Основы теории открытых квантовых систем II. Лекция 14. Квантовое уравнение Больцмана. Приближение среднего поля

Теретёнков Александр Евгеньевич

16 мая 2023 г.

Квантовое уравнение Больцмана

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

$$\mathcal{L}[\sigma](\rho) = -i[h + H[\sigma], \rho] + \mathrm{Tr}_2\, K(\rho \otimes \sigma)$$

$$H[\sigma] = \mathrm{Tr}_2\, B(I \otimes \sigma)$$

$$K(\gamma) = \sum_{\alpha} \left(T_\alpha \gamma T_\alpha^\dagger - \frac{1}{2}\{T_\alpha^\dagger T_\alpha, \gamma\} \right)$$

Квантовое уравнение Больцмана

При этом считается что выполнены условия:

1. Сохранения энергии

$$[B, h \otimes I + I \otimes h] = 0, \qquad [T_\alpha, h \otimes I + I \otimes h] = 0$$

2. Микрообратимости

$$[T_\alpha^\dagger, T_\alpha] = 0$$

3. Инвариантности отностельно престановк

$$[B, P_{12}] = 0, \qquad [T_\alpha, P_{12}] = 0$$

Оператор перестановки определён в базисе как

$$P_{12}|i\rangle \otimes |j\rangle = |j\rangle \otimes |i\rangle$$

Квантовое уравнение Больцмана

Утверждение. Пусть $E_t = \operatorname{Tr} h\rho_t$, тогда $E_t = \mathrm{const}$.
Доказательство:

$$\frac{d}{dt}E_t = \operatorname{Tr}\left(h\frac{d}{dt}\rho_t\right) = -i\operatorname{Tr}_1(h[h+H[\rho_t],\rho_t])+\operatorname{Tr}_1(h\operatorname{Tr}_2 K(\rho_t\otimes\rho_t))$$

$$\begin{aligned}\operatorname{Tr}_1 \rho_t h \operatorname{Tr}_2 B(I\otimes\rho_t) &= \operatorname{Tr}(\rho_t\otimes I)(h\otimes I)B(I\otimes\rho_t) = \\ &= \operatorname{Tr}(h\otimes I)B\rho_t\otimes\rho_t = \operatorname{Tr} P_{12}(h\otimes I)B\rho_t\otimes\rho_t P_{12} = \\ &= \operatorname{Tr}(I\otimes h)B\rho_t\otimes\rho_t = \frac{1}{2}\operatorname{Tr}(I\otimes h + h\otimes I)B\rho_t\otimes\rho_t\end{aligned}$$

$$\operatorname{Tr}_1 h\rho_t \operatorname{Tr}_2 B(I\otimes\rho_t) = \operatorname{Tr} B(h\otimes I)\rho_t\otimes\rho_t = \frac{1}{2}\operatorname{Tr} B(I\otimes h+h\otimes I)\rho_t\otimes\rho_t$$

Квантовое уравнение Больцмана

$$\mathrm{Tr}_1(h[H[\rho_t],\rho_t]) = \mathrm{Tr}_1[h,\rho_t]H[\rho_t] = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[I\otimes h+h\otimes I, B]\rho_t\otimes\rho_t = 0$$

$$\mathrm{Tr}(h\otimes I)\left(T_\alpha\rho_t\otimes\rho_t T_\alpha^\dagger - \frac{1}{2}\{T_\alpha^\dagger T_\alpha, \rho_t\otimes\rho_t\}\right) =$$
$$= \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(h\otimes I + I\otimes h)\left(T_\alpha\rho_t\otimes\rho_t T_\alpha^\dagger - \frac{1}{2}\{T_\alpha^\dagger T_\alpha, \rho_t\otimes\rho_t\}\right) = 0$$

