Основы теории открытых квантовых систем II. Лекция 11. Другие проекторы. Условные математические ожидания. Квантовое уравнение Больцмана

Теретёнков Александр Евгеньевич

15 апреля 2024 г.

Ранее...

Проектор

$$\mathcal{P}\rho = \mathrm{Tr}_B\, \rho \otimes \rho_B$$

Argyres, P. N., and P. L. Kelley. "Theory of spin resonance and relaxation." Physical Review 134.1A (1964): A98.

Сопряжение проекторов

Пусть начальное состояние согласовано с проектором $\mathcal{P}\rho_0$, тогда

$$\mathcal{P}\rho_t = \mathcal{P}\Phi_t\rho_0 = \mathcal{P}\Phi_t\mathcal{P}\rho_0$$

И, фактически, когда пишутся интегро-дифференциальные и интегральные уравнения для $\mathcal{P}\rho_t$, то они пишутся для

$$\mathcal{P}\Phi_t\mathcal{P}$$

Соответственно можно сделать переход и в представление Гейзенберга, тогда эволюция чётких наблюдаемых будет описываться

$$\mathcal{P}^*\Phi_t^*\mathcal{P}^*$$

Сопряжение проекторов

Утверждение.

$$\mathcal{P}^*(X) = \mathrm{Tr}_B(X(I \otimes \rho_B)) \otimes I$$

Доказательство. Сначала проверим для $X = S \otimes B$

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\, S \otimes B\mathcal{P}\rho = \mathrm{Tr}(S \otimes B(\mathrm{Tr}_B\, \rho \otimes \rho_B)) &= \mathrm{Tr}_S(S\, \mathrm{Tr}_B\, \rho)\, \mathrm{Tr}_B(B\rho_B) \\ = \mathrm{Tr}(S \otimes I\rho)\, \mathrm{Tr}_B(B\rho_B) &= \mathrm{Tr}(S\, \mathrm{Tr}_B(B\rho_B) \otimes I\rho) \\ &= \mathrm{Tr}(\mathrm{Tr}_B(S \otimes B\rho_B) \otimes I\rho)\end{aligned}$$

В общем случае, представим $X = \sum_k S_k \otimes B_k$ и используем линейность $\mathcal{P}^*$. $\square$

В частности,

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}^* \Leftrightarrow \rho_B = \frac{I_B}{\mathrm{Tr}_B\, I_B}$$

Проектор Цванцига

- Zwanzig R. *On the identity of three generalized master equations*, Physica. 30: 1109-1123 (1964).

$$\mathcal{P}\rho = \sum_n \langle n|\rho|n\rangle |n\rangle\langle n|$$

Иногда называется *операция дефазировки (dephasing operation)*

- Streltsov A, Adesso G and Plenio M B *Quantum Coherence as a Resource*, Reviews of Modern Physics 89 041003 (2017).

Утверждение.

$$\mathcal{P}^* = \mathcal{P}$$

Коррелированный проектор

- Breuer, H. P. (2007). Non-Markovian generalization of the Lindblad theory of open quantum systems. Physical Review A, 75(2), 022103.

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

$$\mathcal{P} = I \otimes \Lambda,$$

где I — единичный супероператор (таким образом, информацию о системе полная — мы ничего не выкинули), Λ — вполне положительное сохраняющие след отображение, само являющееся идемпотентном $\Lambda^2 = \Lambda$.

Вполне положительное отображение: Λ называется вполне положительным, если $\forall X^\dagger = X \geqslant 0$

$$(I_n \otimes \Lambda)X \geqslant 0, \qquad \forall n \in \mathbb{N}$$

Коррелированный проектор

Утверждение. Такой проектор может быть представлен в виде

$$\mathcal{P}\rho = \sum_n \operatorname{Tr}_B((I \otimes A_n)\rho) \otimes B_n,$$

где

$$B_n = B_n^\dagger, \quad A_n = A_n^\dagger, \quad \operatorname{Tr}_B B_n A_m \equiv \langle\langle B_n | A_m \rangle\rangle = \delta_{nm}$$

— операторы в $\mathcal{H}_B$, $\{A_n\}$ — линейно независимы и $\{B_n\}$ также (биортогональные базисы). И

$$\sum_n A_n^T \otimes B_n \geqslant 0$$

(условие вполне положительности).

Коррелированный проектор

Проверим, что он действительно является проектором

$$
\mathcal{P}^2\rho = \sum_n \operatorname{Tr}_B(A_n\mathcal{P}\rho)\otimes B_n = \sum_{nm} \operatorname{Tr}_B(A_n \operatorname{Tr}_B(A_m\rho)\otimes B_m)\otimes B_n
$$
$$
= \sum_{nm} \operatorname{Tr}_B(A_nB_m) \operatorname{Tr}_B(A_m\rho)\otimes B_n = \sum_{nm} \delta_{nm} \operatorname{Tr}_B(A_m\rho)\otimes B_n
$$
$$
= \sum_n \operatorname{Tr}_B(A_n\rho)\otimes B_n = \mathcal{P}\rho
$$

(Для этого не требуется вполне положительность.)

