Основы теории открытых квантовых систем. Лекция 3. Декогерентность и лоренцевский спектр. Чистая дефазировка. Кинетическое уравнение Паули. Монотонность классической относительной энтропии

Теретёнков Александр Евгеньевич

24 сентября 2024 г.

В прошлой лекции...

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.

В прошлой лекции...

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.

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

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-уровневая 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

$$
\begin{aligned}
\langle d(\omega)\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t}\langle d(t)\rangle dt = \\
&= \int_{0}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{m\neq k} d_{mk} e^{-(\Gamma_{km}-i\omega_{km})t}\rho_{km}(0) + \\
&\quad + \int_{0}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \sum_{m\neq k} d_{mk} e^{-(\Gamma_{km}+i\omega_{km})t}\rho_{km}(0) = \\
&= \sum_{m\neq k} \frac{2\Gamma_{km}}{(\omega-\omega_{km})^2+\Gamma_{km}^2} d_{mk}\rho_{km}(0)
\end{aligned}
$$

— Лоренцевское (однородное) уширение спектра.

Чистая дефазировка

В случае, когда $\gamma_{ij} = \gamma_{ii}\delta_{ii}$, то есть только члены пропорциональные одномерным проекторам $C_{ii} = \sqrt{\gamma_{ii}}|i\rangle\langle j|$ входят в генератор, то вклады в уравнение Паули сократятся

$$\frac{d}{dt}\rho_{kk} = \gamma_{kk}\rho_{kk} - \gamma_{kk}\rho_{kk} = 0$$

и населённости не будут меняться, как и при унитарной динамике.

А вклады в динамику когерентностей будут

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

Такую ситуацию часто называют ***чистой дефазировкой***.
На такую динамику можно смотреть как на динамику в случае неселективного измерения проходящего за конечное время.

Кинетическое уравнение Паули. Классические Марковские цепи с непрерывным временем

$p_k(t) \equiv \rho_{kk}(t)$.

$$\frac{d}{dt} p_k(t) = \sum_j \gamma_{kj} p_j(t) - \left(\sum_i \gamma_{ik} \right) p_k(t)$$

Составим из компонент p_k вектор p. Условие нормировки $\sum_k p_k = 1$ можно переписать как $e^T p = 1$, где введён вектор

$$e = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Кинетическое уравнение Паули. Классические Марковские цепи с непрерывным временем

Перепишем кинетическое уравнение Паули

$$\frac{d}{dt}p = \gamma p - \gamma^T e \circ p,$$

где $\circ$ — поэлементное произведение n-векторов. γ — произвольная матрица с неотрицательными элементами.
Точно также уравнение ГКСЛ можно записать в виде:

$$\frac{d}{dt}\rho_t = -i[H, \rho_t] + \Psi(\rho_t) - \frac{1}{2}\{\Psi^*(I), \rho_t\},$$

где

$$\Psi(\rho) = \sum_j C_j \rho C_j^\dagger$$

— вполне положительное отображение (но не сохраняющее след).

Кинетическое уравнение Паули. Классические Марковские цепи с непрерывным временем

С другой стороны уравнение Паули имеет вид

$$\frac{d}{dt}p(t) = Lp(t),$$

Его решение

$$p(t) = P(t)p(0),$$

где $P(t) = e^{Lt}$ — стохастическая матрица, то есть это матрица с неотрицательным коэффициентами и $e^T P(t) = e^T$ ($\sum_i P_{ij}(t) = 1$). (Часто это определение транспонируют.)

Классические относительная энтропия и её монотонность

Расстояние Кульбака — Лейблера (относительная энтропия)

$$S(p||q) = \sum_i p_i \ln \frac{p_i}{q_i}$$

Более строго

$$S(p||q) = \begin{cases} \sum_{i:p_i \neq 0} p_i \ln \frac{p_i}{q_i}, & \operatorname{supp} p \subseteq \operatorname{supp} q \\ +\infty \end{cases}$$

Классические относительная энтропия и её монотонность

Почему расстояние?

$$S(p||q) \geqslant 0$$

причём равенство выполнено тогда и только тогда, когда $p = q$.