Таким образом, $\frac{d}{dt}E_t = 0$. □

Квантовое уравнение Больцмана

Лемма. Пусть K — ГКСЛ генератор вида

$$K(\gamma) = \sum_{\alpha} \left(T_\alpha \gamma T_\alpha^\dagger - \frac{1}{2}\{T_\alpha^\dagger T_\alpha, \gamma\} \right),$$

где $[T_\alpha^\dagger, T_\alpha] = 0$, то

$$-\operatorname{Tr} K(\gamma) \ln \gamma \geqslant 0$$

Квантовое уравнение Больцмана

Доказательство: Так как

$$K(I) = \sum_\alpha [T_\alpha, T_\alpha^\dagger] = 0,$$

то K — генератор бистохастической полугруппы. Рассмотрим уравнение ГКСЛ

$$\frac{d}{dt}\gamma_t = K(\gamma_t),$$

тогда

$$\frac{d}{dt}S(\gamma_t) = -\operatorname{Tr} K(\gamma_t) \ln \gamma_t \geqslant 0.$$

Используя данное выражение при $t = 0$, положив $\gamma_0 = \gamma$, получаем требуемое. $\square$

Квантовое уравнение Больцмана

Утверждение. Пусть ρ_t удовлетворяет квантовому уравнению Больцмана

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

тогда

$$\frac{d}{dt}S(\rho_t) \geqslant 0$$

Доказательство:

$$\frac{d}{dt}S(\rho_t) = -\operatorname{Tr}\left(\frac{d}{dt}\rho_t\right)\ln\rho_t =$$

$$= i\operatorname{Tr}([h + H[\rho_t], \rho_t]\ln\rho_t) - \operatorname{Tr}_1(\operatorname{Tr}_2 K(\rho_t \otimes \rho_t))\ln\rho_t$$

В силу циклического свойства следа первый член обнуляется

$$\operatorname{Tr}([h + H[\rho_t], \rho_t]\ln\rho_t) = 0$$

Второй член можно преобразовать

$$\operatorname{Tr}_1(\operatorname{Tr}_2 K(\rho_t \otimes \rho_t))\ln\rho_t = \operatorname{Tr} K(\rho_t \otimes \rho_t)(\ln\rho_t \otimes I) =$$

$$= \frac{1}{2}\operatorname{Tr}(K(\rho_t \otimes \rho_t))(\ln\rho_t \otimes I + I \otimes \ln\rho_t) =$$

$$= \frac{1}{2}\operatorname{Tr}(K(\rho_t \otimes \rho_t))\ln(\rho_t \otimes \rho_t)$$

С учётом леммы получаем требуемое. $\square$

Квантовое уравнение Больцмана

Лемма.

$$\mathrm{Tr}_2\, B(I \otimes \sigma) = \mathrm{Tr}_2(I \otimes \sigma) B$$

Квантовое уравнение Больцмана

Лемма.

$$\mathrm{Tr}_2\, B(I \otimes \sigma) = \mathrm{Tr}_2(I \otimes \sigma)B$$

Утверждение. Распределения Гиббса

$$\rho_\beta = \frac{e^{-\beta h}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta h}}$$

являются стационарными состояниями.

Квантовое уравнение Больцмана

Доказательство:

$$[T_\alpha, h \otimes I + I \otimes h] = 0$$

С учётом $e^{-\beta(h\otimes I + I \otimes h)} = e^{-\beta h} \otimes e^{-\beta h}$, получим

$$[T_\alpha, \rho_\beta \otimes \rho_\beta] = 0$$

$$K(\rho_\beta \otimes \rho_\beta) = \sum_\alpha \left(T_\alpha \rho_\beta \otimes \rho_\beta T_\alpha^\dagger - \frac{1}{2}\{T_\alpha^\dagger T_\alpha, \rho_\beta \otimes \rho_\beta\} \right) =$$
$$= \sum_\alpha [T_\alpha, T_\alpha^\dagger] \rho_\beta \otimes \rho_\beta = 0$$

