Métodos Matemáticos Daniel Castillo Castro

Generación de ecuaciones maestras

Índice

1. Derivación formal: semigrupos

Comenzando con la evolución temporal de $\rho_A(t)$, parte A de una matriz compuesta ρ_{AB}

$$\rho_A(t) = tr_B U(t,t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t,t_0) \tag{1}$$

y la ecuación de Von Neumann (si, es con 2 n)

$$\dot{\rho_A}(t) = -iTr_B[H(t),\rho(t)] \tag{2}$$

Se puede definir un **mapa dinámico** como una función que va del espacio de Hilbert de A hasta sí mismo y consiste en **superoperadores** que representan la evolución temporal para la matriz densidad para ρ_B y tiempo fijos.

$$V(t):\mathbb{H}_A \to \mathbb{H}_A \Rightarrow \rho_A(t) = V(t)\rho_A(0) = U(t,0)[\rho_A(0)\otimes\rho_B(0)]U^\dagger(t,0) \tag{3}$$

Si se escribe ρ_A en su base espectral, y se escribe las componentes matriciales del operador unitario $U(t,0)$ presente en **??** en la misma base:

$$\rho_A = \sum_\alpha \lambda_\alpha \left|\varphi_\alpha\right\rangle \left\langle\varphi_\alpha\right|, W_{\alpha\beta} = \sqrt{\lambda_\alpha\lambda_\beta}\left\langle\varphi_\alpha\right| U(t,0)\left|\varphi_\beta\right\rangle \tag{4}$$

Se puede reescribir la evolución temporal $V(t)$ como una medición generalizada (POVM)

$$V(t)\rho_A = \sum_{\alpha\beta} W_{\alpha\beta}(t)\rho_A W^\dagger_{\alpha\beta}(t) \tag{5}$$

Dicha evolución temporal cumple como propiedades

$$\sum_{\alpha\beta} W^\dagger_{\alpha\beta}(t)W_{\alpha\beta}(t) = \mathbb{I}_A \Rightarrow tr_A(V(t)\rho_A) = tr_A(\rho_A) = 1 \tag{6}$$

De acá se deduce que la operación evolución temporal cuántica es convexa, positiva y preservadora de traza, por lo que mantiene el sentido físico de las matrices densidad, que son las probabilidades. Estos operadores de evolución son los que forman un semigrupo que cumple con la siguiente propiedad fundamental.

$$V(t_1)V(t_2) = V(t_1+t_2) \tag{7}$$

La propiedad en **??** está vinculada con la Markovialidad. Se define entonces un **generador de semigrupo**, que consiste en un mapa lineal.

$$\mathcal{L} : V(t) = e^{\mathcal{L}t} \Rightarrow \dot{\rho_A}(t) = \dot{V}(t)\rho_A = \mathcal{L}\rho_A(t) \tag{8}$$

Se pretenderá entonces, construir el $\mathcal{L}$ más general en el espacio $\mathbb{H}_A \otimes \mathbb{H}_A$ definiendo operadores F_i desde 0 hasta N^2 definiendo un producto escalar para operadores

$$X \cdot Y = Tr_A(X^\dagger Y) \tag{9}$$

Se puede escribir el operador de medida generalizada, y por lo tanto el operador de evolución temporal como combinación lineal de los elementos de la base (considerando el producto escalar anterior:

$$W_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{N^2} F_i(F_i \cdot W_{\alpha\beta}(t)) \Rightarrow V(t)\rho_A = \sum_{\alpha\beta} \sum_{i,j=1}^{N^2} F_i(F_i \cdot W_{\alpha\beta}(t))\rho_A F_j^\dagger (F_j \cdot W_{\alpha\beta}(t))^* \tag{10}$$

Llamando c_{ij} a los resultados de los productos escalares la expansión de **??** se simplifica

$$c_{ij} = (F_i \cdot W_{\alpha\beta}(t))(F_j W_{\alpha\beta}(t))^* \Rightarrow V(t)\rho_A = \sum_{i,j}^{N^2} c_{ij}(t) F_i \rho_A F_j^\dagger \tag{11}$$

Por la forma dada en la definición en **??**, los c_{ij}, forman una matriz hermítica y positiva. Sin perder generalidad se define que el último operador de la lista sera proporcional a la identidad, así como que los operadores traza tendrán traza 0

$$\forall i : [0, n^2 - 1] Tr_A F_i = 0, F_{N^2} = \frac{\mathbb{I}_A}{\sqrt{N}} \tag{12}$$

