

Основы теории открытых квантовых систем II.

Лекция 12. Другие проекторы и условные математические ожидания. Модель Калдейры-Легетта

Теретёнков Александр Евгеньевич

21 апреля 2025 г.

В прошлой лекции...

Утверждение.

$$\mathcal{L}_t \mathcal{L}_{t_1} \sigma_+ \otimes \rho_B = -G_I(t - t_1) \sigma_+ \otimes \rho_B,$$

где

$$\rho_B = |vac\rangle\langle vac|$$
$$G_I(t) = \int |g_k|^2 dk e^{-i(\omega_k - \Omega)t}$$

Кроме того,

$$\mathcal{P} \sigma_+ \otimes \rho_B = \sigma_+ \otimes \rho_B$$

В прошлой лекции...

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{t_1}(\sigma_+ \otimes \rho_B) &= -i[\hat{H}_{\text{SB},\text{I}}^{\text{RWA}}(t_1), \sigma_+ \otimes |vac\rangle\langle vac|] = \\ &= -i \int e^{i(\omega_k - \Omega)t_1} g_k^* \sigma_- \sigma_+ \otimes b_k^\dagger |vac\rangle\langle vac| dk\end{aligned}$$

В прошлой лекции...

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{t_1}(\sigma_+ \otimes \rho_B) &= -i[\hat{H}_{\text{SB,I}}^{\text{RWA}}(t_1), \sigma_+ \otimes |vac\rangle\langle vac|] = \\ &= -i \int e^{i(\omega_k - \Omega)t_1} g_k^* \sigma_- \sigma_+ \otimes b_k^\dagger |vac\rangle\langle vac| dk \\ \mathcal{L}_t \mathcal{L}_{t_1}(\sigma_+ \otimes \rho_B) &= \\ &= - \left[\hat{H}_{\text{SB,I}}^{\text{RWA}}(t), \int e^{i(\omega_k - \Omega)t_1} g_k^* \sigma_- \sigma_+ \otimes b_k^\dagger |vac\rangle\langle vac| dk \right] = \\ &= - \int g_{k'} e^{-i(\omega_{k'} - \Omega)t} \int e^{i(\omega_k - \Omega)t_1} g_k^* \sigma_+ \sigma_- \sigma_+ \otimes b_{k'} b_k^\dagger |vac\rangle\langle vac| dk dk' = \\ &= - \int g_{k'} e^{-i(\omega_{k'} - \Omega)t} \int e^{i(\omega_k - \Omega)t_1} g_k^* \sigma_+ \otimes \delta(k - k') |vac\rangle\langle vac| dk dk' = \\ &= - \int dk e^{-i(\omega_k - \Omega)(t - t_1)} |g_k|^2 \sigma_+ \otimes |vac\rangle\langle vac| = \\ &= -G_I(t - t_1) \sigma_+ \otimes |vac\rangle\langle vac| \quad \square\end{aligned}$$

В прошлой лекции...

$$\begin{aligned} & (\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P} - \\ & - \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{P})\sigma_+ \otimes \rho_B = \\ & = -(\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_3} + \mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_2})\sigma_+ \otimes \rho_B = \\ & = -(G_I(t-t_2)G_I(t_1-t_3) + G_I(t-t_3)G_I(t_1-t_2))\sigma_+ \otimes \rho_B \end{aligned}$$

Ранее было

$$\frac{d}{dt}x(t) = -\lambda^2 \int_0^t ds G_I(t-s)x(s), \quad x(0) = 1$$

При $x(t) \neq 0$

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[\Delta\varepsilon(t)\sigma_+\sigma_-, \rho(t)] + \gamma(t) \left(\sigma_-\rho(t)\sigma_+ - \frac{1}{2}\sigma_+\sigma_-\rho(t) - \frac{1}{2}\rho(t)\sigma_+\sigma_- \right),$$

где

$$\gamma(t) = -2 \operatorname{Re} \frac{\frac{d}{dt}x(t)}{x(t)}, \quad \Delta\varepsilon(t) = -\operatorname{Im} \frac{\frac{d}{dt}x(t)}{x(t)}.$$

Пример

Откуда ясно, что

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_t(\rho \otimes \rho_B) = \\ = \left(-i[\Delta\epsilon(t)\sigma_+\sigma_-, \rho] + \gamma(t) \left(\sigma_-\rho\sigma_+ - \frac{1}{2}\{\sigma_+\sigma_-, \rho\} \right) \right) \otimes \rho_B\end{aligned}$$

Пример

Откуда ясно, что

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_t(\rho \otimes \rho_B) &= \\ &= \left(-i[\Delta\varepsilon(t)\sigma_+\sigma_-, \rho] + \gamma(t) \left(\sigma_-\rho\sigma_+ - \frac{1}{2}\{\sigma_+\sigma_-, \rho\} \right) \right) \otimes \rho_B \\ \mathcal{K}_t(\sigma_+ \otimes \rho_B) &= - \left(i\Delta\varepsilon(t) + \frac{\gamma(t)}{2} \right) (\sigma_+ \otimes \rho_B)\end{aligned}$$

