中山大學
SUN YAT-SEN UNIVERSITY

量子系统中的耗散

中山大学物理学院

报告人：路尚润 **合作者：**简彬洋

目录

CONTENTS

Part.01

主方程

· Lindblad主方程

假定量子系统(子系统)和外界环境的联合哈密顿量形式为

$$\hat{H}_{\text{all}} = \hat{H}_S \otimes \hat{I}_B + \hat{I}_S \otimes \hat{H}_B + \lambda \hat{H}_{SB},$$

其中，$\hat{H}_S$和$\hat{H}_B$分别表示量子系统和环境的自由哈密顿量，$\hat{H}_{SB}$表示两系统之间的耦合，λ是耦合系数，一般认为λ相对系统的能量尺度来说是一个小量。

在薛定谔绘景下，系统的动力学演化由刘维尔方程给出

$$\frac{\mathrm{d}\rho(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{H}_{\text{all}}, \rho(t)\right],$$

能够描述二者整体的密度算符随时间的演化。

对于子系统的密度算符，演化满足Lindblad主方程[1][2][3]

$$\frac{\mathrm{d}\rho_s(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{H}, \rho_s(t)\right] + \sum_k \gamma_k \left[\hat{L}_k \rho_s \hat{L}_k^\dagger - \frac{1}{2}\left\{\hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k, \rho_s(t)\right\}\right],$$

其中$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_{LS}$为子系统的哈密顿量加由环境诱导的哈密顿量修正项，对应QED中的兰姆位移项，$\gamma_k \geq 0$为耗散率，L_k为Lindblad算符，是系统与环境耦合导致系统状态发生改变的算符。

[1] AIP Advances, 2020, 10 (2): 025106.
[2] Oxford: Oxford University Press, 2002. [3] 郭光灿,周祥发 著. 量子光学[M].

· 量子跳跃(轨迹)理论

考虑量子光学中的腔场耗散[4]，对单模腔中的光子，可以被腔壁吸收，假设腔壁处于绝对零度T=0。

①假设发生跳跃前的腔场处于$|\psi\rangle$，在δt时间间隔内一个光子被吸收的概率δP应当正比于时间间隔以及在$|\psi\rangle$中的平均光子数$\langle\psi|a^\dagger a|\psi\rangle$，即

$$\delta P = \gamma\langle\psi|a^\dagger a|\psi\rangle\delta t,$$

其中γ为光子损耗速率。

②光子跳跃后的归一化量子态为

$$|\psi\rangle \to |\psi_{jump}\rangle = \frac{a|\psi\rangle}{[\langle\psi|a^\dagger a|\psi\rangle]^{1/2}} = \sqrt{\frac{\gamma\delta t}{\delta P}}\,a|\psi\rangle.$$

③在δt时间内一个光子不被吸收的概率为$(1-\delta P)$，假设腔场非幺正演化的有效哈密顿量为$H_{\mathrm{eff}} = H - \mathrm{i}\frac{\gamma}{2}a^\dagger a$(假设$\hbar = 1$)，第二项表示腔场能量耗散。当光子不被吸收时，腔场演化到归一化量子态

$$|\psi\rangle \to |\psi_{no-jump}\rangle = \frac{e^{-\mathrm{i}H_{\mathrm{eff}}\delta t}|\psi\rangle}{\left[\left\langle\psi\left|e^{\mathrm{i}H_{\mathrm{eff}}^\dagger\delta t}e^{-\mathrm{i}H_{\mathrm{eff}}\delta t}\right|\psi\right\rangle\right]^{1/2}} \approx \frac{[1-\mathrm{i}H\delta t - a^\dagger a(\gamma/2)\delta t]|\psi\rangle}{(1-\delta P)^{1/2}}.$$

[4] 张智明. 量子光学[M].

· 量子跳跃(轨迹)理论

④则密度矩阵的演化为

$$|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \to |\psi(t+\delta t)\rangle\langle\psi(t+\delta t)| = \delta P\left|\psi_{jump}\right\rangle\left\langle\psi_{jump}\right| + (1-\delta P)\left|\psi_{no-jump}\right\rangle\left\langle\psi_{no-jump}\right|$$
$$\approx |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| - \mathrm{i}\delta t[H, |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|] + \frac{\gamma}{2}\delta t\{2a|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|a^\dagger - a^\dagger a|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| - |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|a^\dagger a\}.$$

⑤利用密度算符，有

$$\rho(t+\delta t) = \rho(t) - \mathrm{i}\delta t[H, \rho(t)] + \frac{\gamma}{2}\delta t\left\{2a\rho(t)a^\dagger - a^\dagger a\rho(t) - \rho(t)a^\dagger a\right\},$$

当$\delta t \to 0$时

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}[H, \rho] + \frac{\gamma}{2}\left\{2a\rho(t)a^\dagger - a^\dagger a\rho(t) - \rho(t)a^\dagger a\right\},$$

即为量子力学主方程，可以给出有损耗时绝对零度情况下单模腔场中光场随时间的演化。
上式可以表示为

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}\left(H_{\mathrm{eff}}\rho - \rho H_{\mathrm{eff}}^\dagger\right) + \gamma a\rho(t)a^\dagger,$$

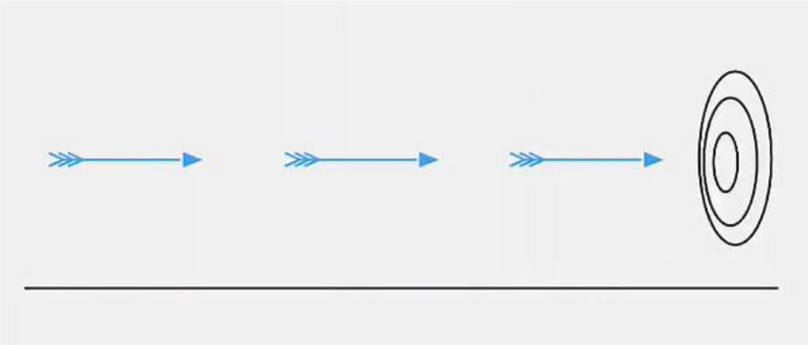
其中$H_{\mathrm{eff}} = H - \mathrm{i}\frac{\gamma}{2}a^\dagger a$，分为非厄米有效哈密顿量的演化以及与环境耦合带来的量子跳跃。

[4] 张智明. 量子光学[M].

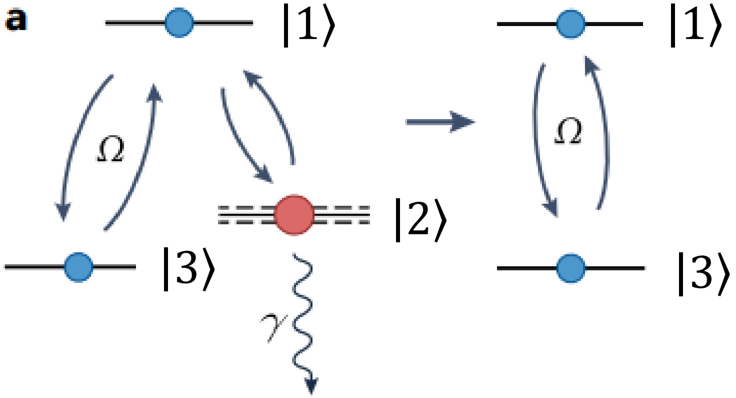
Part.02

芝诺效应

· 量子芝诺效应



飞矢不动：在任意时刻看飞行中的箭其状态是不变的



芝诺效应构造二能级子空间[5]

考虑二能级系统 $|1\rangle$、 $|2\rangle$ 与经典电磁场的共振相互作用，在旋转坐标系下

$$H = H_0 + H_I = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z + \frac{1}{2}\hbar\Omega_R\sigma_x$$

利用相互作用绘景，其时间演化算符

$$U(t) = e^{iH_I t/\hbar} = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) & \mathrm{i}\sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \\ -\mathrm{i}\sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) & \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \end{bmatrix}$$

若初始状态处于$|1\rangle$态，则

$$|\psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right)|1\rangle - \mathrm{i}\sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right)|2\rangle$$

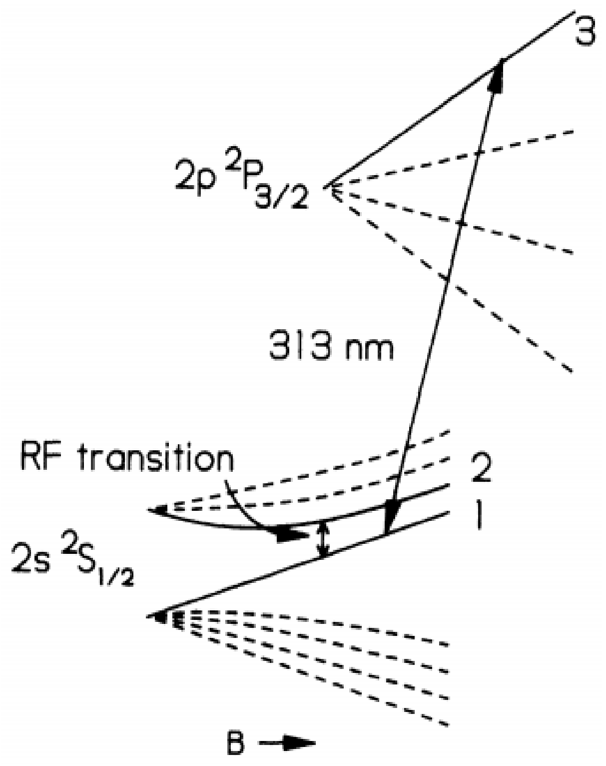
在t时刻对系统进行测量，则

$$P_1(t) = \cos^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right)$$

$$P_2(t) = \sin^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right)$$

[5] Nature Reviews Physics, 2022, 4(10): 660-671.