Dicho esto se procede a evaluar la derivada de la evolución temporal, considerando **??**, la definición formal de derivada (con un tiempo ϵ) y las definiciones dadas en **??**

$$\mathcal{L}\rho_A = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{V(\epsilon)\rho_A - \rho_A}{\epsilon} \tag{13}$$

Se descompone $V(\epsilon)$ en los operadores base usando las condiciones señaladas

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon} \left(\sum_{i,j}^{N^2-1} C_{ij}(\epsilon) F_i \rho_A F_j^\dagger + \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^{N^2-1} (C_{iN^2}(\epsilon) F_i \rho_A + C_{N^2 i}(\epsilon) \rho_A F_i^\dagger) + \left(\frac{C_{N^2 N^2}(\epsilon) - N}{N} \right) \rho_A \right) \tag{14}$$

Como se puede notar de descompuso en los productos que no incluyen a F_N^2, los que lo incluyen una vez y el que lo incluye 2 veces. Definiendo las siguientes constantes

$$a_{N^2N^2} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{C_{N^2N^2}(\epsilon) - N}{\epsilon}, a_{iN^2} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{C_{iN^2}(\epsilon)}{\epsilon} \tag{15}$$

$$a_{ij} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{C_{ij}(\epsilon)}{\epsilon}, a_{N^2i} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{C_{N^2i}(\epsilon)}{\epsilon} \tag{16}$$

La ecuación de **??** se simplifica

$$\mathcal{L}\rho_A = \sum_{i,j}^{N^2-1} a_{ij} F_i \rho_A F_j^\dagger + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N^2-1} (a_{iN^2} F_i \rho_A + a_{N^2i} \rho_A F_i^\dagger) + \frac{a_{N^2N^2}}{N} \rho_A \tag{17}$$

Definiendo ahora los siguientes operadores

$$F = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N^2-1} a_{iN^2} F_i, G = \frac{a_{N^2N^2}}{2N} \mathbb{I}_A + \frac{1}{2}(F^\dagger + F) \tag{18}$$

Se puede también escribir el Hamiltoniano en función de estos operadores

$$H = \frac{1}{2i}(F^\dagger - F) \tag{19}$$

Y la expresión de **??** se simplifica más

$$= \sum_{i,j}^{N^2-1} a_{ij} F_i \rho_A F_j^\dagger + (F\rho_A + \rho_A F^\dagger) + (G - \frac{F^\dagger + F}{2})\rho_A + \rho_A(G - \frac{F^\dagger + F}{2}) \tag{20}$$

Usando la notación de anticonmutador $\{A, B\} = AB + BA$ y separando los elementos de F y G en los útimos sumandos se obtiene:

$$= \sum_{i,j}^{N^2-1} a_{ij} F_i \rho_A F_j^\dagger + \{G, \rho_A\} + (F - \frac{F}{2} - \frac{F^\dagger}{2})\rho_A + \rho_A(F^\dagger - \frac{F^\dagger}{2} - \frac{F}{2}) \tag{21}$$

De los últimos 2 sumandos de **??** se reemplaza:

$$(\frac{F - F^\dagger}{2})\rho_A + \rho_A(\frac{F^\dagger - F}{2}) = -iH\rho_A + i\rho_A H \tag{22}$$

Además considerando que el semigrupo preserva la traza

$$0 = Tr_A \dot{\rho_A} = Tr_A \mathcal{L}\rho_A = Tr_A((2G + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_j^\dagger F_i)\rho_A) \tag{23}$$

Lo último debido a que la traza es cíclica. De **??** se obtiene que

$$-2G = \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_j^\dagger F_i \Rightarrow G = \frac{-1}{2} \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_j^\dagger F_i \tag{24}$$

E insertando **??** y **??** en **??** se obtiene

$$\mathcal{L}\rho_A = -i[H, \rho_A] + \sum_{i,j}^{N^2-1} a_{ij}(F_i \rho_A F_j^\dagger + \left\{ \frac{-1}{2} F_j^\dagger F_i, \rho_A \right\}) \tag{25}$$

