Основы теории открытых квантовых систем II. Лекция 13. Проектор Кавасаки-Гантона. Динамика Робертсона. Модель Калдейры-Легетта

Теретёнков Александр Евгеньевич

29 апреля 2024 г.

В прошлой серии...

Определение 1 (Шаг 0)

Пусть P_m, $m = 1, \ldots, M$ — набор самосопряжённых матриц, линейно независимых друг от друга и от единичныой матрицы. Эти матрицы будем называть ***релевантными наблюдаемыми****.*
Пусть $\rho_{ans}(\vec{E})$ — семейство матриц плотности, непрерывно дифференцируемых как функция параметров $\vec{E}$, принадлежащих области в $\mathbb{R}^M$, и удовлетворяющих условиям

$$\operatorname{Tr} P_m \rho_{ans}(\vec{E}) = E_m,$$

которые мы будем называть ***условиями согласованности****.*
Это семейство $\rho_{ans}(\vec{E})$ будем называть ***анзацем согласованным с релевантными наблюдаемыми*** *P_m.*

В прошлой серии...

Определение 1 (Шаг 1)

Пусть задан анзац $\rho_{ans}(\vec{E})$, согласованный с релевантными наблюдаемыми $\vec{P}$.
Введем семейство (линейных) супероператоров $\mathcal{P}_{KG,par}(\vec{E})$, также параметризованных вектором $\vec{E}$, которые действуют на произвольную матрицу X по формуле

$$\mathcal{P}_{KG,par}(\vec{E})X \equiv \rho_{ans}(\vec{E}) \operatorname{Tr} X + \left(\operatorname{Tr}(X\vec{P}) - (\operatorname{Tr} X)\vec{E}, \frac{\partial \rho_{ans}(\vec{E})}{\partial \vec{E}} \right).$$

В прошлой серии...

Определение 1 (Шаг 2)

Введем супероператорно-значную функцию $\mathcal{P}_{KG,NL}(\rho)$ матрицы плотности ρ по формуле

$$\mathcal{P}_{KG,NL}(\rho) = \mathcal{P}_{KG,par}(\vec{E})|_{\vec{E}\equiv \mathrm{Tr}\, \vec{P}\rho}$$

В прошлой серии...

Утверждение 1

Если $\operatorname{Tr}\rho = 1$ *(в частности, если* ρ *— матрица плотности)*

$$\mathcal{P}_{KG,NL}(\rho)\rho = \rho_{ans}(\vec{E})_{\vec{E}=\operatorname{Tr}(\rho\vec{P})}.$$

Таким образом, функция $\mathcal{F}(\rho) \equiv \mathcal{P}_{KG,NL}(\rho)\rho$ отображает произвольную матрицу плотности в матрицу плотности, соответствующую выбранному анзацу $\rho_{ans}(\vec{E})$ так, что средние по всем релевантным наблюдаемым исходной матрицы плотности ρ и анзаца $\rho_{ans}(\vec{E})$ совпадают.

В прошлой серии...

Определение 1 (Шаг 3)

Пусть матрица плотности $\rho(t)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \lambda\mathcal{L}(t)\rho(t),$$

тогда определим супероператорно-значную функцию времени $t \in [t_0, +\infty)$

$$\mathcal{P}_{KG}(t) \equiv \mathcal{P}_{KG,NL}(\rho(t)).$$

Эту функцию будем называть ***обобщенным проектором Кавасаки-Гантона***, соответствующим анзацу $\rho_{ans}(\vec{E})$, согласованному с соответствующими наблюдаемыми $\vec{P}$.

Обобщенный проектор Кавасаки-Гантона

Утверждение 2

Для обобщенного проектора Кавасаки-Гантона выполняется условие динамики Робертсона

$$\dot{\mathcal{P}}_{KG}(t)\rho(t) = 0.$$

Обычный проектор Кавасаки-Гантона

Стандартное определение проектора Кавасаки-Гантона основано на семействе распределений Гиббса вида

$$\rho_{Gibbs}(\vec{\beta}) = \frac{e^{-(\vec{\beta},\vec{P})}}{Z(\vec{\beta})}, \qquad Z(\vec{\beta}) \equiv \mathrm{Tr}\, e^{-(\vec{\beta},\vec{P})},$$