· 量子芝诺效应



在磁场中的$^9Be^+$离子[6]

再对该系统进行测量，增加一个以ω_{13}频率的驱动脉冲

$$H_I' = \hbar g(a\sigma_{13}^+ + a^\dagger\sigma_{13}^-)$$

此时系统发生投影测量，检测有无光子出射：

①当系统坍缩至$|1\rangle$上时，会发生$|1\rangle\leftrightarrow|3\rangle$的拉比振荡，并发射出一系列光子，测量结束后会在一个振荡周期后返回$|1\rangle$。

②当系统坍缩至$|2\rangle$上时，则无光子产生，测量持续过程中一直处在$|2\rangle$。

考虑初态处于$|1\rangle$，测量间隔足够短$\Omega_R t \ll 1$

$$P_1(t) \to 1, P_2(t) \to 0$$

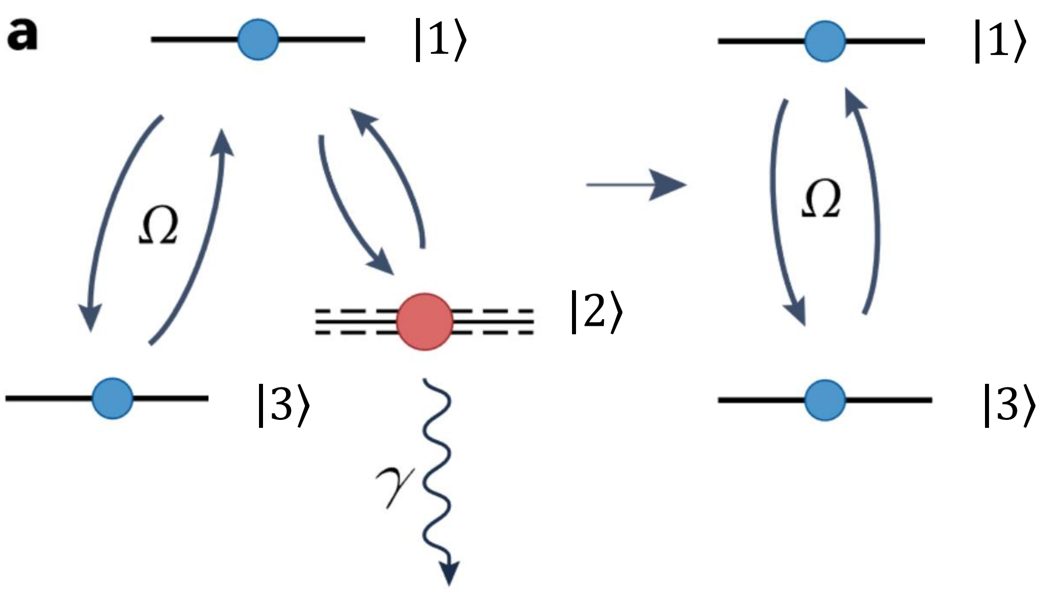
在总时间为t均匀进行n次投影测量后，系统初始状态的维持概率为

$$P(t) = \cos^{2n}\left(\frac{\Omega_R t}{2n}\right)$$

当$n \to \infty$时， $P(t) \to 1$。

[6] Phys. Rev. A 41,2295–2300 (1990).

· 量子芝诺效应



芝诺效应构造二能级子空间[5]

而耗散与连续测量一样实际上也可以实现芝诺效应，引入一个从$|2\rangle$到$|1\rangle$的非相干衰减，对应于耗散速率Γ的光子的自发辐射，其Lindblad算符(跳跃算符)描述

$$L = \sqrt{\Gamma}|1\rangle\langle 2|$$

① $\Gamma \ll \Omega$时

耗散几乎可以忽略，系统处于迅速的Rabi振荡。

② $\Omega \ll \Gamma$时

耗散起着重要的作用，其非厄米有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = H - i\Gamma|2\rangle\langle 2|$$

能量偏离实轴产生失谐，$|1\rangle$与$|2\rangle$的耦合将会是非共振的，系统将冻结在$|1\rangle$态。

从量子跳跃的物理图像可以很好理解这个行为，当系统存在$|2\rangle$态时，其会发生量子跳跃，迅速跳至$|1\rangle$。

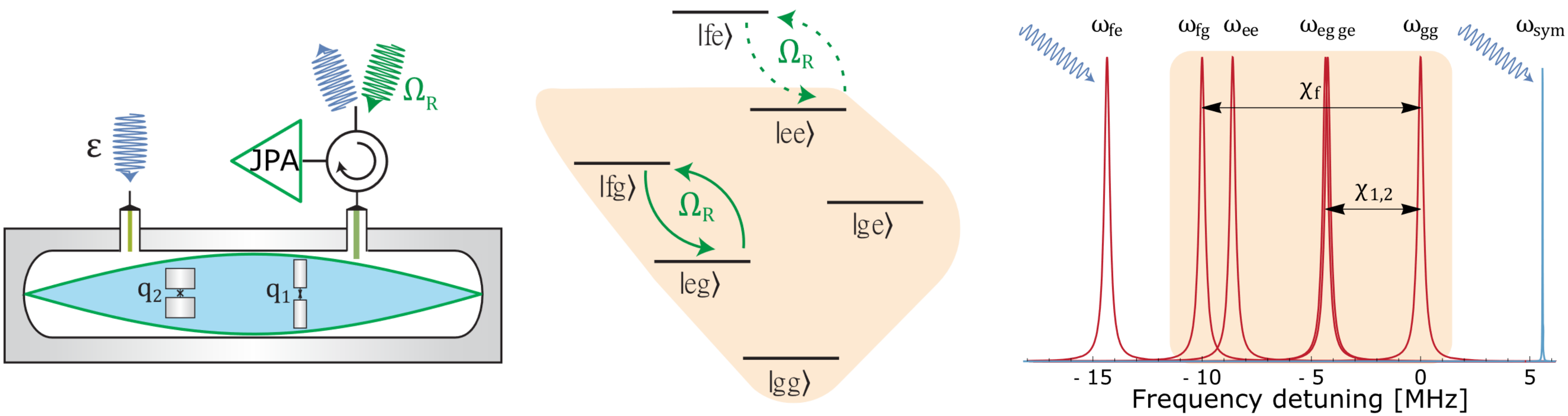
耗散→来自环境的测量

[5] Nature Reviews Physics, 2022, 4(10): 660-671.

· 芝诺门

系统内将一个qutrit($q1$)和一个qubit($q2$)分别与谐振腔耦合，且$q1$与$q2$之间无相互作用，输入一个频率为Ω_R的光，则qutrit发生Rabi振荡，同时打入频率ω_{fe}的脉冲ε，相当于系统无限快的连续投影测量$P = \mathbb{I} - |fe\rangle\langle fe|$，则

$$H_{\text{Zeno}} = PHP = i\hbar\frac{\Omega_R}{2}P\underbrace{(|e\rangle\langle f| - |f\rangle\langle e|)}_{\text{qutrit}}\otimes\underbrace{(|g\rangle\langle g| + |e\rangle\langle e|)}_{\text{qubit}}P = i\hbar\frac{\Omega_R}{2}(|eg\rangle\langle fg| - |fg\rangle\langle eg|)$$



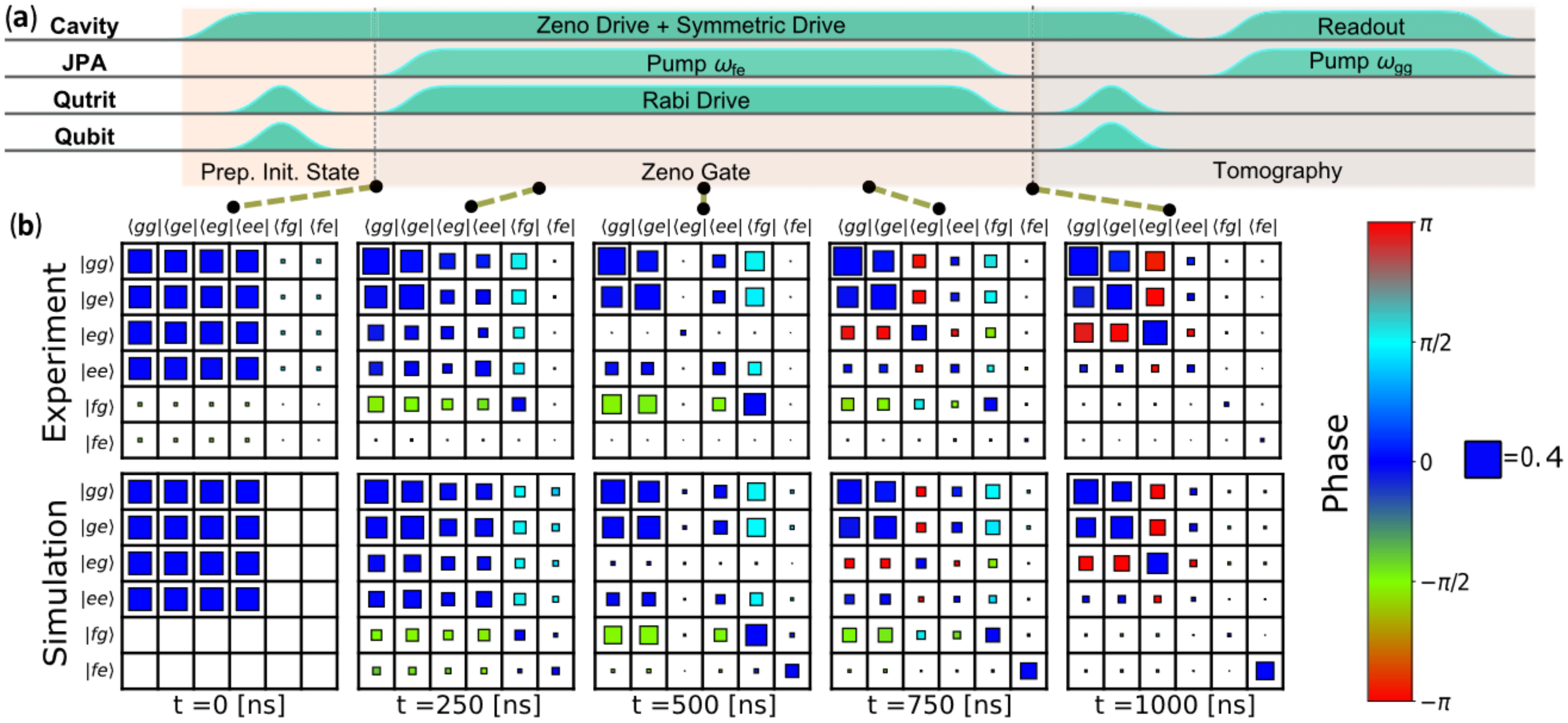
芝诺门[7]

