Rabi – II

江源

2024-05-11

Section 1: SVD 分解和 C 矩阵的关系

一个系综矩阵 $A_{N\times M}, (M > N)$，定义关联矩阵 $C_{M\times M} = A^T_{M\times N} A_{N\times M}$，求得 C 矩阵的特征值λ_i和对应标准正交的特征向量

$$\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, ..., \boldsymbol{v}_r, \boldsymbol{v}_{r+1}, ..., \boldsymbol{v}_M \tag{1}$$

其中 r 是 C 矩阵的秩。可以写成正交矩阵 $V_{M\times M} = \left[V_{1_{M\times r}}, V_{2_{M\times M-r}}\right] = \left[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, ..., \boldsymbol{v}_r, \boldsymbol{v}_{r+1}, ..., \boldsymbol{v}_M\right]$，其中 V_1 是 C 矩阵的前 r 个特征向量，V_2 是 C 矩阵的后 $M-r$ 个特征向量。

根据特征值与特征向量的定义，有：

$$A^T A \boldsymbol{v}_i = \lambda_i \boldsymbol{v}_i \quad (i = 1, 2, ..., M) \tag{2}$$

考虑 $A\boldsymbol{v}_i \quad (i = 1, 2, ..., M)$，有：

$$\langle A\boldsymbol{v}_i, A\boldsymbol{v}_j \rangle = \boldsymbol{v}_i^T A^T A \boldsymbol{v}_j = \boldsymbol{v}_i^T \lambda_j \boldsymbol{v}_j = \lambda_j \boldsymbol{v}_i^T \boldsymbol{v}_j = \begin{cases} \lambda_i, 1 \leq i = j \leq r \\ 0, i \neq j \end{cases} \tag{3}$$

令 $\Lambda_{M\times M} = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_r, 0, ..., 0) = \begin{pmatrix} \Lambda_{1_{r\times r}} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$，设 $\Sigma_{1_{r\times r}} = \sqrt{\Lambda_{1_{r\times r}}}$，则有：

从而有 $A^T A V_1 = V_1 \Lambda_1 = V_1 \Sigma_1^2$，进一步得到

$$\Sigma_1^{-1} V_1^T A^T A V_1 \Sigma_1^{-1} = I \tag{4}$$

令 $U_{1_{N\times r}} = A_{N\times M} V_{1_{M\times r}} {\Sigma_1^{-1}}_{r\times r}$，则有 $U_1^T U_1 = I$，即 U_1 是正交矩阵。可以选择$N-r$ 个正交矩阵 U_2，使得 $U_{N\times N} = \left[U_{1_{N\times r}}, U_{2_{N\times N-r}}\right]$ 是标准正交矩阵。

综上，

$$U^T_{N\times N} A_{N\times M} V_{M\times M} = \begin{pmatrix} U_1^T A V_1 & U_1^T A V_2 \\ U_2^T A V_1 & U_2^T A V_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \Sigma_{N\times M} \tag{5}$$

即 $A = U\Sigma V^T$，这就是 SVD 分解。

特征值λ_i和σ_i的关系是 $\lambda_i = \sigma_i^2$。

Section 2: 量子本征态

一个量子系统可以拆分为A和B两部分，分别表征系统A和环境B。系统A的哈密顿量为H_A，环境B的哈密顿量为H_B，系统和环境的相互作用哈密顿量为H_{AB}。系统和环境的总哈密顿量为$H = H_A + H_B + H_{AB}$，系统的基态波函数可以写为

$$|G\rangle = \sum_\tau \sum_i a_{\tau i} |\psi_\tau^A\rangle |\psi_i^B\rangle = \sum_\tau b_\tau |\psi_\tau^A\rangle \tag{6}$$

其中$b_\tau = \sum_i a_{\tau i} |\psi_i^B\rangle$，代表环境作用在系统态$\tau$的概率幅.

可以定义一个关联矩阵，表示系统态τ和τ'在环境作用下的关联，即

$$\begin{aligned} C_{\tau\tau'} = \langle b_\tau, b_{\tau'} \rangle &= \left(\sum_i a_{\tau i} |\psi_i^B\rangle \right)^\dagger \sum_j a_{\tau' j} |\psi_j^B\rangle \\ &= \sum_i \sum_j a_{\tau i}^* a_{\tau' j} \langle \psi_i^B | \psi_j^B \rangle = \sum_i \sum_j a_{\tau i}^* a_{\tau' j} \delta_{ij} \\ &= \sum_i a_{\tau i}^* a_{\tau' i} \end{aligned} \tag{7}$$

2.1 Rabi 模型为例

Rabi 模型的哈密顿量为

$$\hat{H} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\Omega}{2} \hat{\sigma}_x + g(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \hat{\sigma}_z \tag{8}$$