где $(\vec{\beta}, \vec{P}) \equiv \sum_m \beta_m P_m$. Тогда, решая систему

$$\mathrm{Tr}\, \vec{P} \rho_{Gibbs}(\vec{\beta}) = \vec{E}$$

относительно $\vec{\beta}$, где $\vec{E}$ играет роль семейства параметров, получаем функцию $\vec{\beta}(\vec{E})$ и семейство распределений Гиббса может быть репараметризована посредством $\vec{E}$. Такое репораметризованное семейство играет роль анзаца согласовного с набором $\vec{P}$, то есть в данном случае

$$\rho_{ans}(\vec{E}) = \rho_{Gibbs}(\vec{\beta}(\vec{E})).$$

Обычный проектор Кавасаки-Гантона

- *Kawasaki K., Gunton J.D.* Theory of Nonlinear Transport Processes: Nonlinear Shear Viscosity and Normal Stress Effects // Phys. Rev. A. 1973. V. 8, N 4.
- *Zubarev D., Morozov V.G., Röpke G.* Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes. Berlin: Akademie Verlag, 1997.
- *Seke J.* Equations of Motion in Nonequilibrium Statistical Mechanics of Open Systems // Phys. Rev. A. 1980. V. 21, N 6. P. 2156–2165.
- *Kato A., Kaufmann M., Muschik W., Schirrmeister D.* Different Dynamics and Entropy Rates in Quantum-Thermodynamics // J. Non-Equilib. Thermodyn. 2000. V. 25, N 1. P. 63–86.

Обычный проектор Кавасаки-Гантона

- *Semin V., Petruccione F.* Dynamical and Thermodynamical Approaches to Open Quantum Systems // Sci. Rep. 2020. V. 10, N 1. P. 2607.

$$\rho_{Renyi,q}(\vec{E}) = \frac{1}{Z_q(\vec{E})}\left(1 + \frac{q-1}{q}(\vec{\beta}(\vec{E}), \vec{E} - \vec{P})\right)^{\frac{1}{q-1}},$$

где q — параметр энтропии Реньи, $Z_q(\vec{E})$ определяется условием нормировки

$$\mathrm{Tr}\, \rho_{Renyi,q}(\vec{E}) = 1,$$

а функции $\vec{\beta}(\vec{E})$ выбираются так, чтобы выполнялись условия согласованности.

Линейные анзацы

Утверждение 3

Пусть анзац $\rho_{ans}(\vec{E})$ *имеет вид* $\rho_{ans}(\vec{E}) = B_0 + (\vec{E}, \vec{B})$, *где* B_0 *и* $\vec{B}$ *представляют собой фиксированный (не зависящий от* $\vec{E}$*) набор матриц, тогда* $\mathcal{P}_{KG}(t) = \mathrm{const}$.

Линейные анзацы

Неформально говоря, в "стандартной"ситуации мы имеем

$$\rho_{ans}(\rho_S) = \rho_S \otimes \rho_B$$

при $\vec{E} = \rho_S$, $\rho_B = \mathrm{fix}$ и $\vec{P}$ таковы, что они образуют базис в линейном пространстве вида $X \otimes I$ вместе с $I \otimes I$.
Тогда проектор Кавасаки-Гантона сводится к проектору Арджироса-Келли

$$\mathcal{P}_{KG} = \mathcal{P}_{AK} = \mathrm{tr}_B(\,\cdot\,) \otimes \rho_B$$

Уравнение первого порядка

Утверждение 4

Для проектора Кавасаки-Гантона и начального условия в форме, определяемой анзацем, линейное кинетическое уравнение первого порядка (опуская члены $O(\lambda^2)$) принимает вид

$$\frac{d}{dt}\left(\rho_{ans}(\vec{E})|_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}}\right)$$
$$= \lambda\left(\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\rho_{ans}(\vec{E})\right), \frac{\partial\rho_{ans}(\vec{E})}{\partial\vec{E}}\right)_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}}$$

Уравнение первого порядка

Что можно переписать в виде

$$\frac{d}{dt}\vec{E}(t) = \lambda \operatorname{Tr}(\vec{P}\mathcal{L}(t)\rho_{ans}(\vec{E}(t)),$$

Поэтому можно просто усреднить уравнение

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \lambda\mathcal{L}(t)\rho(t)$$

по отношению к релевантным наблюдаемым параметрам $\vec{P}$, предполагая $\rho(t) \approx \rho_{ans}(\vec{E}(t))$.

Уравнение первого порядка

Например, для $\rho(t)$ в гильбертовом пространстве вида $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$.

$$\rho_{ans}(\rho_1(t)) = \rho_1(t) \otimes \rho_1(t)$$

и при тех же $\vec{P}$, что и для Арджироса-Келли, получается уравнение типа Хартри

$$\frac{d}{dt}\rho_1(t) = \lambda \operatorname{Tr}_2(\mathcal{L}(t)(\rho_1(t) \otimes \rho_1(t))),$$