[7] Phys. Rev. Lett.110, 120501

· 芝诺门

$$U = \exp(-iH_{\text{Zeno}}t/\hbar) \text{ where } H_{\text{Zeno}} = i\hbar\frac{\Omega_R}{2}(|eg\rangle\langle fg| - |fg\rangle\langle eg|)$$

演化一个周期$t = 2\pi/\Omega_R$后$|eg\rangle$会携带π的相位，故可以实现一种相位门。



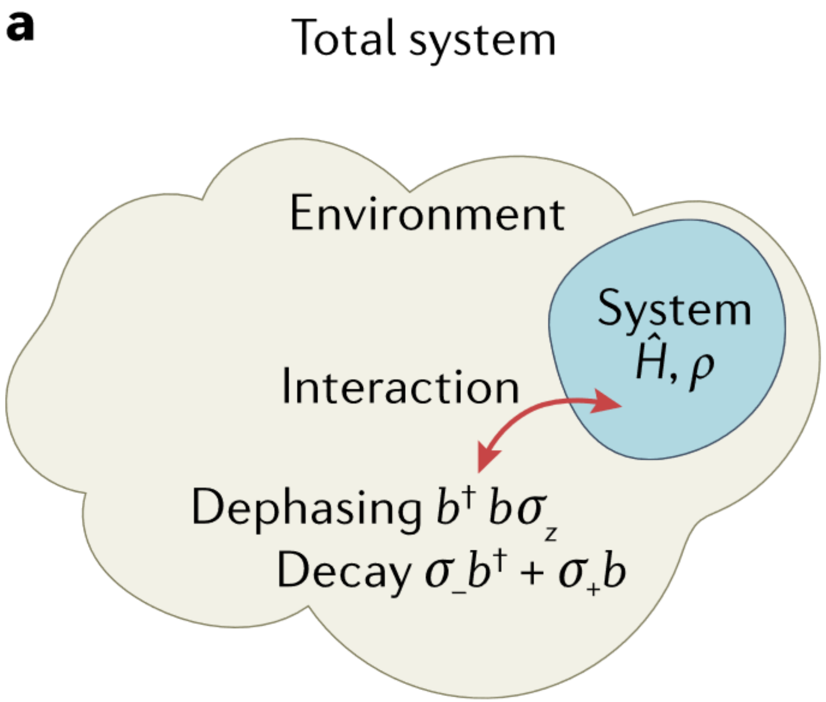
芝诺门实验和模拟结果[7]

[7] Phys. Rev. Lett.110, 120501

Part.03

量子纠错

· 量子纠错



量子系统的退相干与耗散[5]

量子测量&量子反馈

量子纠错：保护量子信息

稳定器 → 门操作直接纠正错误

综合测量 → 不干扰逻辑状态的修正

量子比特与环境发生相互作用

$$\sigma_- b^\dagger + \sigma_+ b$$

向下跃迁并发射一个光子或向上跃迁并吸收一个光子

耗散算符可以表示为量子比特下降算符

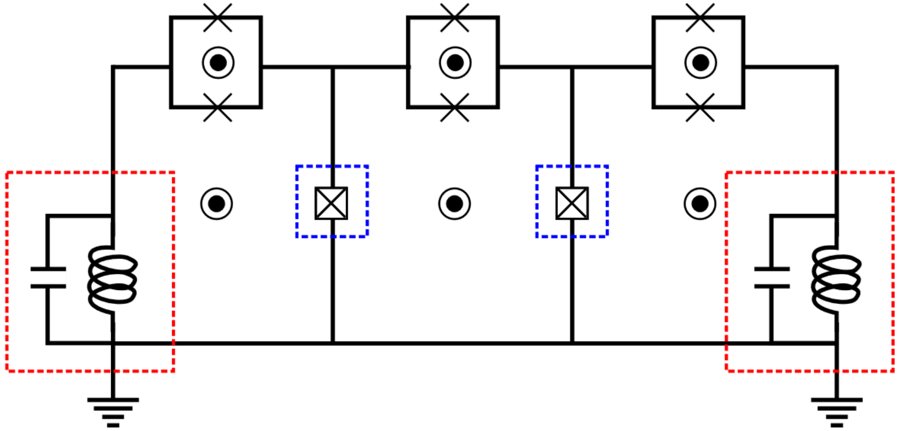
$$L = \sqrt{\gamma}\sigma_-$$

或非二能级系统激发态的湮灭算符

$$L = \sqrt{\gamma}a$$

[5] Nature Reviews Physics, 2022, 4(10): 660-671.

- 量子纠错



超导量子电路电路图[8]

电路由两个transmon量子比特(为三能级，记为l和r)，两个LC谐振器(记为Sl和Sr)以及三个SQUID组成

定义几个算符：

$$P_k^n = |n_k\rangle\langle n_k| \quad n = 0,1,2 \quad k = l, r$$

$$X_k = (a_k^\dagger a_k^\dagger + a_k a_k)/2$$

$$Z_l = P_l^2 - P_l^0$$

$$H = H_P + H_S + H_{PS}$$

$$H_P = -WX_lX_r + \frac{\delta}{2}(P_l^1 + P_r^1)$$

$$H_S = (W + \frac{\delta}{2})(a_{Sl}^\dagger a_{Sl} + a_{Sr}^\dagger a_{Sr})$$

$$H_{PS} = \Omega(a_l^\dagger a_{Sl} + a_r^\dagger a_{Sr} + \mathrm{H.c.})$$

逻辑态：$|L_0\rangle = \frac{|0_l\rangle+|2_l\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0_r\rangle+|2_r\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |0_{Sl}0_{Sr}\rangle$

单光子激发态：$$|E_{0\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|1_l\rangle \otimes \frac{|0_r\rangle+|2_r\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |0_{Sl}0_{Sr}\rangle \pm \frac{|0_l\rangle+|2_l\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0_r\rangle+|2_r\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |1_{Sl}0_{Sr}\rangle\Big]$$

考虑左量子比特出现单光子损失

$$a_l|L_0\rangle = |1_l\rangle \otimes \frac{|0_r\rangle + |2_r\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |0_{Sl}0_{Sr}\rangle = \frac{|E_{0+}\rangle + |E_{0-}\rangle}{\sqrt{2}}$$

此时，只需要将谐振腔中的光子快速耗散即可纠错

$$a_{Sl}|E_{0\pm}\rangle = \pm\sqrt{2}|L_0\rangle$$

[8] Phys. Rev. Lett. 116, 150501 (2016).

· 量子纠错

主方程 $$\partial_t \rho = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho] + \frac{\Gamma_P}{2}\sum_{j=L,R}\left(2a_j\rho a_j^\dagger - \left\{a_j^\dagger a_j,\rho\right\}\right) + \frac{\Gamma_S}{2}\sum_{j=L,R}\left(2a_{Sj}\rho a_{Sj}^\dagger - \left\{a_{Sj}^\dagger a_{Sj},\rho\right\}\right)$$

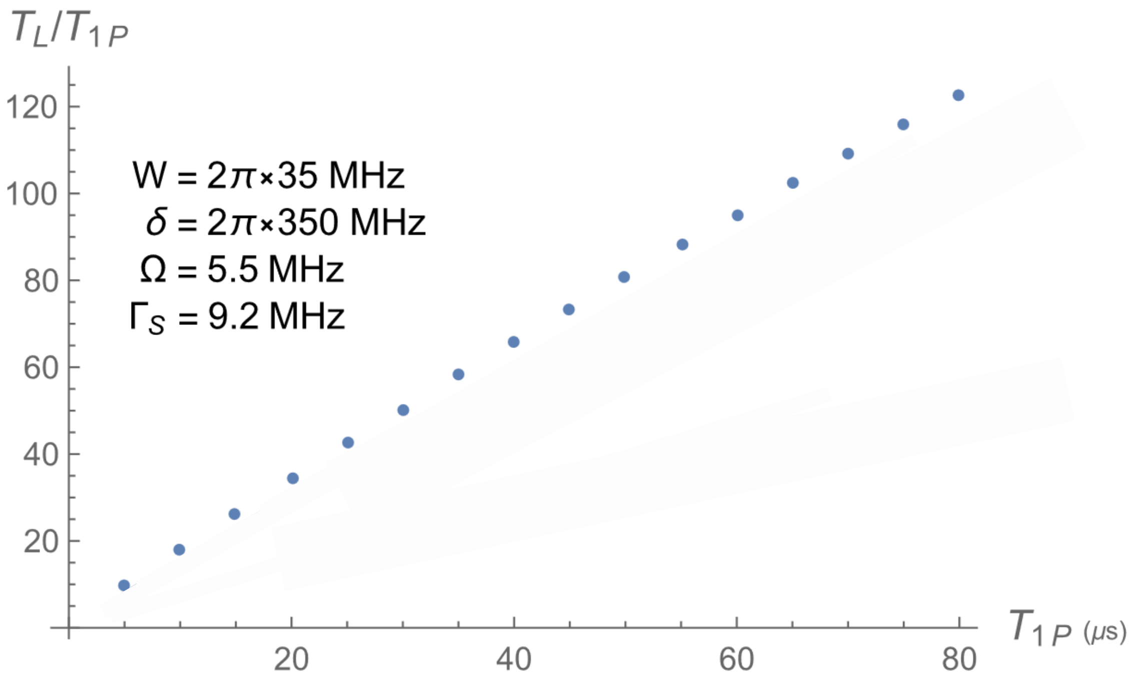
修复率(出现单光子损失后的修复速率)

$$\Gamma_R(\Delta E) = \frac{4\Omega^2\Gamma_S}{4\Omega^2 + 4\left(\Delta E + W + \frac{\delta}{2}\right)^2 + \Gamma_S^2}$$