Пример

Откуда ясно, что

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_t(\rho \otimes \rho_B) = \\ = \left(-i[\Delta\varepsilon(t)\sigma_+\sigma_-, \rho] + \gamma(t) \left(\sigma_-\rho\sigma_+ - \frac{1}{2}\{\sigma_+\sigma_-, \rho\} \right) \right) \otimes \rho_B\end{aligned}$$

$$\mathcal{K}_t(\sigma_+ \otimes \rho_B) = - \left(i\Delta\varepsilon(t) + \frac{\gamma(t)}{2} \right) (\sigma_+ \otimes \rho_B)$$

$$i\Delta\varepsilon^{(2)}(t) + \frac{\gamma^{(2)}(t)}{2} = \int_0^t dt_1 G_I(t-t_1)$$

$$\begin{aligned}i\Delta\varepsilon^{(4)}(t) + \frac{\gamma^{(4)}(t)}{2} = \\ = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 (G_I(t-t_2)G_I(t_1-t_3) + G_I(t-t_3)G_I(t_1-t_2))\end{aligned}$$

Пример

В условиях резонанса:

$$G_I(t) = g^2 e^{-\frac{\gamma}{2}t}$$

$$\gamma^{(2)}(t) = \gamma_M(1 - e^{-\frac{\gamma}{2}t}), \gamma_M = \frac{4g^2}{\gamma}, \quad \varepsilon^{(2)}(t) = 0$$

$$\gamma^{(4)}(t) = \frac{2\gamma_M^2}{\gamma} \left(\operatorname{sh} \frac{\gamma}{2}t - \frac{\gamma}{2}t \right) e^{-\frac{\gamma}{2}t}, \quad \varepsilon^{(4)}(t) = 0$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{K}_t(\rho \otimes \rho_B) = \\ & = \left(\lambda^2 \gamma^{(2)}(t) + \lambda^4 \gamma^{(4)}(t) + O(\lambda^6) \right) \left(\sigma_- \rho(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_+ \sigma_-, \rho(t) \} \right) \otimes \rho_B \end{aligned}$$

Пример

У нас сократились члены вида

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P} = \mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{P}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}$$

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_t\mathcal{L}_{t_1}\mathcal{L}_{t_2}\mathcal{L}_{t_3}\mathcal{P}\sigma_+ \otimes \rho_B = G_I(t-t_1)G_I(t_2-t_3)\sigma_+ \otimes \rho_B$$

В случае $G_I(t) = g^2 e^{-\frac{\gamma}{2}t}$

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 G_I(t-t_1)G_I(t_2-t_3) = \frac{4g^4}{\gamma^3}(-4+\gamma t+e^{-\frac{\gamma}{2}t}(4+\gamma t))$$

$\rightarrow +\infty$ при $t \rightarrow +\infty$.

Другие проекторы

Мы рассматривали проектор:

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

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.

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

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

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

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

В частности,

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

- 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 сохраняющее след отображение, само являющееся идемпотентом $\Lambda^2 = \Lambda$.

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

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

Коррелированный проектор

Утверждение. Такой проектор может быть представлен в виде

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

где

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

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

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

(условие вполне положительности).

Коррелированный проектор

Проверим, что он действительно является проектором

$$\begin{aligned}\mathcal{P}^2\rho &= \sum_n \text{Tr}_B(A_n \mathcal{P}\rho) \otimes B_n = \sum_{nm} \text{Tr}_B(A_n \text{Tr}_B(A_m \rho) \otimes B_m) \otimes B_n \\ &= \sum_{nm} \text{Tr}_B(A_n B_m) \text{Tr}_B(A_m \rho) \otimes B_n = \sum_{nm} \delta_{nm} \text{Tr}_B(A_m \rho) \otimes B_n \\ &= \sum_n \text{Tr}_B(A_n \rho) \otimes B_n = \mathcal{P}\rho\end{aligned}$$

(Для этого не требуется вполне положительность.)

Коррелированный проектор

Сопряжённый проектор:

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

Коррелированный проектор: Частные случаи

Стандартный проектор:

Единственный член в сумме

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

Проверим условия:

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

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

Коррелированный проектор: Частные случаи

Сепарабельный проектор:

Ортогональное разложение единицы в \mathcal{H}_B

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

$$A_n = \Pi_n, \quad B_n = \frac{\Pi_n \rho_B \Pi_n}{\text{Tr}_B \Pi_n \rho_B}$$

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

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

Коррелированный проектор: Динамика

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

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

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

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

Коррелированный проектор: Динамика

Локальный по времени генератор

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

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

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

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.

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

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.
- М. М. Wolf. Quantum Channels & Operations Guided Tour, 2010. Sec. 1.6

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

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

Условные математические ожидания

Утверждение.

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

Условные математические ожидания

Утверждение.

- 1 Произвольную унитарную $*$ -подалгебру \mathcal{B} унитарной $*$ -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 $V_k : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathcal{H}_{n_k} \otimes \mathcal{H}_{m_k}$, причём $V_k V_l^\dagger = \delta_{lk} I_{n_k} \otimes I_{m_k}$.

- 2 Соответствующие \mathcal{E} можно представить в виде

$$\mathcal{E}(A) = \sum_{k=1}^K V_k^\dagger \left(\text{Tr}_{m_k} V_k^\dagger A V_k (I_{n_k} \otimes \rho_{m_k}) \right) \otimes I_{m_k} V_k,$$

где ρ_{m_k} — матрицы плотности в \mathcal{H}_{m_k} .

Модель Калдейры-Легетта

Гильбертово пространство

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

Коммутационные соотношения

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

Гамильтониан

$$H = H_S + H_B + H_I$$

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

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

Модель Калдейры-Легетта

Утверждение. Пусть

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

— свободная эволюция B , а

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

— гейзенберговская эволюцию координаты x , тогда

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

где

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