其中ω是振子的频率，Ω是自旋的频率，g是耦合系数。根据算符关系$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})$ 和 $\hat{p} = -i\sqrt{\frac{\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})$，可以得到

$$\begin{aligned} \hat{p}^2 &= -\frac{\omega}{2} \left(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger \right) = -\frac{\omega}{2} \left(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 \right) \\ \hat{x}^2 &= \frac{1}{2\omega} \left(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger \right) = \frac{1}{2\omega} \left(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + 2\hat{a}^\dagger \hat{a} - 1 \right) \end{aligned} \tag{9}$$

进一步可以得到

$$\begin{aligned} \frac{2}{\omega} \hat{p}^2 + 2\omega \hat{x}^2 &= 4\hat{a}^\dagger \hat{a} - 2 \\ \hat{a}^\dagger \hat{a} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{p}^2}{\omega} + \omega \hat{x}^2 + 1 \right) \end{aligned} \tag{10}$$

哈密顿量可以写为

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \omega^2 \hat{x}^2 + \omega) + \frac{\Omega}{2} \hat{\sigma}_x + \sqrt{2\omega} g \hat{x} \hat{\sigma}_z \\ \hat{H}_r &= \frac{\hat{H}}{\Omega/2} = \frac{1}{\Omega} (\hat{p}^2 + \omega^2 \hat{x}^2 + \omega) + \hat{\sigma}_x + 2\frac{\sqrt{2\omega}}{\Omega} g \hat{x} \hat{\sigma}_z \end{aligned} \tag{11}$$

令 $y^2 \equiv \frac{\omega^2}{\Omega} \hat{x}^2$，Eq. 11 可以写为

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_r &= \frac{\hat{p}^2}{\Omega} + y^2 + \frac{\omega}{\Omega} + \hat{\sigma}_x + 2\frac{\sqrt{2\omega}}{\Omega} g \frac{\sqrt{\Omega}}{\omega} y \hat{\sigma}_z \\
&= -\frac{1}{\Omega}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + y^2 + \frac{\omega}{\Omega} + \hat{\sigma}_x + 2g\sqrt{\frac{2}{\omega\Omega}} y \hat{\sigma}_z \\
&= -\frac{\omega^2}{\Omega^2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2 + \frac{\omega}{\Omega} + \hat{\sigma}_x + 2g\sqrt{\frac{2}{\omega\Omega}} y \hat{\sigma}_z
\end{aligned} \tag{12}
$$

令 $\eta \equiv \frac{\Omega}{\omega}$和 $R \equiv \frac{2g}{\sqrt{\omega\Omega}}$，则有

$$
\hat{H}_r = -\frac{1}{\eta}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2 + \frac{1}{\eta} + \hat{\sigma}_x + \sqrt{2}Ry\hat{\sigma}_z \tag{13}
$$

当 $\eta \to \infty$ 时，哈密顿量可以写为

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_r(y) &= \lim_{\eta\to\infty} \hat{H}_r = y^2 + \hat{\sigma}_x + \sqrt{2}Ry\hat{\sigma}_z \\
&= \begin{pmatrix} y^2 + \sqrt{2}Ry & 1 \\ 1 & y^2 - \sqrt{2}Ry \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{14}
$$

哈密顿量的本征值为

$$
E_\pm = y^2 \pm \sqrt{1 + 2R^2y^2} \tag{15}
$$

函数性质可知，$E_$对应的基态位置，当 $R \le 1$ 时，基态在 $y = 0$ 处，当 $R > 1$ 时，基态在

$$
y = \pm\frac{\sqrt{R^4 - 1}}{\sqrt{2}R} \tag{16}
$$

处

首先分析 $R \le 1$ 的情况，此时哈密顿量写为

$$
\hat{H}_r = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{17}
$$

对应的本征值和本征波函数为

$$
\begin{aligned}
\lambda_\pm &= \pm 1 \\
\psi_\pm &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \pm |\downarrow\rangle)
\end{aligned} \tag{18}
$$

显然基态(环境)的本征值和本征波函数对应为

$$
\begin{aligned}
\lambda\_ &= -1 \\
\psi\_ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)
\end{aligned} \tag{19}
$$

基态的波函数可以写为

$$\begin{aligned}|G\rangle &= \sum_\tau \sum_i a_{\tau i}\big|\psi_\tau^A\big\rangle\big|\psi_i^B\big\rangle = \sum_i \big(a_{\downarrow i}|\downarrow\rangle\big|\psi_i^B\big\rangle + a_{\uparrow i}|\uparrow\rangle\big|\psi_i^B\big\rangle\big)\\ &= \psi(0)\big(a_{\downarrow 0}|\downarrow\rangle + a_{\uparrow 0}|\uparrow\rangle\big)\\ &= \psi(0)\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle\right)\\ &= \frac{\psi(0)}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{20}$$

其中 $\psi(0)$ 是系统的基态波函数。

根据 Eq. 7 可以得到量子本征微观态的关联矩阵为

$$C_{\tau\tau'}^Q = \sum_i a_{\tau i}^* a_{\tau' i} = a_{\tau 0} a_{\tau' 0} \tag{21}$$