净逻辑错误率(各个方向上的退相干速率)

$$\Gamma_E^X \simeq 2\Gamma_R\left(W + \frac{\delta}{2}\right) + \frac{2\Gamma_P\left(2\Gamma_P + \Gamma_R\left(+W - \frac{\delta}{2}\right)\right)}{\Gamma_R\left(-W - \frac{\delta}{2}\right)}$$

$$\Gamma_E^Y \simeq \frac{2\Gamma_P\left(2\Gamma_P + \Gamma_R\left(+W - \frac{\delta}{2}\right)\right)}{\Gamma_R\left(-W - \frac{\delta}{2}\right)}$$



有效逻辑态寿命曲线[8]

[8] Phys. Rev. Lett. 116, 150501 (2016).

Part.04

量子模拟

· 两体JC模型的耗散相变

对于传统的光与二能级原子相互作用，考虑弱耦合，利用旋转波近似可得Jaynes-Cummings哈密顿量

$$\hat{H}^{JC}=\nu_c\hat{a}^\dagger\hat{a}+\nu_a\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}^-+g\left(\hat{\sigma}^+\hat{a}+\hat{\sigma}^-\hat{a}^\dagger\right).$$

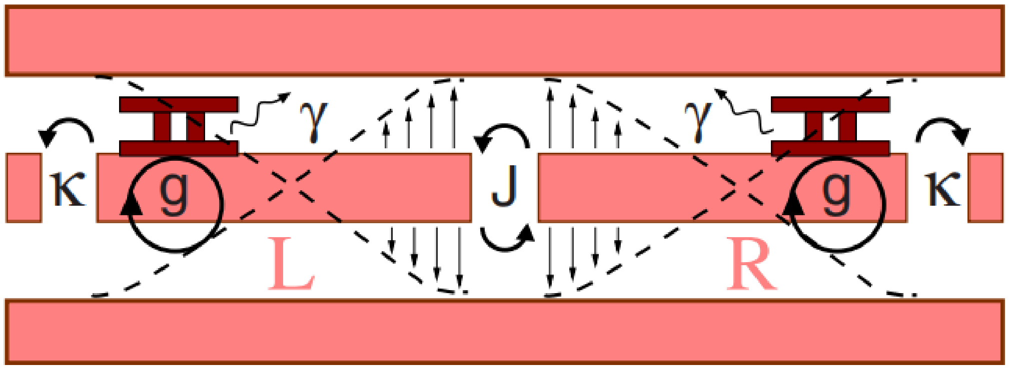
将其推广到两体，并在两侧分别耦合一个腔场

$$\hat{H}^{dimer}=\sum_{s=L/R}\hat{H}_s^{JC}-J\left(\hat{a}_L^\dagger\hat{a}_R+\hat{a}_R^\dagger\hat{a}_L\right),$$

其中J代表两侧声子的hopping，主方程为

$$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}=i\left[\hat{\rho},\hat{H}^{dimer}\right]+\sum_{i=L,R}\left(\frac{\kappa}{2}\mathcal{L}[\hat{a}_i]+\frac{\gamma}{2}\mathcal{L}[\hat{\sigma}_i^-]\right),$$

其中$\mathcal{L}[\hat{O}]=2\hat{O}\hat{\rho}\hat{O}^\dagger-\hat{\rho}\hat{O}^\dagger\hat{O}-\hat{O}^\dagger\hat{O}\hat{\rho}$为Liouvillian超算符，描述体系的耗散。



超导量子电路耦合示意图[9]

制备相干态用于测量，考虑研究

$$\hat{I}=\frac{\hat{a}+\hat{a}^\dagger}{2},$$

$$\hat{Q}=\mathrm{i}\frac{\hat{a}^\dagger-\hat{a}}{2},$$

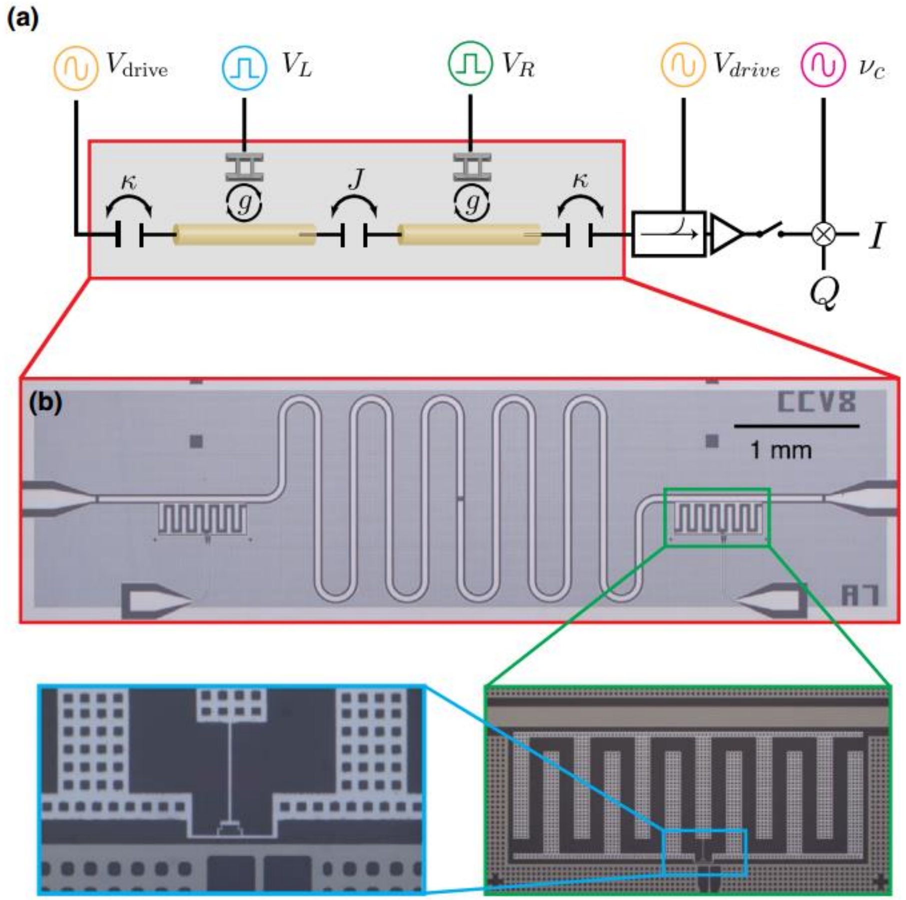
利用上式定义零差信号用于测量

$$\xi=\langle\hat{I}\rangle^2+\langle\hat{Q}\rangle^2,$$

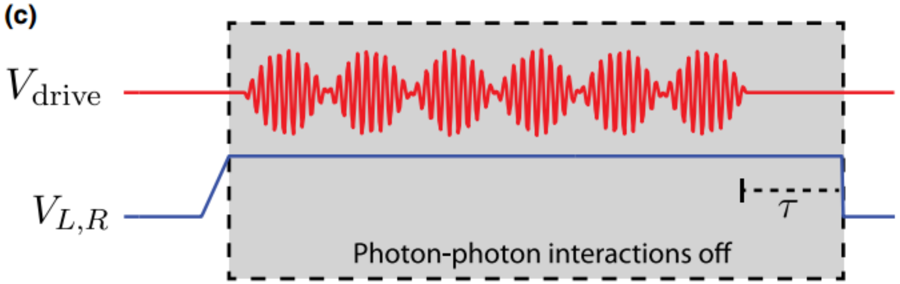
而光子数应当为$\langle\hat{I}^2+\hat{Q}^2\rangle$。

[9] Phys. Rev. B 82, 100507 (2010).