Квантовое уравнение Больцмана

$$H[\rho_\beta]\rho_\beta = \mathrm{Tr}_2\, B(I\otimes\rho_\beta)(\rho_\beta\otimes I) = \mathrm{Tr}_2\, B(\rho_\beta\otimes\rho_\beta) =$$
$$= \mathrm{Tr}_2(\rho_\beta\otimes\rho_\beta)B = \rho_\beta\,\mathrm{Tr}_2(I\otimes\rho_\beta)B$$

$$[H[\rho_\beta],\rho_\beta] = \mathrm{Tr}_2\, B(I\otimes\rho_\beta)(\rho_\beta\otimes I) - \mathrm{Tr}_2(\rho_\beta\otimes I)(I\otimes\rho_\beta)B =$$
$$= \mathrm{Tr}_2[B,\rho_\beta\otimes\rho_\beta] = 0$$

$\square$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

Уравнение Хартри для матрицы плотности в $\mathcal{H}$

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h, \rho(t)] - i\,\mathrm{Tr}_2[V_{12} + V_{21}, \rho(t) \otimes \rho(t)]$$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

Уравнение Хартри для матрицы плотности в $\mathcal{H}$

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h, \rho(t)] - i\,\mathrm{Tr}_2[V_{12} + V_{21}, \rho(t) \otimes \rho(t)]$$

Утверждение. Уравнение Хартри также можно переписать как

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h + V_H(\rho(t)), \rho(t)],$$

где введён потенциал Хартри

$$V_H(\rho) \equiv \mathrm{Tr}_2(V_{12} + V_{21})(I \otimes \rho) = \mathrm{Tr}_2(I \otimes \rho)(V_{12} + V_{21}).$$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

Уравнение Хартри для матрицы плотности в $\mathcal{H}$

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h, \rho(t)] - i \operatorname{Tr}_2[V_{12} + V_{21}, \rho(t) \otimes \rho(t)]$$

Утверждение. Уравнение Хартри также можно переписать как

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h + V_H(\rho(t)), \rho(t)],$$

где введён потенциал Хартри

$$V_H(\rho) \equiv \operatorname{Tr}_2(V_{12} + V_{21})(I \otimes \rho) = \operatorname{Tr}_2(I \otimes \rho)(V_{12} + V_{21}).$$

Доказательство: $[V_H(\rho), \rho] = [\operatorname{Tr}_2(V_{12} + V_{21})(I \otimes \rho), \rho] =$
$= \operatorname{Tr}_2((V_{12} + V_{21})(I \otimes \rho)(\rho \otimes I)) - \operatorname{Tr}_2((\rho \otimes I)(I \otimes \rho)(V_{12} + V_{21})) =$
$= \operatorname{Tr}_2[V_{12} + V_{21}, \rho \otimes \rho]$. $\square$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

Уравнение Хартри получается из N-частичного уравнения Лиувилля-фон Неймана в $\mathcal{H}^{\otimes N}$

$$\frac{d}{dt}\rho_N(t) = -i[H_N, \rho_N(t)], \qquad H_N = \sum_j h_j + \frac{1}{N}\sum_{i \neq j} V_{ij}$$

$$h_j = \underbrace{I \otimes \ldots \otimes I}_{j-1} \otimes h \otimes I \otimes \ldots \otimes I, \quad h \in \mathcal{H}$$

V_{ij} — тоже подразумевает, что оператор нетривиально действует в i-м и j-м пространствах.
Приближение среднего поля (приближение Хартри)

$$\lim_{N \to +\infty} \mathrm{Tr}_{n+1,\ldots,N}\, \rho_N(t) = \otimes_1^n \rho(t)$$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

