Основы теории открытых квантовых систем II. Лекция 14. Кинетические уравнения в сильном поле и теория Флоке. Квантовое уравнение Больцмана

Теретёнков Александр Евгеньевич

5 мая 2025 г.

Было ранее...

Введём преобразование Фурье корреляционных функций резервуара

$$\gamma_{ij}(\omega, t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{i\omega s} \langle B_i(t) B_j(t-s) \rangle$$

и

$$\eta_{ij}(\omega, t) \equiv \text{p.v.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\gamma_{ij}(\omega', t)}{\omega' - \omega} \frac{d\omega'}{2\pi}.$$

Кроме того, разложим

$$S_j = \sum_{\omega \in \mathrm{spec}[H_S, \cdot\,]} \tilde{S}_{j,m}(\omega), \qquad [H_S, \tilde{S}_j(\omega)] = \omega \tilde{S}_j(\omega).$$

Было ранее...

Утверждение

При $\lambda \to 0$ *и* $t = O(\lambda^{-2})$,

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i[H_S + \lambda^2 H_{LS}(t), \rho_S(t)] + \lambda^2 \mathcal{D}_t(\rho_S(t)) + o(\lambda^2),$$

где

$$H_{LS}(t) = \sum_{ij} \sum_{\omega \in \mathrm{spec}[H_F, \cdot\,]} \eta_{ij}(\omega, t) \tilde{S}_i^\dagger(\omega) \tilde{S}_j(\omega)$$

— гамильтониан лэмбовского сдвига, а

$$\mathcal{D}_t(\rho_S) = \sum_{ij} \sum_{\omega \in \mathrm{spec}[H_S, \cdot\,]} \gamma_{ij}(\omega, t) \left(\tilde{S}_j(\omega) \rho_S \tilde{S}_i^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \tilde{S}_i^\dagger(\omega) \tilde{S}_j(\omega), \rho_S \right\} \right)$$

— дисспатор.

Было ранее...

- Чтобы зависимость от времени "выжила" необходимо вводить малый параметр в корреляционные функции вида $\gamma_{ij}(\omega, t) = \tilde{\gamma}_{ij}\left(\omega, \lambda^2 t\right)$, $\eta_{ij}(\omega, t) = \tilde{\eta}_{ij}\left(\omega, \lambda^2 t\right)$.
- Переопределение
$$H'_S(t) = H_S + \lambda \sum_j S_j \langle B_j(t) \rangle$$
можно сделать и в ситуации когда $\lambda\langle B_j(t)$ не мало (можно считать, что $\langle B_j(t) \rangle \sim \lambda^{-1}$), но $\lambda^2 \langle B'_i(t) B'_j(t-s) \rangle$ — мало. Это и приводит к зависящим от времени гамильтонианам общего вида.
- Важно для теории управления:
L. Accardi, S. V. Kozyrev, A. N. Pechen, Coherent quantum control of Λ-atoms through the stochastic limit, Quantum information and computing, QP–PQ: Quantum Probab. White Noise Anal., 19, World Scientific, Hackensack, NJ, 2006, 1–1

Зависящий от времени гамильтониан

Поэтому рассмотрим постановку:

$$H(t) = H_S(t) + H_B + \lambda H_I(t), \qquad H_I = \sum_j S_j(t) \otimes B_j$$

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H(t), \rho(t)], \qquad \rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B(0)$$

Причём гамильтониан периодичен с периодом T

$$H_S(t) = H_S(t+T)$$

Кроме того,

$$S_j(t) = S_j(t+T)$$

Зависящий от времени гамильтониан

Пусть

$$\frac{d}{dt}U_S(t,t_0) = -iH_S(t)U_S(t,t_0), \qquad U_S(t_0,t_0) = I$$

то есть

$$U_S(t,t_0) = \mathcal{T}\exp\left(-i\int_{t_0}^{t} H_S(s)ds\right)$$

Теорема (Флоке)

$$U_S(t,t_0) = e^{-iK(t)}e^{-iH_F(t-t_0)}e^{iK(t_0)},$$

где $K(t+T) = K(t)$ — ударный (kick) оператор, H_F — гамильтониан Флоке

Зависящий от времени гамильтониан

Можно выбрать и H_F и $K(t)$ их так, что $e^{iK(t_0)} = I$, тогда H_F может быть определён из уравнения

$$U_S(T + t_0, t_0) = e^{-iH_F T}$$

Собственные числа H_F называют квази-энергиями. Они определены с точностью до $\frac{2\pi}{T}$, однако их принято выбирать в "первой зоне Бриллюэна" так что $\operatorname{spec} H_F \in \left[-\frac{\pi}{T}, \frac{\pi}{T}\right)$.

Зависящий от времени гамильтониан

Разложим T-периодическую функцию в ряд Фурье

$$e^{iK(t)} S_j(t) e^{-iK(t)} = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \tilde{S}_{j,m} e^{i\nu m t}, \qquad \nu = \frac{2\pi}{T}$$

Кроме того, разложим

$$\tilde{S}_{j,m} = \sum_{\omega \in \mathrm{spec}[H_F, \,\cdot\,]} \tilde{S}_{j,m}(\omega), \qquad [H_F, \tilde{S}_{j,m}(\omega)] = \omega \tilde{S}_{j,m}(\omega)$$

Тогда

$$U_S^\dagger(t,0) S_j(t) U_S(t,0) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{\omega \in \mathrm{spec}[H_F, \,\cdot\,]} e^{i(\omega + \nu m)t} \tilde{S}_{j,m}(\omega).$$