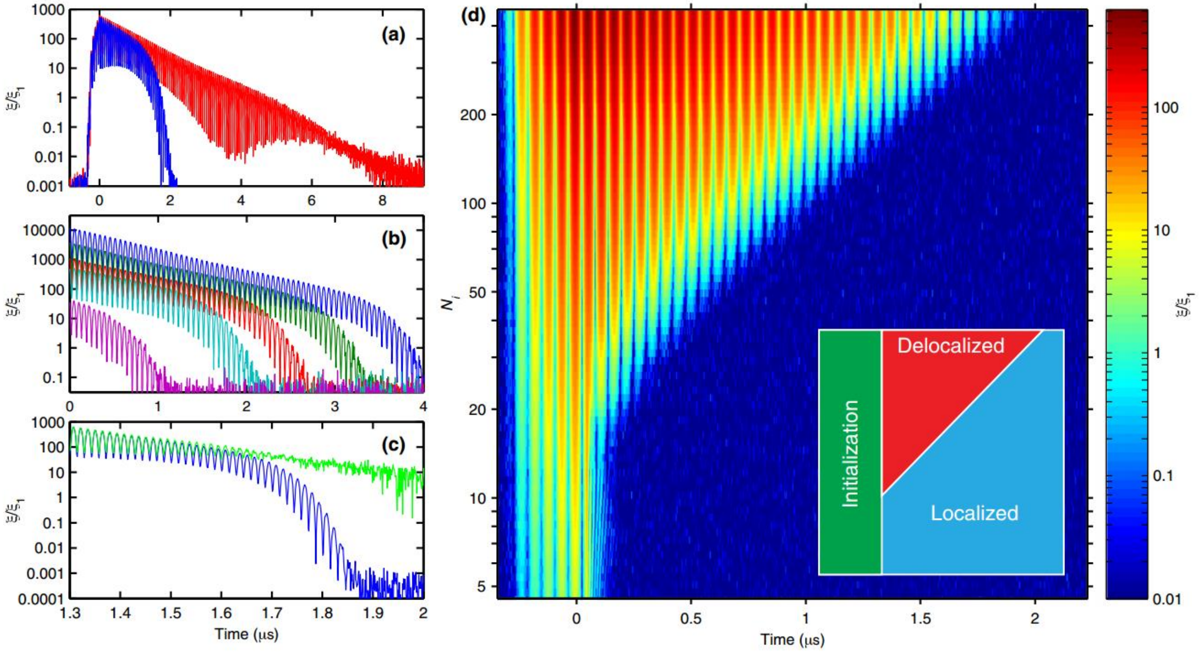
· 两体JC模型的耗散相变



实验装置图[10]



信号脉冲波形[8]



测量结果[10]

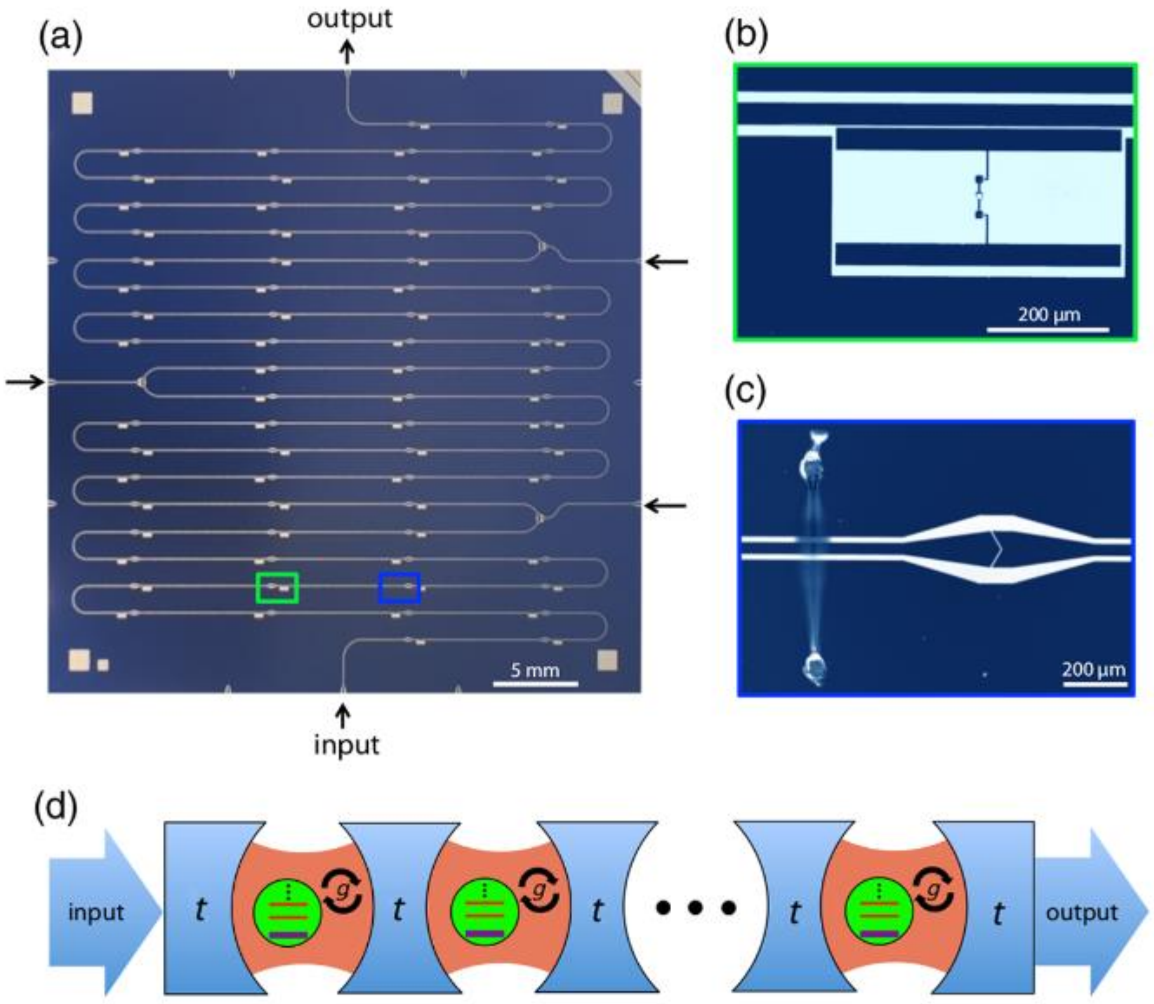
[10] Phys. Rev. X 4, 031043 (2014).

· 一维cQED晶格中的耗散相变

利用一维cQED构建类似Bose-Hubbard模型，与腔进行耦合，对应的哈密顿量为

$$H=\sum_j\left(H_j^r+H_j^q+H_j^{rq}\right)+\sum_{\langle j,j'\rangle}H_{j,j'}^{hop}+H^d\,,$$

其中谐振器能量$H_j^r=\hbar\omega_c a_j^\dagger a_j$；transmon量子比特能量$H_j^q=\hbar\Omega_j b_j^\dagger b_j+\frac{1}{2}U b_j^\dagger b_j^\dagger b_j b_j$，后者为Hubbard相互作用；谐振器和量子比特间的弱相互作用，利用旋转波近似$H_j^{rq}=\hbar g_j(a_j b_j^\dagger+\mathrm{H.c.})$；近邻谐振器声子的hopping项$H_{j,j'}^{hop}=\hbar t(a_j a_{j'}^\dagger+\mathrm{H.c.})$；第一个节点微波驱动项$H^d=\hbar\epsilon(t)a_1 e^{i\omega_d t}+\mathrm{H.c.}$。



实验装置图[11]

[11] Phys. Rev. X 7, 011016 (2017).

· 一维cQED晶格中的耗散相变

考虑耗散，主方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}[\rho,H]+\sum_j\left(\frac{\kappa}{2}\mathcal{L}[a_j]+\frac{\Gamma}{2}\mathcal{L}[b_j]\right)$$

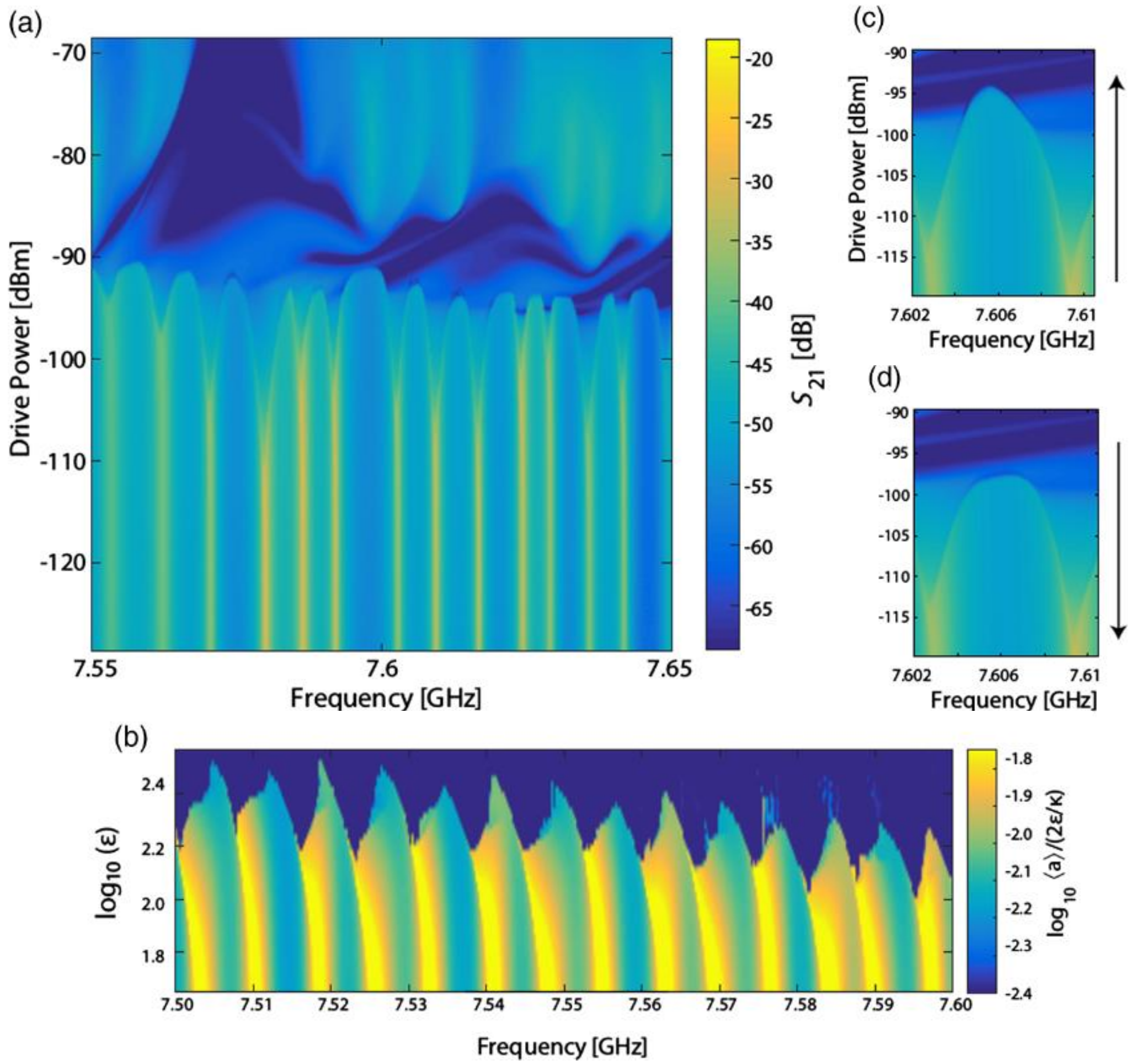
其中$\mathcal{L}[\hat{O}]$为Liouvillian超算符。