Коррелированный проектор

Сопряжённый проектор:

$$\mathcal{P}^* X = \sum_n \mathrm{Tr}_B((I \otimes B_n)X) \otimes A_n,$$

Коррелированный проектор: Частные случаи

Стандартный проектор:
Единственный член в сумме

$$A_1 = I, \qquad B_1 = \rho_B$$

Проверим условия:

$$B_1 = B_1^\dagger, \quad A_1 = A_1^\dagger, \quad \operatorname{Tr}_B B_1 A_1 = \operatorname{Tr}_B \rho_B = 1$$

$$A_1^T \otimes B_1 = I \otimes \rho_B \geqslant 0$$

Коррелированный проектор: Частные случаи

Сепарабельный проектор:
Ортогональное разложение единицы в $\mathcal{H}_B$

$$\Pi_n \Pi_m = \delta_{nm} \Pi_m, \qquad \Pi_n^\dagger = \Pi_n, \qquad \sum_n \Pi_n = I_B$$

$$A_n = \Pi_n, \qquad B_n = \frac{\Pi_n \rho_B \Pi_n}{\mathrm{Tr}_B\, \Pi_n \rho_B}$$

(B_n — апостериорное состояние в результате селективного измерения наблюдаемой вида $\sum_n \lambda_n \Pi_n$)

$$\mathcal{P}\rho = \sum_n \mathrm{Tr}_B\, \Pi_n \rho \otimes \frac{\Pi_n \rho_B \Pi_n}{\mathrm{Tr}_B\, \Pi_n \rho_B}$$

Коррелированный проектор: Динамика

Если обозначать $b_n = \mathrm{Tr}_B(A_n \rho)$, то получим уравнение Накажимы-Цванцыга (начальное условие согласовано с проектором $\mathcal{P}\rho(0) = \rho(0)$)

$$\frac{d}{dt} b_n(t) = \sum_m \int_0^t ds (\mathcal{K}_s^t)_{nm} b_m(s)$$

$$(\mathcal{K}_s^t)_{nm} = \mathrm{Tr}_B((I \otimes A_n)\mathcal{K}_s^t(I \otimes B_m))$$

$$(\mathcal{K}_s^t)_{nm} = -\lambda^2 \, \mathrm{Tr}_B(I \otimes A_n[H_I(t), [H_I(s), I \otimes B_m]]) + O(\lambda^4)$$

Коррелированный проектор: Динамика

Локальный по времени генератор

$$\frac{d}{dt} b_n(t) = \sum_m (\mathcal{K}_t)_{nm} b_m(s)$$

$$(\mathcal{K}_t)_{nm} = (\mathcal{K}_t)_{nm} = \mathrm{Tr}_B((I \otimes A_n)\mathcal{K}_t(I \otimes B_m))$$

$$(\mathcal{K}_t)_{nm} = -\lambda^2 \int_0^t dt_1 \, \mathrm{Tr}_B(I \otimes A_n [H_I(t), [H_I(t_1), I \otimes B_m]]) + O(\lambda^4)$$

Проектор в рамках теории Фёрстера и модифицированного уравнения Редфильда

- A. Trushechkin. Calculation of Coherences in Förster and Modified Redfield Theories of Excitation Energy Transfer. The Journal of Chemical Physics 151: 7 (2019): 074101.

$$\mathcal{P}\rho = \sum_n \mathrm{Tr}_B(\langle n|\rho|n\rangle)|n\rangle\langle n| \otimes \rho_{B,n},$$

где $\rho_{B,n}$ — фиксированные матрицы плотности.
(Уже не вся информация о системе, часть уже содержится в $\mathcal{Q}$, что сближает с проекторами, которые уже ранее рассматривались в статистической физике.)

Условные математические ожидания

- А. С. Холево Статистическая структура квантовой теории, М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. Раздел 3.1.3.
- M. M. Wolf. Quantum Channels & Operations Guided Tour, 2010. Sec. 1.6

Определение. Пусть $\mathcal{B}$ — унитальная *-подалгебра унитальной *-алгебры $n \times n$ матриц $\mathcal{A}$ (множество матриц замкнутое относительно линейных комбинаций, матричного умножения, эрмиотового сопряжения и содержащих единицу). Тогда отображение $\mathcal{E} : \mathcal{A} \to \mathcal{A}$ называется квантовым условным математическим ожиданием, если

$$\mathcal{E}(B_1 A B_2) = B_1 \mathcal{E}(A) B_2, \qquad \forall B_1, B_2 \in \mathcal{B}, \qquad \forall A \in \mathcal{A}$$

Условные математические ожидания

Утверждение.

1. $\mathcal{E}^2 = \mathcal{E}$
2. $\mathcal{E}$ — вполне положительно

Условные математические ожидания

Утверждение.

1. Произвольную унитальную *-подалгебру $\mathcal{B}$ унитальной *-алгебры $n \times n$ матриц $\mathcal{A}$ можно представить в виде
$$\mathcal{B} = U \oplus_{k=1}^{K} (\mathbb{C}^{n_k \times n_k} \otimes I_{m_k}) U^\dagger$$
Ему соответствует разложение $\mathbb{C}^n = \oplus_{k=1}^{K} (\mathcal{H}_{n_k} \otimes \mathcal{H}_{m_k})$ и определить изометрии $V_k : \mathbb{C}^n \to \mathcal{H}_{n_k} \otimes \mathcal{H}_{m_k}$, причём $V_k V_l^\dagger = \delta_{lk} I_{n_k} \otimes I_{m_k}$.
2. Соответствующие $\mathcal{E}$ можно представить в виде
$$\mathcal{E}(A) = \sum_{k=1}^{K} V_k^\dagger \left(\mathrm{Tr}_{m_k} V_k^\dagger A V_k (I_{n_k} \otimes \rho_{m_k}) \right) \otimes I_{m_k} V_k,$$
где ρ_{m_k} — матрицы плотности в $\mathcal{H}_{m_k}$.

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 престановок

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

Оператор перестановки определён в базисе как

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

Квантовое уравнение Больцмана

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

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

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

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

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, $\frac{d}{dt}E_t = 0$. $\square$