Al ser los elementos a_{ij} positivos, la matriz A que los contiene puede diagonalizarse. Si se escribe la propiedad anterior como

$$UAU^\dagger = diag(\gamma_1 ... \gamma_{N^2-1}) \tag{26}$$

Se pueden escribir los operadores del espacio $\mathbb{H}_A \otimes \mathbb{H}_A$ definidos para **??** en términos de esta diagonalización

$$F_i = \sum_{k=1}^{N^2-1} u_{ki} A_k \tag{27}$$

Despreciando el término hamiltoniano de la ecuación **??** e insertándolo en **??** se obtiene:

$$\mathcal{L}\rho_A = \sum_{i,j,k}^{N^2-1} (a_{ij}((u_{ki} A_k) \rho_A (u_{kj}^* A_k^\dagger)) + \left\{ \frac{-1}{2} (u_{kj}^* A_k^\dagger)(u_{ki} A_k), \rho_A \right\}) \tag{28}$$

Y finalmente, usando que $u_{ki} a_{ij} u_{jk}^* = \gamma_k$ se puede reescribir **??** como

$$\mathcal{L}\rho_A = \sum_{k}^{N^2-1} \gamma_k (A_k \rho_A A_k^\dagger) + \left\{ \frac{-1}{2} (A_k^\dagger A_k), \rho_A \right\}) \tag{29}$$

2. Derivación para sistema de 2 niveles acoplado a baño de osciladores

Definido el Hamiltoniano de Jaynes-Cumming que **no depende del tiempo**:

$$H = \hbar\omega a^\dagger a + \sum_j \hbar\omega_j b_j^\dagger b_j + \sum_j \hbar g_j (a^\dagger b_j + b_j^\dagger a \tag{30}$$

Donde vale la aproximación de **onda rotante**. Se puede pasar rápidamente al marco de interacción.

$$H_I = \sum_j \hbar g_j (a^\dagger b_j + b_j^\dagger a) \tag{31}$$

Y partiendo de la ecuación diferencial de Liouville(Von Neumann) válida cuando el hamiltoniano no depende del tiempo, considerando operadores en el marco de interacción:

$$\dot{\rho_{\bar{A}B}} = \frac{-i}{\hbar}[\bar{H}_I(t), \rho_{\bar{A}B}(t)] \tag{32}$$

La ecuación se itera 2 veces para hallar la solución (lo que por lo general **basta como aproximación**)

$$\begin{aligned}\bar{\rho}_{AB}(t) \simeq \rho_{\bar{A}B}(0) - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1[\bar{H}_I(t_1), \bar{\rho}_{AB}(t_1)] - \\ \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t\int_0^{t_1} dt_1 dt_2[\bar{H}_I(t_1), [\bar{H}_I(t_2), \bar{\rho}_{AB}(t_2)]]\end{aligned} \tag{33}$$

Asumiendo que $\bar{\rho}_{AB}(0) = 0$ y que

$$Tr_B[\bar{H}_i, \rho_B(0)] = 0 \tag{34}$$

(Lo que equivale a decir físicamente de acuerdo a Orszag, que **el reservorio es un estado termal**), los 2 primeros sumandos de **??** se anulan, se deriva 1 vez y la ecuación maestra finalmente queda

$$\dot{\bar{\rho}}_A(t) = \frac{-1}{\hbar^2}\int_0^t dt_1 tr_B[\bar{H}_i(t), [\bar{H}_i(t_1), \bar{\rho}_{AB}(t_1)]] \tag{35}$$

Asumiendo que la matriz densidad en t_1 es un estado producto, se procede a descomponer el integrando

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar^2}[\bar{H}_I(t), [\bar{H}_1(t_1), \bar{\rho}_A(t_1)\otimes\bar{\rho}_B(t_1)]] = \frac{1}{\hbar^2}(\bar{H}_I(t)\bar{H}_1(t_1)(\bar{\rho}_A(t_1)\otimes\bar{\rho}_B(t_1)) - \\ \bar{H}_I(t)(\bar{\rho}_A(t_1)\otimes\bar{\rho}_B(t_1))\bar{H}_I(t_1) - \bar{H}_I(t_1)(\bar{\rho}_A(t_1)\otimes\bar{\rho}_B(t_1))\bar{H}_I(t) + \\ (\bar{\rho}_A(t_1)\otimes\bar{\rho}_B(t_1))\bar{H}_I(t_1)\bar{H}_I(t))\end{aligned} \tag{36}$$

y usando el hamiltoniano de interacción en **??**, **??** se vuelve:

$$\begin{aligned}= (G(t)a^\dagger + G^\dagger(t)a)(G(t_1)a^\dagger + G^\dagger(t_1)a)(\bar{\rho}_A(t_1)\otimes\bar{\rho}_B(t_1)) - \\ (G(t)a^\dagger + G^\dagger(t)a)(\bar{\rho}_A(t_1)\otimes\bar{\rho}_B(t_1))(G(t_1)a^\dagger + G^\dagger(t_1)a) - \\ (G(t_1)a^\dagger + G^\dagger(t_1)a)(\bar{\rho}_A(t_1)\otimes\bar{\rho}_B(t_1))(G(t)a^\dagger + G^\dagger(t)a) + \\ (\bar{\rho}_A(t_1)\otimes\bar{\rho}_B(t_1))(G(t_1)a^\dagger + G^\dagger(t_1)a)(G(t)a^\dagger + G^\dagger(t)a)\end{aligned} \tag{37}$$