Зависящий от времени гамильтониан

Разложим T-периодическую функцию в ряд Фурье

$$e^{iK(t)}S_j(t)e^{-iK(t)} = \sum_{m\in\mathbb{Z}} \tilde{S}_{j,m}e^{i\nu mt}, \qquad \nu = \frac{2\pi}{T}$$

Кроме того, разложим

$$\tilde{S}_{j,m} = \sum_{\omega\in\mathrm{spec}[H_F,\,\cdot\,]} \tilde{S}_{j,m}(\omega), \qquad [H_F, \tilde{S}_{j,m}(\omega)] = \omega\tilde{S}_{j,m}(\omega)$$

Тогда

$$U_S^\dagger(t,0)S_j(t)U_S(t,0) = \sum_{m\in\mathbb{Z}} \sum_{\omega\in\mathrm{spec}[H_F,\,\cdot\,]} e^{i(\omega+\nu m)t}\tilde{S}_{j,m}(\omega).$$

Чтобы перейти обратно в представление Шрёдингера определим

$$\tilde{S}_{j,m}(\omega;t) = e^{-iK(t)}\tilde{S}_{j,m}(\omega)e^{iK(t)}$$

Зависящий от времени гамильтониан

$$B_j(t) \equiv e^{iH_Bt} B_j e^{-iH_Bt}$$

Пусть

$$[H_B, \rho_B(0)] = 0$$

$$\langle B_j(t) \rangle = 0, \qquad \langle \cdot \rangle \equiv \mathrm{Tr}_B(\,\cdot\,\rho_B)$$

Введём преобразование Фурье корреляционных функций резервуара

$$\gamma_{ij}(\omega, t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{i\omega s} \langle B_i(t) B_j(t-s) \rangle$$

и разложим

$$\eta_{ij}(\omega, t) \equiv \mathrm{p.v.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\gamma_{ij}(\omega', t)}{\omega' - \omega} \frac{d\omega'}{2\pi}.$$

Зависящий от времени гамильтониан

Теорема

При $\lambda \to +0$ *и* $t = O(\lambda^{-2})$,

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i[H_S(t) + \lambda^2 H_{LS}(t), \rho_S(t)] + \lambda^2 \mathcal{D}_t(\rho_S(t)),$$

где

$$H_{LS}(t) = \sum_{ij} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{\omega \in \mathrm{spec}[H_F, \, \cdot \,]} \eta_{ij} \left(\omega + \nu m, t\right) \tilde{S}^{\dagger}_{i,m}(\omega; t) \tilde{S}_{j,m}(\omega; t)$$

$$\mathcal{D}_t(\rho_S) = \sum_{ij} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{\omega \in \mathrm{spec}[H_F, \, \cdot \,]} \gamma_{ij} \left(\omega + \nu m, t\right) \left(\tilde{S}_{j,m}(\omega; t) \rho_S \tilde{S}^{\dagger}_{i,m}(\omega; t) \right.$$
$$\left. - \frac{1}{2} \left\{ \tilde{S}^{\dagger}_{i,m}(\omega; t) \tilde{S}_{j,m}(\omega; t), \rho_S \right\} \right)$$

Случай двухуровневой системы

$$H(t) = \frac{1}{2}\omega_0\sigma_z + \frac{\Omega}{2}\left(\sigma_- e^{i\nu t} + \sigma_+ e^{-i\nu t}\right)$$

$$H_I = \sigma_x \otimes B$$

$$H_F = \frac{1}{2}\left(\omega_0 - \nu\right)\sigma_z + \frac{\Omega}{2}\sigma_x$$

$$\Delta = \omega_0 - \nu$$

Случай двухуровневой системы

$$\tilde{S}\left(\nu - \sqrt{\Delta^2+\Omega^2}; t\right) = \frac{1}{4\left(\Delta^2+\Omega^2\right)} \begin{pmatrix} \Omega\left(\sqrt{\Delta^2+\Omega^2}-\Delta\right) & -\Omega^2 e^{-i\nu t} \\ \left(\sqrt{\Delta^2+\Omega^2}-\Delta\right)^2 e^{i\nu t} & -\Omega\left(\sqrt{\Delta^2+\Omega^2}-\Delta\right) \end{pmatrix}$$

$$\tilde{S}\left(\nu + \sqrt{\Delta^2+4\Omega^2}; t\right) = \frac{1}{4\left(\Delta^2+\Omega^2\right)} \begin{pmatrix} -\Omega\left(\sqrt{\Delta^2+\Omega^2}+\Delta\right) & -\Omega^2 e^{-i\nu t} \\ \left(\sqrt{\Delta^2+\Omega^2}+\Delta\right)^2 e^{i\nu t} & \Omega\left(\sqrt{\Delta^2+\Omega^2}+\Delta\right) \end{pmatrix}$$

$$\tilde{S}\left(\nu; t\right) = \frac{\Omega}{2\left(\Delta^2+\Omega^2\right)} \begin{pmatrix} \Delta & \Omega e^{-i\nu t} \\ \Omega e^{i\nu t} & -\Delta \end{pmatrix}$$

- K. Szczygielski, D. Gelbwaser-Klimovsky, and R. Alicki. "Markovian master equation and thermodynamics of a two-level system in a strong laser field." Physical Review E 87.1 (2013): 012120.

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

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

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

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

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

Квантовое уравнение Больцмана

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

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

Квантовое уравнение Больцмана

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.

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

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

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

$\square$

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 $\mathcal{H}$

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

Утверждение. Уравнение Хартри также можно переписать как

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

где введён потенциал Хартри

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

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