Уравнение второго порядка

$$\frac{d}{dt}\left(\rho_{ans}(\vec{E})|_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}}\right) =$$

$$\lambda\left(\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\rho_{ans}(\vec{E})\right), \frac{\partial\rho_{ans}(\vec{E})}{\partial\vec{E}}\right)_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}}$$

$$+\lambda^2\left(\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\int_{t_0}^{t} dt_1\mathcal{L}(t_1)\rho_{ans}(\vec{E})\right), \frac{\partial\rho_{ans}(\vec{E})}{\partial\vec{E}}\right)_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}}$$

$$-\lambda^2\left(\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\rho_{ans}(\vec{E})\right), \frac{\partial\rho_{ans}(\vec{E})}{\partial\vec{E}}\right)_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}} \times$$

$$\times\left(\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\int_{t_0}^{t} dt_1\mathcal{L}(t_1)\rho_{ans}(\vec{E})\right), \frac{\partial\rho_{ans}(\vec{E})}{\partial\vec{E}}\right)_{\vec{E}=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}}.$$

Уравнение второго порядка

Если $\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\rho_{ans}(\vec{E})\right) = 0$, то он принимает вид

$$\frac{d}{dt}\vec{E}(t) = \lambda^2 \,\mathrm{Tr}\left(\vec{P}\mathcal{L}(t)\int_{t_0}^{t} dt_1 \mathcal{L}(t_1)\rho_{ans}(\vec{E}(t))\right),$$

где $\vec{E}(t) = \mathrm{Tr}\,\rho(t)\vec{P}$. Для проектора Арджироса-Келли это приводит к обычным уравнениям второго порядка для открытых квантовых систем. И нестрого для общего анзаца $\rho_{ans}(\vec{E}(t))$ оно может быть "выведено" физическим способом, используя приближение $\rho(t) \approx \rho_{ans}(\vec{E}(t))$ вместо борновского приближения $\rho \approx \rho_S \otimes \rho_B$.

Модель Калдейры-Легетта

Гильбертово пространство

$$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathfrak{F}_b(\mathcal{L}^2(\mathbb{R}))$$

Коммутационные соотношения

$$[x,p] = i, \qquad [b_k, b_{k'}^\dagger] = \delta(k - k')$$

Гамилтониан

$$H = H_S + H_B + H_I$$

$$H_S = \frac{p^2}{2m} + V(x), \qquad H_B = \int dk \omega_k b_k^\dagger b_k,$$

$$H_I = -xB, \qquad B = \int dk g_k (b_k + b_k^\dagger), \qquad g_k \in \mathbb{R}$$

Модель Калдейры-Легетта

Утверждение. Пусть

$$B(t) \equiv e^{iH_Bt} B e^{-iH_Bt} = \int dk g_k (e^{-i\omega_k t} b_k + e^{i\omega_k t} b_k^\dagger)$$

— свободная эволюция B, а

$$x(t) \equiv e^{iHt} x e^{-iHt}$$

— гейзенбергоская эволюцию кооридннаты x, тогда

$$m\ddot{x}(t) + V'(x(t)) - \int_0^t D(t-s) x(s) = B(t),$$

где

$$D(t) = 2 \int dk g_k^2 \sin \omega_k t$$

Модель Калдейры-Легетта

Доказательство. Уравнения Гейзенберг

$$\dot{p}(t) = i[H, p(t)] = -V'(x(t)) + \int dk g_k (b_k(t) + b_k^\dagger(t))$$

$$\dot{x}(t) = i[H, x(t)] = \frac{p(t)}{m}$$

$$\dot{b}_k(t) = i[H, b_k(t)] = -i\omega_k b_k(t) + i g_k x(t)$$

$$b_k(t) = e^{-i\omega_k t} b_k + i g_k \int_0^t e^{-i\omega_k (t-s)} x(s)$$

Модель Калдейры-Легетта

$$\int dk g_k (b_k(t) + b_k^\dagger(t)) = \int dk g_k (e^{-i\omega_k t} b_k + e^{i\omega_k t} b_k^\dagger) +$$

$$+ i \int dk g_k^2 \int_0^t (e^{-i\omega_k (t-s)} - e^{i\omega_k (t-s)}) x(s) =$$

$$= B(t) + \int_0^t \underbrace{2 \int dk g_k^2 \sin \omega_k (t-s)}_{D(t-s)} x(s)$$

$\square$

Модель Калдейры-Легетта

Утверждение. $-i[B(t), B(s)] = D(t-s)$.