取平均场近似$\alpha_j=\langle a_j\rangle$和$\beta_j=\langle b_j\rangle$，利用主方程求迹，得到平均值的动力学演化满足[12]

$$\mathrm{i}\dot{\alpha}_j=\left(\omega_c-\omega_p-\mathrm{i}\frac{\kappa}{2}\right)\alpha_j+g_j\beta_j+t(\alpha_{j-1}+\alpha_{j+1})+\epsilon\delta_{j,1},$$

$$\mathrm{i}\dot{\beta}_j=\left(\Omega_j-\omega_p-\mathrm{i}\frac{\Gamma}{2}\right)\beta_j+\frac{U}{\hbar}|\beta_j|^2\beta_j+g_j\alpha_j.$$

可以计算得$S_{21}\sim\langle a_j\rangle$，设驱动功率为$\varepsilon$，腔与量子比特耗散率均为$\kappa$，计算得右图(b)。



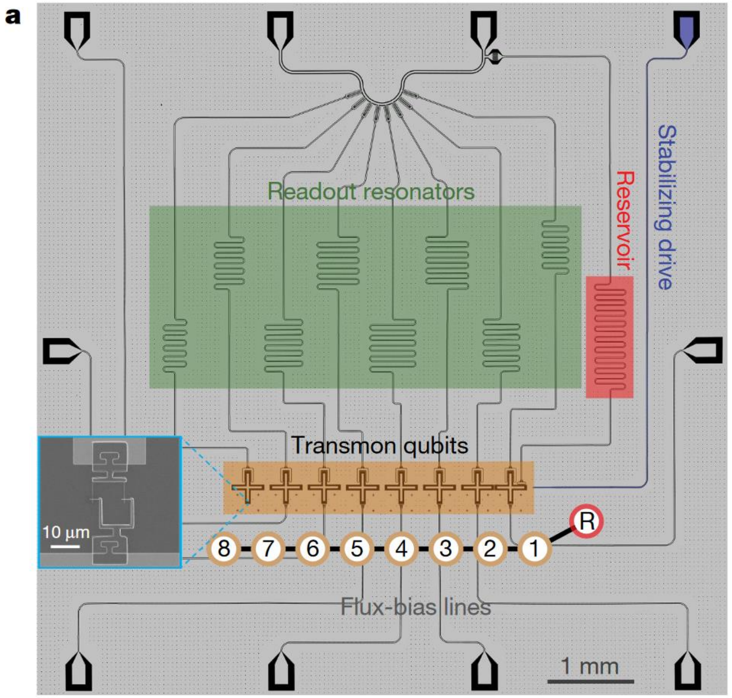
实验及仿真结果[11]

[11] Phys. Rev. X 7, 011016 (2017).
[12] Phys. Rev. A 91, 033823 (2015).

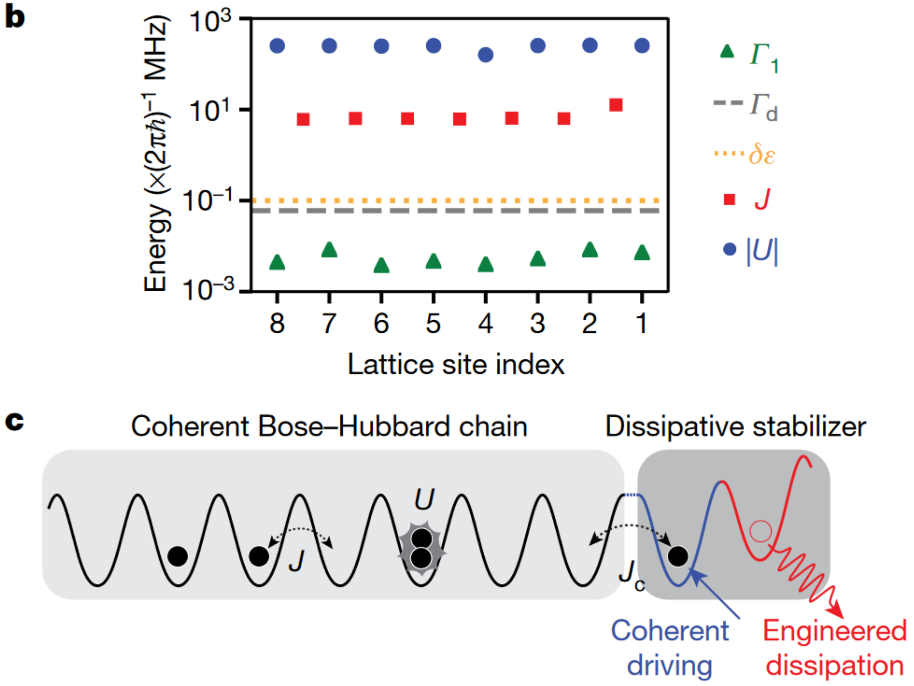
·耗散稳定的光子Mott绝缘体

同样考虑Bose-Hubbard模型，哈密顿量为

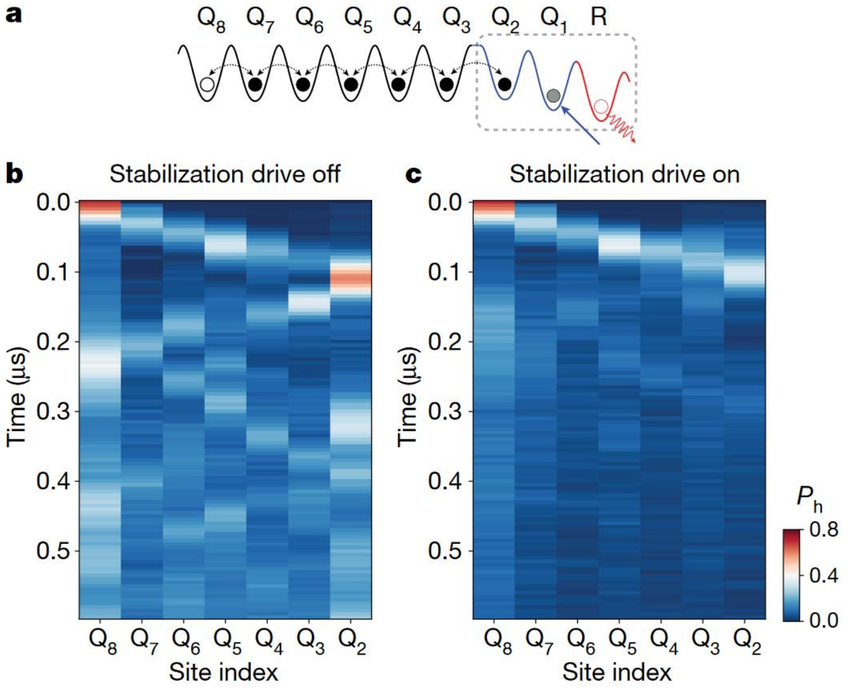
$$H_{BH}\hbar = -\sum_{\langle i.j\rangle} J_{ij} a_i^{\dagger} a_j + \frac{U}{2}\sum_i n_i(n_i - 1) + \sum_i \epsilon_i n_i$$



实验装置[13]



实验参数测量及等效模型[13]



测量结果[13]

[13] Nature 566, 51–57 (2019)