Доказательство: $n = 1$

$$\lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\, \rho_N(t) = \rho(t)$$

$$\frac{d}{dt} \underbrace{\lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\, \rho_N(t)}_{=\rho(t)} = -i \lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}[H_N, \rho_N(t)]$$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

$$
\lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\left[\sum_{j=1}^{N} h_j, \rho_N(t)\right] =
$$

$$
= \lim_{N\to+\infty}\left([h, \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\,\rho_N(t)] + \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\left[\sum_{j=2}^{N} h_j, \rho_N(t)\right]\right) = [h,\rho],
$$

где учтено

$$
\lim_{N\to+\infty}[h, \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\,\rho_N(t)] = [h,\rho], \qquad \lim_{N\to+\infty}\mathrm{Tr}_j[h_j, \rho_N] = 0
$$

Приближение среднего поля и уравнение Хартри для матрицы плотности

$$\lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\left[\frac{1}{N}\sum_{i\neq j} V_{ij}, \rho_N(t)\right] =$$

$$= \lim_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\left[\sum_{j}(V_{1j}+V_{j1}), \rho_N(t)\right] =$$

в силу симметрии

$$= \lim_{N\to+\infty} \frac{N-1}{N} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\left[V_{12}+V_{21}, \rho_N(t)\right] =$$

$$= \lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2}\left[V_{12}+V_{21}, \mathrm{Tr}_{3,\ldots,N}\,\rho_N(t)\right] =$$

$$= \mathrm{Tr}_{2}\left[V_{12}+V_{21}, \rho(t)\otimes\rho(t)\right]$$

Приближение среднего поля и нелинейное уравнение Шрёдингера

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[h + V_H(\rho(t)) + V_D(\rho(t)), \rho(t)]$$

Потенциал Хартри

$$V_H(\rho) = \mathrm{Tr}_2(V_{12} + V_{21})(I \otimes \rho)$$

Потенциал коллективных диссипативных процессов

$$V_D(\rho) = \frac{i}{2}\sum_{\alpha}(\mathrm{Tr}((V^{\alpha})^{\dagger}\rho)V^{\alpha} - \mathrm{Tr}(V^{\alpha}\rho)(V^{\alpha})^{\dagger})$$

Приближение среднего поля и нелинейное уравнение Шрёдингера

Для чистых состояний

$$\rho(t) = |\psi_t\rangle\langle\psi_t|$$

получаем нелинейное уравнение Шрёдингера

$$\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle = -i(h + V_H(\psi_t) + V_D(\psi_t))|\psi_t\rangle$$

$$V_H(\psi) = \langle\psi|(V_{12} + V_{21})|\psi\rangle$$

$$V_D(\psi) = \frac{i}{2}\sum_\alpha(\langle\psi|(V^\alpha)^\dagger|\psi\rangle V^\alpha - \langle\psi|V^\alpha|\psi\rangle(V^\alpha)^\dagger)$$

Приближение среднего поля и нелинейное уравнение Шрёдингера

Доказательство:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \left(\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle\right)\langle\psi_t| + |\psi_t\rangle\left(\frac{d}{dt}\langle\psi_t|\right) =$$
$$= -i(h + V_H(\psi_t) + V_D(\psi_t))|\psi_t\rangle\langle\psi_t| + i|\psi_t\rangle(h + V_H(\psi_t) + V_D(\psi_t)) =$$
$$= -i[h + V_H(\rho(t)) + V_D(\rho(t)), \rho(t)]$$

$$V_H(\psi) = \langle\psi|(V_{12} + V_{21})|\psi\rangle = \mathrm{Tr}_2(V_{12} + V_{21})I \otimes |\psi\rangle\langle\psi| =$$
$$= \mathrm{Tr}_2(V_{12} + V_{21})I \otimes \rho$$