写成矩阵形式为

$$\begin{aligned}C^Q &= \begin{pmatrix} a_{\downarrow 0}^2 & a_{\downarrow 0}a_{\uparrow 0}\\ a_{\uparrow 0}a_{\downarrow 0} & a_{\uparrow 0}^2\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -1\\ -1 & 1\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{22}$$

对应的量子本征微观态为

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \pm 1\end{pmatrix} \tag{23}$$

与相应的本征值

$$\lambda_- = 1, \lambda_+ = 0 \tag{24}$$

当 $R > 1$ 时，哈密顿量写为

$$\hat{H}_r(y_\pm) = \frac{1}{2}(R^2 - R^{-2}) + \begin{pmatrix}\pm\sqrt{R^4-1} & 1\\ 1 & \mp\sqrt{R^4-1}\end{pmatrix} \tag{25}$$

对应的本征值为

$$\begin{aligned}\big(\lambda \mp \sqrt{R^4-1}\big)\big(\lambda \pm \sqrt{R^4-1}\big) - 1 &= 0\\ \lambda^2 - (R^4 - 1) - 1 &= 0\\ \lambda^2 - R^4 &= 0\\ \Rightarrow \lambda_\pm &= \pm R^2\end{aligned} \tag{26}$$

考虑基态对应的本征波函数，首先考虑 y_+，有

Section 3: Quantum Phase Transition and Universal Dynamics in the Rabi

3.1 SECTION A : LOW-ENERGY EFFECTIVE HAMILTONIANS

3.1.a Schrieffer-Wolff (SW) transformation

一个哈密顿量 H 可以分为两部分 $H = H_0 + H'$，其中 H_0 是我们感兴趣的部分，H' 是扰动。

我们考虑一个幺正变换$U = e^S$，其中生成元S关于自旋子空间是反厄密和块非对角的。变换后的哈密顿量可以写为

$$H' = U^\dagger H U = H + [H, S] + \frac{1}{2!}[[H, S], S] + \ldots \tag{27}$$

做幺正变换的目的是让哈密顿量分块对角化，即

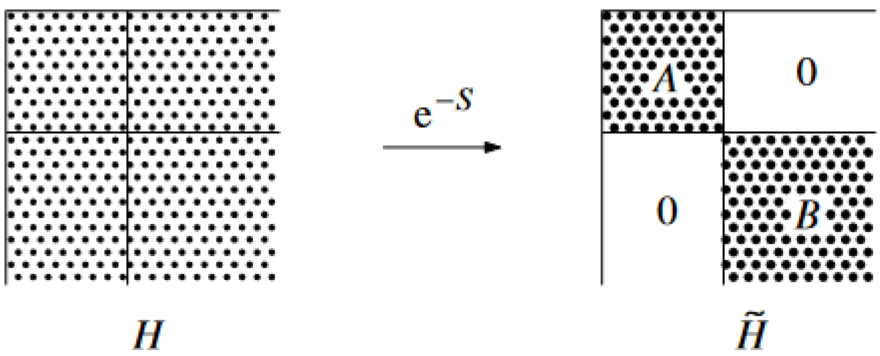

Fig. B.1. Removal of off-diagonal elements of H

而原始哈密顿量可以分为三个部分，分别是对角线部分H_0，块对角部分H_1和反对称部分H_2。

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \tag{28}$$

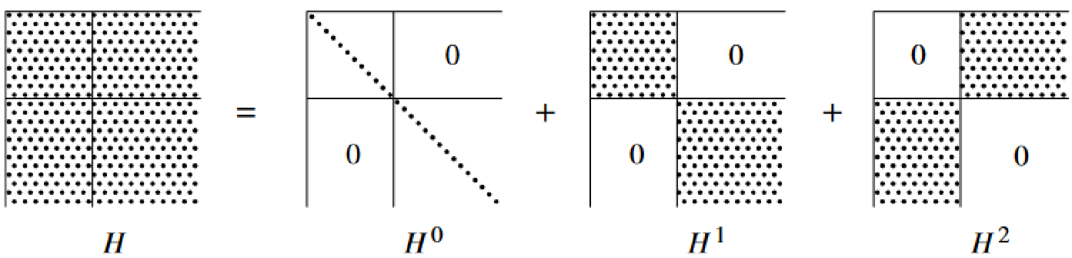

Fig. B.2. Representation of H as $H^0 + H^1 + H^2$

为了满足e^S的幺正性质，我们要求S是反厄密的，即$S^\dagger = -S$。我们可以通过级数展开e^S的幺正性质来确定S的形式。为了确定S，我们可以通过级数展开e^S求解

$$e^S = 1 + S + \frac{1}{2!}S^2 + \frac{1}{3!}S^3 + \ldots \tag{29}$$

我们获得

$$\tilde{H} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!}[H, S]^{(j)} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!}[H_0 + H_1, S]^{(j)} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!}[H_2, S]^{(j)} \tag{30}$$

Bibliography