Part.05

总结

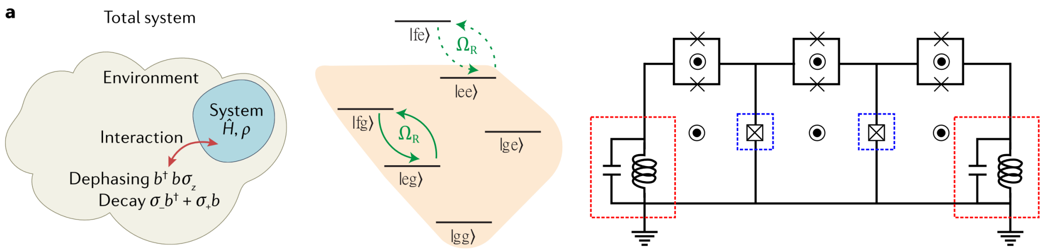
· 总结

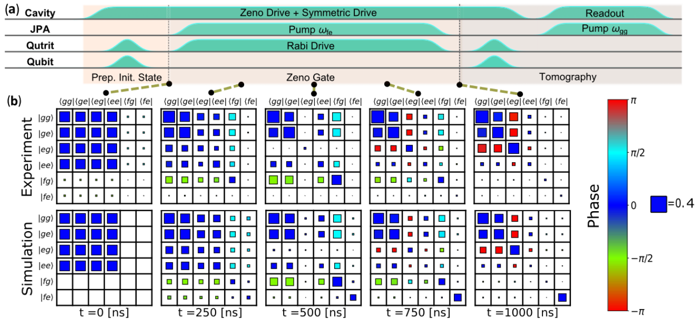
1 主方程：描述耗散体系的数学理论方法。

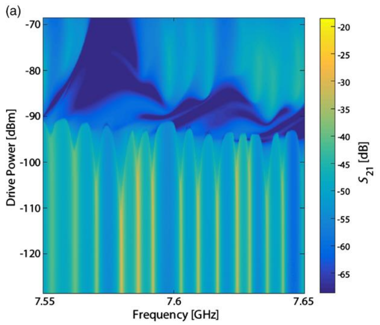
2 芝诺效应：利用快速测量维持系统状态，可以实现逻辑门。

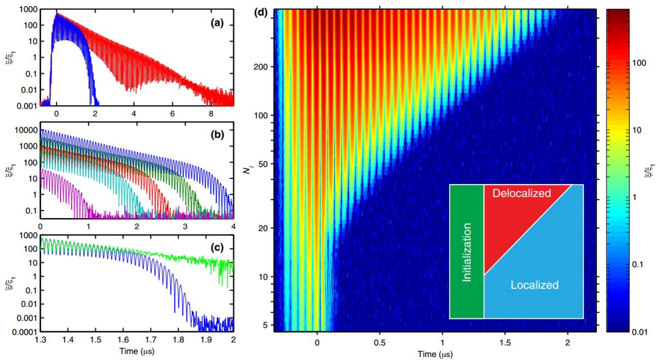
3 量子纠错：利用耗散进行运算纠错，确保系统状态正确。

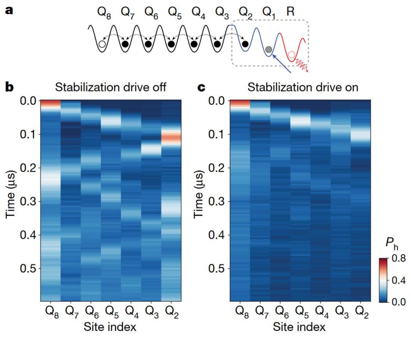
4 量子模拟：研究耗散给系统带来的相变，或实现稳定的相。











中山大學
SUN YAT-SEN UNIVERSITY

Thanks

中山大学物理学院

报告人：路尚润 **合作者：**简彬洋

Part.00

附录

· **References**

[1] Daniel Manzano. A short introduction to the Lindblad master equation. AIP Advances, 2020, 10 (2): 025106.
[2] Breuer H P, Petruccione F. The Theory of Open Quantum Systems. Oxford: Oxford University Press, 2002.
[3] 郭光灿,周祥发 著. 量子光学[M]. 北京：科学出版社, 2022.
[4] 张智明. 量子光学[M]. 北京: 科学出版社, 2015.
[5] Harrington P M, Mueller E J, Murch K W. Engineered dissipation for quantum information science[J]. Nature Reviews Physics, 2022, 4(10): 660-671.
[6] Itano, W. M., Heinzen, D. J., Bollinger, J. J. &Wineland, D. J. Quantum Zeno effect. Phys. Rev. A 41,2295–2300 (1990).
[7] Geerlings, K. et al. Demonstrating a driven reset protocol for a superconducting qubit. Phys. Rev. Lett.110, 120501 (2013).
[8] Kapit, E. Hardware- efficient and fully autonomous quantum error correction in superconducting circuits. Phys. Rev. Lett. 116, 150501 (2016).
[9] S. Schmidt, D. Gerace, A. A. Houck, G. Blatter, and H. E.Türeci, Nonequilibrium Delocalization-Localization Transition of Photons in Circuit Quantum Electrodynamics. Phys. Rev. B 82, 100507 (2010).
[10] Raftery, J., Sadri, D., Schmidt, S., Türeci, H. E. & Houck, A. A. Observation of a dissipation-induced classical to quantum transition. Phys. Rev. X 4, 031043 (2014).
[11] Fitzpatrick, M., Sundaresan, N. M., Li, A. C., Koch, J. & Houck, A. A. Observation of a dissipative phase transition in a one-dimensional circuit QED lattice. Phys. Rev. X 7, 011016 (2017).
[12] U. Naether, F. Quijandría, J. J. García-Ripoll, and D. Zueco, Stationary Discrete Solitons in a Driven Dissipative BoseHubbard Chain, Phys. Rev. A 91, 033823 (2015).
[13] Ma, R. et al. A dissipatively stabilized Mott insulator of photons. Nature 566, 51–57 (2019).

· 主方程推导

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes \hat{I}_B + \hat{I}_S \otimes \hat{H}_B + \lambda \hat{H}_{SB},$$

$$\frac{\mathrm{d}\rho(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{H}, \rho(t)].$$

相互作用绘景

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_S \otimes \hat{I}_B + \hat{I}_S \otimes \hat{H}_B \quad \text{及} \quad U = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar},$$

$$\widetilde{\rho}(t) = U^\dagger(t)\rho(t)U(t), \quad \widetilde{H}_I(t) = U^\dagger(t)\hat{H}_{SB}U(t)$$

$$\frac{\mathrm{d}\widetilde{\rho}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\lambda}{\mathrm{i}\hbar}[\widetilde{H}_I(t), \widetilde{\rho}(t)].$$

薛定谔绘景下

$$\frac{\mathrm{d}\rho(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{H}_0, \rho(t)] + U(t)\frac{\mathrm{d}\widetilde{\rho}}{\mathrm{d}t}U^\dagger(t).$$

形式解

$$\widetilde{\rho}(t) = \widetilde{\rho}(0) + \frac{\lambda}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{d}s[\widetilde{H}_I(s), \widetilde{\rho}(s)]$$
$$-\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}s_1 \int_0^{s_1} \mathrm{d}s_2[\widetilde{H}_I(s_1), [\widetilde{H}_I(s_2), \widetilde{\rho}(s_2)]] + O(\lambda^3).$$

当系统与环境的耦合系数λ相对其他能量尺度是小量时，忽略高阶项，称为Born近似。

一般来讲，子系统与环境耦合较弱，假设其处于纯态

$$\widetilde{\rho}(0) = \widetilde{\rho}_S(0) \otimes \widetilde{\rho}_B.$$

再假设环境较大，其发生微小变动，近似不变

$$\widetilde{\rho}(t) = \widetilde{\rho}_S(t) \otimes \widetilde{\rho}_B.$$

对环境取trace，获得子系统约化密度矩阵，其满足

$$\dot{\widetilde{\rho}}_S(t) = \frac{\lambda}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{Tr}_B[\widetilde{H}_I(t), \widetilde{\rho}(0)] - \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}s\mathrm{Tr}_B[\widetilde{H}_I(t), [\widetilde{H}_I(s), \widetilde{\rho}(s)]].$$

· 主方程推导

一般来讲，算符可以写为

$$\widetilde{H}_I = \sum_\alpha \hat{S}_\alpha \otimes \hat{B}_\alpha.$$

而假设环境始终处于热平衡态，密度矩阵只包含对角项，通过调节环境的能量零点，总可以有

$$\mathrm{Tr}\left[\widetilde{\rho}_B \hat{B}_\alpha\right] = 0.$$

$$\dot{\widetilde{\rho}}_S(t) = -\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}s \mathrm{Tr}_B[\widetilde{H}_I(t), [\widetilde{H}_I(s), \widetilde{\rho}(s)]].$$

上式包含了热库算符的关联函数

$$\mathrm{Tr}_B\left[\hat{B}_\alpha(t)\hat{B}_\beta(s)\widetilde{\rho}_B\right].$$

而可以假定算符之间的关联时间很短，将其近似成$\delta(t-s)$函数，则进行替换，即Markov近似

$$\dot{\widetilde{\rho}}_S(t) = -\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}s \mathrm{Tr}_B[\widetilde{H}_I(t), [\widetilde{H}_I(s), \widetilde{\rho}(t)]].$$

假设考察时间远大于系统稳定的弛豫时间，则

$$\dot{\widetilde{\rho}}_S(t) = -\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}s \mathrm{Tr}_B[\widetilde{H}_I(t), [\widetilde{H}_I(t-s), \widetilde{\rho}(t)]].$$

假设

$$\hat{H}_I = \sum_\alpha \hat{A}_\alpha \otimes \hat{B}_\alpha$$

相互作用绘景下

$$\widetilde{A}_\alpha(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_S t/\hbar}\hat{A}_\alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_S t/\hbar}, \qquad \widetilde{B}_\alpha(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_B t/\hbar}\hat{B}_\alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_B t/\hbar}.$$

此时会多一个时间因子，利用频率区分

$$\hat{A}_\alpha = \sum_\omega \hat{A}_\alpha(\omega) \qquad \hat{A}_\alpha(\omega) = \sum_{a,b}\delta(\omega_{ab}-\omega)|a\rangle\langle a|\hat{A}_\alpha|b\rangle\langle b|,$$

$$\omega_{ab} = \omega_a - \omega_b, \text{ 及 } \quad \delta(\omega_{ab}-\omega) = \begin{cases} 0, & \omega_{ab} \neq \omega \\ 1, & \omega_{ab} = \omega \end{cases}.$$

则变换后得

$$\widetilde{A}_\alpha(\omega) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\hat{A}_\alpha(\omega)$$

$$\widetilde{H}_I = \sum_{\alpha,\omega}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\hat{A}_\alpha(\omega)\otimes\widetilde{B}_\alpha(t) = \sum_{\alpha,\omega}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\hat{A}_\alpha^\dagger(\omega)\otimes\widetilde{B}_\alpha(t),$$

