Основы теории открытых квантовых систем. Лекция 3. Генератор ГКСЛ в случае общего положения. Декогерентность и лоренцевский спектр. Чистая дефазировка. Кинетическое уравнение Паули

Теретёнков Александр Евгеньевич

24 сентября 2025 г.

В прошлой лекции...

$$\rho(t) = e^{-iHt}\rho(0)e^{iHt} =$$

$$\begin{pmatrix} \rho_{11}(0) & \rho_{12}(0)e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t} & \cdots & \rho_{1n}(0)e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_n)t} \\ \rho_{21}(0)e^{-i(\varepsilon_2-\varepsilon_1)t} & \rho_{22}(0) & \cdots & \rho_{2n}(0)e^{-i(\varepsilon_2-\varepsilon_n)t} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{n1}(0)e^{-i(\varepsilon_n-\varepsilon_1)t} & \rho_{n2}(0)e^{-i(\varepsilon_n-\varepsilon_2)t} & \cdots & \rho_{nn}(0) \end{pmatrix}$$

$$\neq$$

$$\begin{pmatrix} \rho_{11}(0) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \rho_{22}(0) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \rho_{nn}(0) \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

В прошлой лекции...

В форме Линдблада:

$$\frac{d}{dt}\rho_t = -i[H, \rho_t] + \underbrace{\sum_j \left(C_j \rho_t C_j^\dagger - \frac{1}{2} C_j^\dagger C_j \rho_t - \frac{1}{2} \rho_t C_j^\dagger C_j \right)}_{= \mathcal{D}(\rho_t) \text{ — Диссипатор}}$$

На самом деле можно показать, что достаточно суммировать по j от 1 до $n^2 - 1$.

- Lindblad G. On the generators of quantum dynamical semigroups // Communications in Math. Phys. – 1976. – Vol. 48, no. 2. – P. 119-130.

В прошлой лекции...

В форме Коссаковского:

$$\frac{d}{dt}\rho_t = -i[H, \rho_t] + \sum_{i=1,k=1}^{n^2-1} a_{ik}\left([F_i, \rho_t F_k^\dagger] + [F_i\rho_t, F_k^\dagger]\right),$$

где матрица $a = a^\dagger \geqslant 0$.

- Gorini V., Kossakowski A., Sudarshan E. C. G. Completely positive dynamical semigroups of N-level systems // J. Math. Phys. — 1976. — Vol. 17, no. 5. — P. 821–825.

В прошлой лекции...

Первые уравнения такого вида есть уже в:

- Landau, L. Das Dämpfungsproblem in der Wellenmechanik. Z. Physik 45, 430–441 (1927)

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

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.

- L. Accardi and S. Kozyrev, Lectures on quantum interacting particle systems, in Quantum Interacting Particle Systems (Trento, 2000), 1195, QP-PQ: Quantum Probab. White Noise Anal., Vol. 14 (World Scientific, 2002).

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

$$\langle k|[H,\rho]|m\rangle = \sum_i \varepsilon_i \langle k|[|i\rangle\langle i|,\rho]|m\rangle =$$
$$= \sum_i \varepsilon_i(\delta_{ik}\rho_{im} - \delta_{im}\rho_{ki}) = (\varepsilon_k - \varepsilon_m)\rho_{km}$$

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|m\rangle = \sum_{ij}\gamma_{ij}\langle k|\left(|i\rangle\langle j|\rho|j\rangle\langle i| - \frac{1}{2}|j\rangle\langle j|\rho - \frac{1}{2}\rho|j\rangle\langle j|\right)|m\rangle =$$

$$= \sum_{ij}\gamma_{ij}\left(\delta_{ik}\rho_{jj}\delta_{im} - \frac{1}{2}\delta_{kj}\rho_{jm} - \frac{1}{2}\rho_{kj}\delta_{jm}\right)$$

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|m\rangle = \sum_{ij} \gamma_{ij} \langle k| \left(|i\rangle\langle j|\rho|j\rangle\langle i| - \frac{1}{2}|j\rangle\langle j|\rho - \frac{1}{2}\rho|j\rangle\langle j| \right) |m\rangle =$$

$$= \sum_{ij} \gamma_{ij} \left(\delta_{ik}\rho_{jj}\delta_{im} - \frac{1}{2}\delta_{kj}\rho_{jm} - \frac{1}{2}\rho_{kj}\delta_{jm} \right)$$

$k \neq m$

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|m\rangle = -\frac{1}{2} \sum_i \left(\gamma_{ik} + \gamma_{im} \right) \rho_{km}$$

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|m\rangle = \sum_{ij} \gamma_{ij} \langle k| \left(|i\rangle\langle j|\rho|j\rangle\langle i| - \frac{1}{2}|j\rangle\langle j|\rho - \frac{1}{2}\rho|j\rangle\langle j| \right) |m\rangle =$$

$$= \sum_{ij} \gamma_{ij} \left(\delta_{ik}\rho_{jj}\delta_{im} - \frac{1}{2}\delta_{kj}\rho_{jm} - \frac{1}{2}\rho_{kj}\delta_{jm} \right)$$

$k \neq m$

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|m\rangle = -\frac{1}{2} \sum_{i} (\gamma_{ik} + \gamma_{im})\, \rho_{km}$$

$k = m$

$$\langle k|\mathcal{D}(\rho)|k\rangle = \sum_{j} \gamma_{kj}\rho_{jj} - \left(\sum_{i} \gamma_{ik} \right) \rho_{kk}$$

Помогает ли нам уравнение ГКСЛ описать декогерентность и перенос?

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.

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, $\omega_{km} = \varepsilon_m - \varepsilon_k$, $\frac{1}{2}\sum_i (\gamma_{ik} + \gamma_{im}) = \Gamma_{km}$. 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-уровненвая 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 $C_{ii} = \sqrt{\gamma_{ii}}|i\rangle\langle i|$ 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).