Otra aproximación que se realiza es el **acoplamiento débil**, qué básicamente se vale de la desigualdad temporal de Heisenberg

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \tag{38}$$

Para decir que el tiempo de correlación del baño es menos cuando los anchos de energía son mayores y que se puede asumir que el tiempo propio del baño será mucho menor al tiempo del sistema original **en el cuadro de interacción**

$$\tau_B \leq \frac{\hbar}{E_B}, T_A \propto \frac{1}{H_I^A} \Rightarrow \tau_B << T_A \tag{39}$$

El primer sumando en **??** equivale a

$$\begin{aligned} G(t)a^\dagger G(t_1)a^\dagger(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1)) + G(t)a^\dagger G^\dagger(t_1)a(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1)) + \\ G^\dagger(t)aG(t_1)a^\dagger(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1)) + G^\dagger(t)aG^\dagger(t_1)a(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1)) \end{aligned} \tag{40}$$

El segundo sumando en **??** (sin contar el signo menos) equivale a

$$\begin{aligned} G(t)a^\dagger(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G(t_1)a^\dagger + G(t)a^\dagger(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G^\dagger(t_1)a + \\ G^\dagger(t)a(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G(t_1)a^\dagger + G^\dagger(t)a(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G^\dagger(t_1)a \end{aligned} \tag{41}$$

El tercer sumando en **??** (sin contar el signo menos) equivale a

$$\begin{aligned} G(t_1)a^\dagger(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G(t)a^\dagger + G(t_1)a^\dagger(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G^\dagger(t)a + \\ G^\dagger(t_1)a(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G(t)a^\dagger + G^\dagger(t_1)a(\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G^\dagger(t)a \end{aligned} \tag{42}$$

El cuarto sumando en **??** equivale a

$$\begin{aligned} (\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G(t_1)a^\dagger G(t)a^\dagger + (\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G(t_1)a^\dagger G^\dagger(t)a + \\ (\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G^\dagger(t_1)aG(t)a^\dagger + (\bar{\rho}_A(t_1) \otimes \bar{\rho}_B(t_1))G^\dagger(t_1)aG^\dagger(t)a \end{aligned} \tag{43}$$

Para poder quitar los operadores del campo de un modo de la integral se hace una aproximación bastante fuerte: **que ρ_A en t_1 en realidad depende del tiempo t, lo que significa que el sistema es local en el tiempo.** Con esto, la traza en B de cualquiere de estos elementos solo depende de ρ_B y de los operadores G, e incluso $\rho_A(t)$ se puede pasar para afuera de la integral, quedando **??** como:

$$\begin{aligned} \dot{\bar{\rho}}_A = -(a^\dagger a^\dagger \bar{\rho_A}(t)I_1 + a^\dagger a\rho_A(t)I_2 + aa^\dagger\rho_A(t)I_3 + aa\rho_A(t)I_4) \\ +(a^\dagger\bar{\rho_A}(t)a^\dagger(I_5 + I_9) + a^\dagger\bar{\rho_A}(t)a(I_6 + I_{10}) + a\bar{\rho_A}(t)a^\dagger(I_7 + I_{11}) + a\bar{\rho_A}(t)a(I_8 + I_{12}) \\ -(\bar{\rho_A}(t)a^\dagger a^\dagger I_{13} + \bar{\rho_A}(t)a^\dagger aI_{14} + \bar{\rho_A}(t)aa^\dagger I_{15} + \bar{\rho_A}(t)aaI_{15}) \end{aligned} \tag{44}$$