- **主方程推导**

将哈密顿量带入有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widetilde{\rho}_S(t)=\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}s\mathrm{Tr}_B\left[\widetilde{H}_I(t-s)\widetilde{\rho}_S(t)\otimes\rho_B\widetilde{H}_I(t)\right.$$
$$\left.-\widetilde{H}_I(t)\widetilde{H}_I(t-s)\widetilde{\rho}_S(t)\otimes\widetilde{\rho}_B\right]+h.c.$$
$$=\sum_{\substack{(\omega,\omega')\\(\alpha,\beta)}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(w'-w)t}\Gamma_{\alpha\beta}(\omega)\left[\hat{A}_\beta(\omega)\widetilde{\rho}_S(t)\hat{A}^\dagger_\alpha(\omega')-\hat{A}^\dagger_\alpha(\omega')\hat{A}_\beta(\omega)\widetilde{\rho}_S(t)\right]$$
$$+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(w'-w)t}\widetilde{\Gamma}_{\beta\alpha}(\omega)\left[\hat{A}_\alpha(\omega')\widetilde{\rho}_S(t)\hat{A}^\dagger_\beta(\omega)-\widetilde{\rho}_S(t)\hat{A}^\dagger_\beta(\omega)\hat{A}_\alpha(\omega')\right],$$

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\omega)=\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}s\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega s}\mathrm{Tr}_B\left[\widetilde{B}^\dagger_\alpha(t)\widetilde{B}_\beta(t-s)\widetilde{\rho}_B\right]$$
$$=\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}s\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega s}\mathrm{Tr}_B\left[\widetilde{B}^\dagger_\alpha(s)\widetilde{B}_\beta(0)\widetilde{\rho}_B\right].$$
$$\widetilde{\Gamma}_{\beta\alpha}(\omega)=\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}s\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega s}\mathrm{Tr}_B\left[\widetilde{B}^\dagger_\beta(t-s)\widetilde{B}_\alpha(t)\widetilde{\rho}_B\right]$$
$$=\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}s\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega s}\mathrm{Tr}_B\left[\widetilde{B}^\dagger_\beta(0)\widetilde{B}_\alpha(s)\widetilde{\rho}_B\right].$$
$$=\left[\Gamma_{\alpha\beta}(\omega)\right]^*$$

假定系统和环境得耦合交换很快，利用旋转波近似

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widetilde{\rho}_S(t)=\sum_{\omega,(\alpha,\beta)}\Gamma_{\alpha\beta}(\omega)\left[\hat{A}_\beta(\omega)\widetilde{\rho}_S(t)\hat{A}^\dagger_\alpha(\omega)-\hat{A}^\dagger_\alpha(\omega)\hat{A}_\beta(\omega)\widetilde{\rho}_S(t)\right]$$
$$+\widetilde{\Gamma}_{\alpha\beta}(\omega)\left[\hat{A}_\beta(\omega)\widetilde{\rho}_S(t)\hat{A}^\dagger_\alpha(\omega)-\widetilde{\rho}_S(t)\hat{A}^\dagger_\alpha(\omega)\hat{A}_\beta(\omega)\right].$$

定义

$$\Gamma(\omega)=[\Gamma_{\alpha\beta}(\omega)],\qquad \widetilde{\Gamma}(\omega)=[\widetilde{\Gamma}_{\alpha\beta}(\omega)]=\Gamma(\omega)^\dagger,$$

分为厄米和非厄米项

$$\Gamma(\omega)=\frac{\Gamma(\omega)+\Gamma(\omega)^\dagger}{2}+\mathrm{i}\frac{\Gamma(\omega)-\Gamma(\omega)^\dagger}{2\mathrm{i}}.$$

引入厄米矩阵

$$\gamma(\omega)=\Gamma(\omega)+\Gamma(\omega)^\dagger,\qquad \Delta(\omega)=\frac{1}{2\mathrm{i}}\left[\Gamma(\omega)-\Gamma(\omega)^\dagger\right].$$

· 主方程推导

带入有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\tilde{\rho}_S(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{H}_{LS},\tilde{\rho}_S(t)]+\sum_{\omega,\alpha,\beta}\gamma_{\alpha\beta}(\omega)\Big[\hat{A}_\beta(\omega)\tilde{\rho}_S(t)\hat{A}_\alpha^\dagger(\omega)-\frac{1}{2}\left\{\hat{A}_\alpha^\dagger(\omega)\hat{A}_\beta(\omega),\tilde{\rho}_S(t)\right\}\Big].$$

H_{LS}为环境诱导的哈密顿量修正，对应QED中的兰姆位移

$$\hat{H}_{LS}=\hbar\sum_\omega\sum_{\alpha\beta}\Delta_{\alpha\beta}(\omega)\hat{A}_\alpha^\dagger(\omega)\hat{A}_\beta(\omega).$$

$$\begin{aligned}\widetilde{\Gamma}_{\alpha\beta}=\Gamma_{\beta\alpha}^*&=\left(\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}s e^{\mathrm{i}\omega s}\mathrm{Tr}_B\big[\widetilde{B}_\beta^\dagger(s)\widetilde{B}_\alpha(0)\tilde{\rho}_B\big]\right)^*\\&=\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}s e^{-\mathrm{i}\omega s}\mathrm{Tr}_B\big[\widetilde{B}_\alpha^\dagger(0)\widetilde{B}_\beta(s)\tilde{\rho}_B\big]\\&=\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_{-\infty}^0 \mathrm{d}s e^{\mathrm{i}\omega s}\mathrm{Tr}_B\big[\widetilde{B}_\alpha^\dagger(s)\widetilde{B}_\beta(0)\tilde{\rho}_B\big],\end{aligned}$$

则

$$\gamma_{\alpha\beta}=\Gamma_{\alpha\beta}+\widetilde{\Gamma}_{\alpha\beta}=\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}s e^{\mathrm{i}\omega s}\mathrm{Tr}_B\big[\widetilde{B}_\alpha^\dagger(s)\widetilde{B}_\beta(0)\tilde{\rho}_B\big].$$

可见，γ矩阵是另一矩阵M的Fourier变换

$$M_{\alpha\beta}=\mathrm{Tr}_B\big[\widetilde{B}_\alpha^\dagger(s)\widetilde{B}_\beta(0)\tilde{\rho}_B\big].$$

而M应当为正定的，因此γ也是正定的，且是厄米的，对角化

$$\boldsymbol{O}\boldsymbol{\gamma}(\omega)\boldsymbol{O}^\dagger=\begin{pmatrix}\gamma_1(\omega) & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \gamma_2(\omega) & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & & 0\\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_N(\omega)\end{pmatrix},$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{H}_{LS},\tilde{\rho}_S(t)]+\sum_{\omega,k}\gamma_k(\omega)\Big[\hat{L}_k(\omega)\tilde{\rho}_S(t)\hat{L}_k^\dagger(\omega)-\frac{1}{2}\left\{\hat{L}_k^\dagger(\omega)\hat{L}_k(\omega),\tilde{\rho}_S(t)\right\}\Big],$$

· **主方程推导**

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t)=\frac{1}{i\hbar}[\hat{H}_{LS},\tilde{\rho}_S(t)]+\sum_{\omega,k}\gamma_k(\omega)\left[\hat{L}_k(\omega)\tilde{\rho}_S(t)\hat{L}_k^\dagger(\omega)-\frac{1}{2}\left\{\hat{L}_k^\dagger(\omega)\hat{L}_k(\omega),\tilde{\rho}_S(t)\right\}\right],$$

其中耗散算符(对β求和)

$$\hat{L}_k(\omega)=O_{k\beta}\hat{A}_\beta(\omega).$$

对于单频热库

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t)=\frac{1}{i\hbar}[\hat{H}_{LS},\tilde{\rho}_S(t)]+\sum_{k}\gamma_k\left[\hat{L}_k\tilde{\rho}_S(t)\hat{L}_k^\dagger-\frac{1}{2}\left\{\hat{L}_k^\dagger\hat{L}_k,\tilde{\rho}_S(t)\right\}\right],$$

变换为薛定谔绘景下

$$\dot{\rho}_S(t)=\mathcal{L}\rho_S(t)=\frac{1}{i\hbar}[\hat{H}_S+\hat{H}_{LS},\rho_S(t)]+\sum_{k}\gamma_k[\hat{L}_k\rho_S(t)\hat{L}_k^\dagger-\frac{1}{2}\{\hat{L}_k^\dagger\hat{L}_k,\rho_S(t)\}],$$

其中，$\gamma_k\geq 0$为耗散率，$\hat{L}_k$为系统与环境耦合导致系统状态发生改变的算符，通常称之为 Lindblad 算符，上述方程也称为 Lindblad 主方程。

· Lamb Shift

原子能级：

①中心力场E_n

②SOC

$$H_{SO}=\frac{1}{2rm_0^2c^2}\frac{dV}{dr}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$$

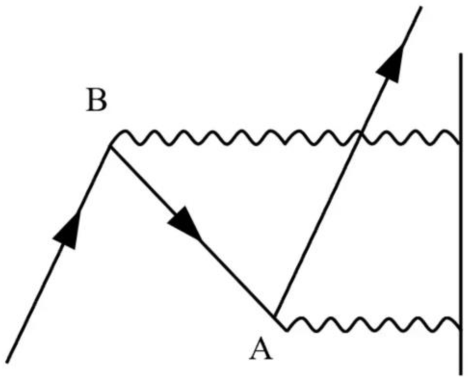
③相对论修正

$$H_{RKE}=-\frac{p^4}{8m_0^3c^2}$$

④达尔文项

$$H_D=\frac{1}{8}\frac{\hbar^2}{m_0^2c^2}\nabla^2V$$

⑤Lamb 位移



$$\Delta E_{SE}=\frac{\alpha}{\pi}\frac{(Z\alpha)^4}{n^3}F(nl_j,Z\alpha)m_e$$

虚光子过程

$$E_{RKE}=(Z\alpha)^2(-E_n)\frac{1}{n^2}\left(\frac{3}{4}-\frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right)$$

$$E_D=\frac{-(Z\alpha)^2E_n}{n},\ l=0$$

$$E_{SO}=(Z\alpha)^2(-E_n)\frac{1}{2n}\frac{j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$