Приближение среднего поля и нелинейное уравнение Шрёдингера

$$V_D(\psi) = \frac{i}{2}\sum_{\alpha}(\langle\psi|(V^{\alpha})^{\dagger}|\psi\rangle V^{\alpha} - \langle\psi|V^{\alpha}|\psi\rangle (V^{\alpha})^{\dagger}) =$$

$$= \frac{i}{2}\sum_{\alpha}(\mathrm{Tr}((V^{\alpha})^{\dagger}|\psi\rangle\langle\psi|)V^{\alpha} - \mathrm{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|V^{\alpha})(V^{\alpha})^{\dagger}) =$$

$$= \frac{i}{2}\sum_{\alpha}(\mathrm{Tr}((V^{\alpha})^{\dagger}\rho)V^{\alpha} - \mathrm{Tr}(\rho V^{\alpha})(V^{\alpha})^{\dagger}) \quad \square$$

Приближение среднего поля и нелинейное уравнение Шрёдингера

Такое уравнение возникает в приближении среднего поля из линейного многочастичного уравнения $\mathcal{H}^{\otimes N}$

$$\frac{d}{dt}\rho_N(t) = -\, i\left[\sum_j h_j + \frac{1}{N}\sum_{i\neq j} V_{ij}, \rho_N(t)\right] + \\ + \frac{1}{N}\sum_\alpha \left(W^\alpha \rho_N(t)(W^\alpha)^\dagger - \frac{1}{2}\{(W^\alpha)^\dagger W^\alpha, \rho_N(t)\}\right),$$

где $W^\alpha = \sum_i V_i^\alpha$ — коллективные операторы.

$$\rho(t) = \lim_{N\to+\infty} \mathrm{Tr}_{2,\ldots,N}\, \rho_N(t)$$

Пример

$$\frac{d}{dt}\rho_N(t) = -i\omega[J^z, \rho_N(t)] + \underbrace{\gamma_0}_{\frac{1}{N}N\gamma_0}\left(J^-\rho_N(t)J^+ - \frac{1}{2}\{J^+J^-, \rho_N(t)\}\right)$$

$$J^z = \sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\sigma_j^z, \qquad J^\pm = \sum_{j=1}^{N}\sigma_j^\pm$$

Пример

$$\frac{d}{dt}\rho_N(t) = -i\omega[J^z, \rho_N(t)] + \underbrace{\gamma_0}_{\frac{1}{N}N\gamma_0}\left(J^-\rho_N(t)J^+ - \frac{1}{2}\{J^+J^-, \rho_N(t)\}\right)$$

$$J^z = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2}\sigma_j^z, \qquad J^\pm = \sum_{j=1}^N \sigma_j^\pm$$

$$h = \frac{1}{2}\sigma^z, \quad V_H(\psi) = 0, \quad V_D(\psi) = \frac{iN\gamma_0}{2}(\langle\psi|\sigma^+|\psi\rangle\sigma^- - \langle\psi|\sigma^-|\psi\rangle\sigma^+)$$

Пример

$$\frac{d}{dt}\rho_N(t) = -i\omega[J^z, \rho_N(t)] + \underbrace{\gamma_0}_{\frac{1}{N}N\gamma_0}\left(J^-\rho_N(t)J^+ - \frac{1}{2}\{J^+J^-, \rho_N(t)\}\right)$$

$$J^z = \sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\sigma_j^z, \qquad J^{\pm} = \sum_{j=1}^{N}\sigma_j^{\pm}$$

$$h = \frac{1}{2}\sigma^z, \quad V_H(\psi) = 0, \quad V_D(\psi) = \frac{iN\gamma_0}{2}(\langle\psi|\sigma^+|\psi\rangle\sigma^- - \langle\psi|\sigma^-|\psi\rangle\sigma^+)$$

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -i\frac{\omega}{2}\sigma^z|\psi(t)\rangle + \\ + \frac{N\gamma_0}{2}(\langle\psi(t)|\sigma^+|\psi(t)\rangle\sigma^- - \langle\psi(t)|\sigma^-|\psi(t)\rangle\sigma^+)|\psi(t)\rangle$$