Entiéndanse los I_i como las integrales de los elementos dependientes de B, estando I_1 a I_4 generados a partir de **??**, I_5 a I_8 a partir de **??**, I_9 a I_{12} a partir de **??** y I_{13}a I_{16} de **??**. Usando la propiedad de que la traza de una matriz es cíclica,

$$Tr_B(G(t)G(t_1)\bar{\rho}_B(t_1)) = Tr_B(G(t_1)\bar{\rho}_B(t_1)G(t)) \Rightarrow I_1 = I_9 \tag{45}$$

$$Tr_B(G(t)G^\dagger(t_1)\bar{\rho}_B(t_1)) = Tr_B(G^\dagger(t_1)\bar{\rho}_B(t_1)G(t)) \Rightarrow I_2 = I_{11} \tag{46}$$

$$Tr_B(G^\dagger(t)G(t_1)\bar{\rho}_B(t_1)) = Tr_B(G(t_1)\bar{\rho}_B(t_1)G^\dagger(t)) \Rightarrow I_3 = I_{10} \tag{47}$$

$$Tr_B(G^\dagger(t)G^\dagger(t_1)\bar{\rho}_B(t_1)) = Tr_B(G^\dagger(t_1)\bar{\rho}_B(t_1)G^\dagger(t)) \Rightarrow I_4 = I_{12} \tag{48}$$

$$Tr_B(G(t)\hat{\rho}_B(t_1)G(t_1)) = Tr_B(\hat{\rho}_B(t_1)G(t_1)G(t)) \Rightarrow I_5 = I_{13} \tag{49}$$

$$Tr_B(G(t)\hat{\rho}_B(t_1)G^\dagger(t_1)) = Tr_B(\hat{\rho}_B(t_1)G^\dagger(t_1)G(t)) \Rightarrow I_6 = I_{15} \tag{50}$$

$$Tr_B(G^\dagger(t)\hat{\rho}_B(t_1)G(t_1)) = Tr_B(\hat{\rho}_B(t_1)G(t_1)G^\dagger(t)) \Rightarrow I_7 = I_{14} \tag{51}$$

$$Tr_B(G^\dagger(t)\hat{\rho}_B(t_1)G^\dagger(t_1)) = Tr_B(\hat{\rho}_B(t_1)G^\dagger(t_1)G^\dagger(t)) \Rightarrow I_8 = I_{16} \tag{52}$$

Lo anterior reduce las integrales a resolver a solo 8. Pero ahora, si se considera que las funciones de correlación, más que de t_1 o t, dependen de la diferencia entre ellos, se puede aseverar que:

$$Tr_B(G(t)G(t_1)\hat{\rho}_B(t_1)) = Tr_B(G(t_1)G(t)\hat{\rho}_B(t_1)) \Rightarrow I_1 = I_9 = I_5 = I_{13} \tag{53}$$

$$Tr_B(G(t)G^\dagger(t_1)\hat{\rho}_B(t_1)) = Tr_B(G(t_1)G^\dagger(t)\hat{\rho}_B(t_1)) \Rightarrow I_2 = I_{11} = I_7 = I_{14} \tag{54}$$

$$Tr_B(G^\dagger(t)G(t_1)\hat{\rho}_B(t_1)) = Tr_B(G^\dagger(t_1)G(t)\hat{\rho}_B(t_1)) \Rightarrow I_3 = I_{10} = I_6 = I_{15} \tag{55}$$

$$Tr_B(G^\dagger(t)G^\dagger(t_1)\hat{\rho}_B(t_1)) = Tr_B(G^\dagger(t_1)G^\dagger(t)\hat{\rho}_B(t_1)) \Rightarrow I_4 = I_{12} = I_8 = I_{16} \tag{56}$$

Lo que reduce la obtención de la ecuación maestra a obtener 4 integrales, que se llamarán A, B, C y D para las resultantes de **??**,**??**, **??** y **??** respectivamente. Con esto, **??** se reduce a

$$\begin{aligned}\dot{\bar{\rho}}_A = & A(2a^\dagger\bar{\rho}_A(t)a^\dagger - a^\dagger a^\dagger\bar{\rho_A}(t) - \bar{\rho_A}(t)a^\dagger a^\dagger) \\ & +B(2a\bar{\rho}_A(t)a^\dagger - a^\dagger a\bar{\rho_A}(t) - \bar{\rho_A}(t)a^\dagger a) \\ & +C(2a^\dagger\bar{\rho}_A(t)a - aa^\dagger\bar{\rho_A}(t) - \bar{\rho_A}(t)aa^\dagger) \\ & +D(2a\bar{\rho}_A(t)a - aa\bar{\rho_A}(t) - \bar{\rho_A}(t)aa)\end{aligned} \tag{57}$$

Lo conveniente es que las 4 integrales se resuelven de manera similar.

$$A = \tag{58}$$

$$B = \tag{59}$$

$$C = \tag{60}$$

$$D = \tag{61}$$

3. Derivación para sistema comprimido de muchos modos