксированную чётность и

$$d_{kk} = 0$$

Декогерентность и спектроскопия

$$\langle d(t)\rangle = \operatorname{Tr} d\rho(t) = \sum_{mk} d_{mk}\rho_{km}(t) = \sum_{m\neq k} d_{mk} e^{-(\Gamma_{km} - i\omega_{km})t}\rho_{km}(0),$$

$$\rho(-t) = (e^{\mathcal{L}t}(\rho(0))^T)^T$$

$$\rho_{km}(-t) = e^{-(\Gamma_{km} + i\omega_{km})t}\rho_{km}(0)$$

$$\langle d(-t)\rangle = \sum_{m\neq k} e^{-(\Gamma_{km} + i\omega_{km})t} d_{mk}\rho_{km}(0)$$

Декогерентность и спектроскопия

$$\langle d(\omega)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t}\langle d(t)\rangle dt - ?$$

Декогерентность и спектроскопия

$$\langle d(\omega)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t}\langle d(t)\rangle dt =$$

$$= \int_{0}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{m\neq k} d_{mk} e^{-(\Gamma_{km} - i\omega_{km})t}\rho_{km}(0) +$$

$$+ \int_{0}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \sum_{m\neq k} d_{mk} e^{-(\Gamma_{km} + i\omega_{km})t}\rho_{km}(0) =$$

$$= \sum_{m\neq k} \frac{2\Gamma_{km}}{(\omega - \omega_{km})^2 + \Gamma_{km}^2} d_{mk}\rho_{km}(0)$$

— Лоренцевское (однородное) уширение спектра.

Очевидные "хорошие" свойства ГКСЛ генератора

$$\frac{d}{dt}\rho_t = \mathcal{L}(\rho_t)$$

$$\mathcal{L}(\rho) \equiv -i[H, \rho] + \sum_j \left(C_j \rho C_j^\dagger - \frac{1}{2} C_j^\dagger C_j \rho - \frac{1}{2} \rho C_j^\dagger C_j \right)$$

1. $\mathcal{L}(X^\dagger) = (\mathcal{L}(X))^\dagger$.
2. $\operatorname{Tr} \mathcal{L}(\rho) = 0$.

ГКСЛ и некоммутативные диффузионные уравнения

Генератор типа классической диффузии: $C_i = C_i^\dagger$

$$C_j \rho C_j - \frac{1}{2} C_j^2 \rho - \frac{1}{2} \rho C_j^2 = -\frac{1}{2} [C_j, [C_j, \rho]]$$

Отметим, что на супероператор $\partial_H \equiv -i[H, \,\cdot\,]$ можно смотреть как на абстрактное дифференцирование на алгебре матриц: он линеен и выполнено правило Лейбница

$$\partial_H(AB) = A \partial_H(B) + \partial_H(A) B.$$

$$\frac{d}{dt} \rho = \partial_H \rho + \frac{1}{2} \sum_j \partial_{C_j}^2 \rho$$

ГКСЛ и некоммутативные диффузионные уравнения

Утверждение. Всякий линейный супероператор Φ удовлетворяющий

$$\Phi(AB) = A\Phi(B) + \Phi(A)B$$

имеет вид $\Phi(A) = [H, A]$.

Упражнение. Спектр $[H, \ \cdot \ ]$? Если $H = \sum_j \varepsilon_j |j\rangle\langle j|$.

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Матрицы образуют гильбертово пространство относительно скалярного произведения $\langle\langle A|B\rangle\rangle = \mathrm{Tr}\, A^\dagger B$.
Это позволяет ввести сопряжённые супероператор относительно такого скалярного произведения по формуле

$$\langle\langle \mathcal{L}^*(A)|B\rangle\rangle = \langle\langle A|\mathcal{L}(B)\rangle\rangle$$

для произвольных матриц A и B.

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Вычислим сопряжённый супероператор к $\mathcal{M} = X \cdot Y$:

$$\operatorname{Tr} A^\dagger \mathcal{M}(B) = \operatorname{Tr} A^\dagger X B Y = \operatorname{Tr} Y A^\dagger X B = \operatorname{Tr}(X^\dagger A Y^\dagger)^\dagger B$$

$$\mathcal{M}^* = X^\dagger \cdot Y^\dagger$$

ГКСЛ в представлении Гейзенберга

Вычислим сопряжённый супероператор к $\mathcal{M} = X \cdot Y$:

$$\operatorname{Tr} A^\dagger \mathcal{M}(B) = \operatorname{Tr} A^\dagger X B Y = \operatorname{Tr} Y A^\dagger X B = \operatorname{Tr}(X^\dagger A Y^\dagger)^\dagger B$$

$$\mathcal{M}^* = X^\dagger \cdot Y^\dagger$$

Тогда для ГКСЛ-генератора

$$\mathcal{L}(\rho) = -i[H, \rho] + \sum_j \left(C_j \rho C_j^\dagger - \frac{1}{2}\{C_j^\dagger C_j, \rho\} \right)$$

$$\mathcal{L}^*(X) = i[H, X] + \sum_j \left(C_j^\dagger X C_j - \frac{1}{2}\{C_j^\dagger C_j, X\} \right)$$