Пример

Распишем покомпонентно

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\psi_1(t) & = -i\frac{\omega}{2}\psi_1(t) - \frac{N\gamma_0}{2}|\psi_2(t)|^2\psi_1(t) \\ \frac{d}{dt}\psi_2(t) & = i\frac{\omega}{2}\psi_2(t) + \frac{N\gamma_0}{2}|\psi_1(t)|^2\psi_2(t) \end{cases}$$

Сохраняется нормировка

$$|\psi_1(t)|^2 + |\psi_2(t)|^2 = 1$$

Введём $p(t) = |\psi_1(t)|^2$, тогда

$$\psi_1(t) = \sqrt{p(t)}e^{i\theta(t)}$$
$$\psi_2(t) = \sqrt{1-p(t)}e^{i\phi(t)}$$

Пример

$$\frac{d}{dt}\psi_1(t) = \frac{d}{dt}(\sqrt{p(t)}e^{i\theta(t)}) = \sqrt{p(t)}e^{i\theta(t)} = \frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{p(t)}\psi_1(t) + i\dot{\theta}(t)\psi_1(t)$$

$$\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{p(t)}\psi_1(t) + i\dot{\theta}(t)\psi_1(t) = -i\frac{\omega}{2}\psi_1(t) - \frac{N\gamma_0}{2}(1-p(t))\psi_1(t)$$

$$\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{p(t)} + i\dot{\theta}(t) = -i\frac{\omega}{2} - \frac{N\gamma_0}{2}(1-p(t))$$

Приравнивая вещественные и мнимые части

$$\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{p(t)} = -\frac{N\gamma_0}{2}(1-p(t)), \qquad \dot{\theta}(t) = -\frac{\omega}{2}$$

Пример

$$\frac{d}{dt}\psi_2(t) = \frac{d}{dt}(\sqrt{1-p(t)}e^{i\phi(t)}) = -\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{1-p(t)}\psi_2(t) + i\dot{\phi}(t)\psi_2(t)$$

$$-\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{1-p(t)}\psi_2(t) + i\dot{\phi}(t)\psi_2(t) = i\frac{\omega}{2}\psi_2(t) + \frac{N\gamma_0}{2}p(t)\psi_2(t)$$

$$-\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{1-p(t)} + i\dot{\phi}(t) = i\frac{\omega}{2} + \frac{N\gamma_0}{2}p(t)$$

$$-\frac{1}{2}\frac{\dot{p}(t)}{1-p(t)} = \frac{N\gamma_0}{2}p(t), \quad \dot{\phi}(t) = \frac{\omega}{2}$$

Пример

Решения для фаз

$$\theta(t) = \theta(0) - \frac{\omega}{2}t, \qquad \phi(t) = \phi(0) + \frac{\omega}{2}$$

— такие же, как при свободной эволюции.

Пример

$$\frac{dp(t)}{(1-p(t))p(t)} = -N\gamma_0 dt$$

$$\int \frac{dp}{p(1-p)} = \int \left(\frac{1}{p} + \frac{1}{1-p}\right) dp = \ln p - \ln(1-p) = \ln\frac{p}{1-p}$$

$$\frac{p}{1-p} = \frac{p_D}{1-p_D} e^{-N\gamma_0(t-t_D)}$$

t_D — время задержки сверхизлучения: $p_D = \frac{1}{2}$.

$$p(t) = \frac{1}{e^{N\gamma_0(t-t_D)}+1}$$

Пример

Среднее число атомов в возбуждённом состоянии $Np(t)$.
Интенсивность излучения

$$I(t) = -N\omega\frac{d}{dt}p(t) = -N\omega\frac{d}{dt}\frac{1}{e^{N\gamma_0(t-t_D)}+1} = \\ = \frac{\gamma_0\omega N^2}{4}\frac{1}{\operatorname{ch}^2\left(\frac{\gamma_0 N}{2}(t-t_D)\right)}$$