Классические относительная энтропия и её монотонность

Почему расстояние?

$$S(p||q) \geqslant 0$$

причём равенство выполнено тогда и только тогда, когда $p = q$. Для простоты ограничимся случаем $q_i > 0, p_i > 0$ и проверим только неравенство. Так как $\ln x \leqslant x - 1$ при $x > 0$, то

$$\sum_i p_i \ln \frac{p_i}{q_i} = -\sum_i p_i \ln \frac{q_i}{p_i} \geqslant$$

$$\geqslant -\sum_i p_i \left(\frac{q_i}{p_i} - 1 \right) = -\sum_i q_i + \sum_i p_i = 1 - 1 = 0$$

Утверждение. Пусть P — стохастическая матрица, тогда

$$S(Pp||Pq) \leqslant S(p||q)$$

Утверждение. Пусть P — стохастическая матрица, тогда

$$S(Pp||Pq) \leqslant S(p||q)$$

Доказательство.

$$S(Pp||Pq) - S(p||q) =$$

$$= \sum_{ij} P_{ij} p_j \ln \frac{\sum_k P_{ik} p_k}{\sum_k P_{ik} q_k} - \sum_j p_j \underbrace{}_{1=\sum_i P_{ij}} \ln \frac{p_j}{q_j} =$$

$$= \sum_{ij} P_{ij} p_j \left(\ln \frac{\sum_k P_{ik} p_k}{\sum_k P_{ik} q_k} - \ln \frac{p_j}{q_j} \right) = - \sum_{ij} P_{ij} p_j \ln \frac{p_j \sum_k P_{ik} q_k}{q_j \sum_k P_{ik} p_k} =$$

$$= - \sum_{ij} P_{ij} p_j \ln \frac{P_{ij} p_j \sum_k P_{ik} q_k}{P_{ij} q_j \sum_k P_{ik} p_k}$$

$$S(Pp||Pq) - S(p||q) = -\sum_{ij} P_{ij} p_j \ln \frac{P_{ij} p_j \sum_k P_{ik} q_k}{P_{ij} q_j \sum_k P_{ik} p_k}$$

$$p_j^{(i)} = \frac{P_{ij} p_j}{\sum_k P_{ik} p_k}, \qquad q_j^{(i)} = \frac{P_{ij} q_j}{\sum_k P_{ik} q_k}, \qquad p_i' = \sum_k P_{ik} p_k$$

$$p_j^{(i)} \geqslant 0, \ \sum_j p_j^{(i)} = 1, \qquad q_j^{(i)} \geqslant 0, \ \sum_j q_j^{(i)} = 1, \qquad \forall i$$

$$S(Pp||Pq) - S(p||q) = -\sum_{ij} p_i' p_j^{(i)} \ln \frac{p_j^{(i)}}{q_j^{(i)}} = -\sum_i p_i' S(p^{(i)}||q^{(i)}) \leqslant 0 \quad \square$$

- Cover T. M., Thomas J. A. Elements of information theory. – John Wiley & Sons, 2012. p. 81.

Физическая интерпретация

Пусть P — неприводимая стохастическая матрица, представим $(p_{\mathrm{st}})_i = \frac{e^{-\beta\varepsilon_i}}{Z}, Z = \sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}$.

$$S(p||p_{\mathrm{st}}) = \sum_i p_i \ln p_i - \sum_i p_i \ln(p_{\mathrm{st}})_i = -S(p) + \beta \underbrace{\sum_i p_i \varepsilon_i}_{\mathcal{E}} + \ln Z =$$

$$= \beta(\mathcal{E}(p) - TS(p) + T\ln Z) = \beta(F_p - F_{\mathrm{eq}})$$

Таким образом, мы получили отклонение значения свободной энергии от равновесного значения. При марковской динамики оно монотонно убывает.

Некоторые обобщения

Относительные энтропии Реньи:

$$S_\alpha(p||q) = \frac{1}{\alpha - 1} \ln \sum_{i=1}^{n} p_i^\alpha q_i^{1-\alpha}$$

Утверждение. Пусть P — стохастическая матрица, тогда

$$S_\alpha(Pp||Pq) \leqslant S_\alpha(p||q), \qquad \alpha \in [0, +\infty]$$

- T. Van Erven, P. Harremos. "Rényi divergence and Kullback-Leibler divergence." IEEE Transactions on Information Theory 60.7 (2014): 3797-3820.