Утверждение. В равновесном случае, то есть при усреднении $\langle \cdot \rangle$ по равновесному состоянию $\rho_B = \frac{e^{-\beta H_B}}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H_B}}$

$$\langle \{B(t), B(s)\} \rangle = D_{\mathrm{th}}(t) \equiv 2 \int dk g_k^2 \operatorname{cth} \frac{\beta \omega_k}{2} \cos \omega_k t$$

Модель Калдейры-Легетта

Также как и для спин-бозона можно ввести спектральную плотность

$$J(\omega) = \int dk g_k^2 \delta(\omega - \omega_k), \qquad \omega_k > 0$$

$$D(t) = 2\int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin \omega t$$

$$D_{\text{th}}(t) = 2\int_0^\infty d\omega \operatorname{cth} \frac{\beta\omega}{2} \cos \omega t J(\omega)$$

Модель Калдейры-Легетта

В случае квадратичного потенциала $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$, имеем

$$m\ddot{x}(t) + m\omega_0^2 x(t) - \int_0^t D(t-s)x(s) = B(t),$$

В этом случае уже исходный гамильтониан является бесконечно-мерным обобщением унитарной динамики с квадратичным гамильтонианом, рассмотренной ранее. В частности, если начальное состояние системы и резервуара — гауссовское, то оно сохраняется в процессе эволюции, кроме того, редуцированная динамика — также гауссовская.

Модель Калдейры-Легетта

Утверждение. Пусть $X_{1,2}(t)$ — решения (скалярного) уравнения

$$m\ddot{X}(t) + m\omega_0^2 X(t) - \int_0^t ds D(t-s) X(s) = 0$$

с начальным условием $X_1(0) = 1$, $\dot{X}_1(0) = 0$ и $X_2(0) = 0$, $\dot{X}_2(0) = 1$, тогда

$$x(t) = X_1(t)x(0) + X_2(t)\dot{x}(0) + \frac{1}{m}\int_0^t ds X_2(t-s) B(s).$$

Модель Калдейры-Легетта

Доказательство. Преобразование Лапласа $\tilde{x}(p) = \int_0^\infty dt e^{-pt} x(t)$ уравнения

$$m\ddot{x}(t) + m\omega_0^2 x(t) - \int_0^t ds D(t-s) x(s) = B(t)$$

имеет вид

$$m(p^2 \tilde{x}(p) - px(0) - \dot{x}(0)) + m\omega_0^2 \tilde{x}(p) - \tilde{D}(p)\tilde{x}(p) = \tilde{B}(p),$$

тогда

$$\tilde{x}(p) = \frac{1}{m(p^2 + \omega_0^2) - \tilde{D}(p)} (\tilde{B}(p) + m\dot{x}(0) + mpx(0))$$

Модель Калдейры-Легетта

При $\tilde{B}(p)$ с соответствующими начальными условиями, имеем

$$\tilde{X}_1(p) = \frac{m}{m(p^2+\omega_0^2) - \tilde{D}(p)} p$$

$$\tilde{X}_2(p) = \frac{m}{m(p^2+\omega_0^2) - \tilde{D}(p)}$$

тогда

$$\tilde{x}(p) = \tilde{X}_1(p)x(0) + \tilde{X}_2(p)\dot{x}(0) + \frac{1}{m}\tilde{X}_2(p)\tilde{B}(p)$$

После обратного преобразования получаем требуемое. $\square$

$$x(t) = X_1(t)x(0) + X_2(t)\dot{x}(0) + \frac{1}{m}\int_0^t ds X_2(t-s)B(s)$$

В случае $\langle B(t)\rangle = 0$ (в частности, в случае равновесного резервуара)

$$\langle x(t)\rangle = X_1(t)\langle x(0)\rangle + X_2(t)\langle \dot{x}(0)\rangle$$

$$x(t) - \langle x(t)\rangle = X_1(t)(x(0) - \langle x(0)\rangle) + X_2(t)(\dot{x}(0) - \langle \dot{x}(0)\rangle) + \\ + \frac{1}{m}\int_0^t ds X_2(t-s)B(s)$$

Модель Калдейры-Легетта

Пусть в начальные момент времени система и резервуар некоррелированы, тогда

$$\langle (x(t) - \langle x(t)\rangle)^2\rangle =$$
$$= (X_1(t))^2 \langle (x(0) - \langle x(0)\rangle)^2\rangle + X_2(t)\langle (\dot{x}(0) - \langle \dot{x}(0)\rangle)^2\rangle +$$
$$+ X_1(t) X_2(t) \langle \{x(0) - \langle x(0)\rangle, \dot{x}(0) - \langle \dot{x}(0)\rangle\}\rangle +$$
$$+ \frac{1}{m^2}\int_0^t ds_1 \int_0^t ds_2 X_2(t - s_1) X_2(t - s_2) \langle B(s_1) B(s_2)\rangle,$$

где $\langle B(s_1) B(s_2)\rangle$ определяется $D(t)$ и $D_{\mathrm{th}}(t)$ в случае равновесного резервуара.

Модель Калдейры-Легетта

Аналогично, можно вычислить $\langle(\dot{x}(t) - \langle\dot{x}(t)\rangle)^2\rangle$ и $\langle\{x(t) - \langle x(t)\rangle, \dot{x}(t) - \langle\dot{x}(t)\rangle\}\rangle$, что однозначно задаёт динамику гауссовской редуцированное матрицы плотности системы.