Уравнение Линдблада для двухуровневой системы, взаимодействующей с термостатом

Pan Vyacheslav Igorevich

1 октября 2024 г.

Аннотация

Уравнение Шредингера (5), широко применяемое для нахождения волновой функции, имеет ограниченное применение, так как, описывая изменение системы только под действием потенциальных сил, позволяет определить только чистые состояния[1] и не способно описать диссипатицию[2] квантовой системы.

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \tag{1}$$

В то же время матрица плотности может задавать как чистые, так и смешанные состояния. Уравнение Линдблада (5), рассматривоемое в данной работе, является уравнением матрицы плотности, описывающим ее эволюцию.

$$\partial_t \rho = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \rho] + \sum_i \gamma_i (\hat{L}_i \rho \hat{L}^\dagger - \frac{1}{2}[\hat{L}_i^\dagger \hat{L}_i, \rho]) \tag{2}$$

1 Введение

Введем некоторые постулаты квантовой механики для чистых состояний.

Постулат 1. С любой закрытой квантовой системой связано конечномерное или бесконечномерное Гильбертово пространство[3] $\mathscr{H}$ *над полем комплексных чисел, которому принадлежит вектор состояний* ($|\psi\rangle \in \mathscr{H}$)*.*

Состояния системы, описываемые векторами состояний называют чистыми. Зная вектор состояния системы, мы владеем наибольшей возможной информацией о ней. Вектор состояния Ψ в нотации Дирака можно записать как

$$\Psi = \sum_i a_i |\psi_i\rangle \tag{3}$$

где ψ_i — возможное состояние системы, a_i — амплитуда вероятности нахождения системы в состоянии с индексом i. Так как суммарная вероятность всех состояний должна ровняться единице,

$$\sum_i a_i^2 = 1 \tag{4}$$

В случае, если мы не владеем полным представлением о состоянии системы, мы говорим, что она находится в смешанном состоянии. Как было сказанно выше, для описания смешанных систем используется оператор ρ, принадлежащий Гильбертову пространству, называемый матрицей плотности (или оператором плотности) и задается как

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \tag{5}$$

где p_i является вероятностью нахождения состояния ψ_i, а $|\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ — соответствующий оператор проекции. След матрицы плотности равен 1 по условию нормировки (Tr[ρ]=1), а сама матрица должна быть положительна, по определению вероятности ($\rho > 1$).

[1] Полностью известное квантовое состояние.
[2] Необратимая потеря энергии.
[3] Линейное пространство, в котором норма порождается скалярным произведеднием.

В силу утверждения (4) случае если $Tr[\rho^2] = Tr[\rho] = 1$ мы считаем состояние чистым. В случае $tr[\rho^2] < 1$ состояние смешанное. Матрица плотности представляет собой квадратную матрицу размерности $N \times N$, где N — количество базисных векторов соответствующего Гильбертова пространства.

Постулат 2.Пусть до измерения система находилась в чистом состоянии ψ. В результате измерения микросистема переходит в одно из состояний различимых макроприборомю Согласно постулату 1, каждому такому состоянию соответствует векто $|\varphi_i\rangle$. Тогда вектор состояний $|\psi\rangle$ можно записать как линейнуюю суперпозицию по набору состояний $|\varphi_i\rangle$:

$$|\psi\rangle = c_i \sum_i |\varphi_i\rangle \tag{6}$$

где c_i - набор комплексных чисел, которые определяются с помощью скалярного произведения

$$c_i = \langle\varphi_i|\psi_i\rangle \tag{7}$$

Постулат 3. Эволюция чистых состояний закрытой квантовой системы описываетя уравнением Шредингера.

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{8}$$

Если нам известно, что в точке t = 0 система находится в состоянии $|\psi(0)\rangle$, то переходя в систему единиц измерения, в которой $\hbar = 1$, формальное решение уравнения Шредингера можно представить в виде:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\psi(0)\rangle \tag{9}$$

Постулат 4. Пространство состояний составной системы, состоящей из N числа подсистем, является тензорным произведением всех ее компонентов $\mathscr{H} = \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2 \otimes ... \otimes \mathscr{H}_N$. Если подсистема принадлежащая Гильбертову пространству приготовлена в состоянии $|\psi_i\rangle$, то ее пространство состояний будет иметь вид $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes ... \otimes |\psi_N\rangle$. В случае составной системы ее конечное смешанное состояние будет иметь вид $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2 \otimes ... \otimes \rho_N$. Взаимозависимые состояния зовуться запутанными.

Пусть существует система $\mathscr{H} = \mathscr{H}_\alpha \otimes \mathscr{H}_\beta$. Для описания состояния подсистемы α необходимо определить матрицу плотности соответствующую этой подсистеме ρ_α. Для этого запишем матрицу плотности системы

$$\rho = \sum_{i,j,k,l} |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j| \otimes |\beta_k\rangle\langle\beta_l| \tag{10}$$

Заметим, что если взять след матрицы по базису β, то, воспользовавшись свойством следа, получим

$$Tr_\beta[\rho] = Tr_\beta\left[\sum_{i,j,k,l} |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j| \otimes |\beta_k\rangle\langle\beta_l|\right] = \sum_{i,j} |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j| \, Tr\left[\sum_{k,l} |\beta_k\rangle\langle\beta_l|\right] \equiv \rho_\alpha, \tag{11}$$

$Tr_\beta[\rho]$ принято называть частичным следом по базису β, а ρ_α — редуцированной матрицей плотности.

Постулат 5. Согласно представлению Шредингера о квантовой механике, эволюция квантовой системы описывается изменяющимся во времени вектором состояния. Тогда изменение вектора состояния $|\psi(t)\rangle$ системы можно описать действием на него некого унитарного оператора $\hat{U}(t)$, зависящего от времени, тогда

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \tag{12}$$

По определению

$$\rho(t) = \sum_i p_i \left|\psi_i(t)\right\rangle \left\langle\psi_i(t)\right| \tag{13}$$

тогда,

$$\rho(t) = \sum_i p_i \left|\psi_i(t)\right\rangle \left\langle\psi_i(t)\right| = \sum_i p_i \hat{U}(t) \left|\psi_i(0)\right\rangle \left\langle\psi_i(0)\right| \hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}(t)\rho(0)\hat{U}^\dagger(t) \tag{14}$$

Деференцируя полученное выражение (12) по времени по правули (9) получим

$$\begin{aligned} d_t\rho(t) &= \sum_i p_i \left[d_t \left|\psi(t)\right\rangle \left\langle\psi(t)\right| + \left|\psi(t)\right\rangle d_t \left\langle\psi(t)\right|\right] \\ &= \sum_i p_i \left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H} \left|\psi(t)\right\rangle \left\langle\psi(t)\right| + \left|\psi(t)\right\rangle \left\langle\psi(t)\right| \frac{i}{\hbar}\hat{H}\right] \\ &= -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}\rho(t) - \rho(t)\hat{H}\right] = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \rho(t)\right] \equiv \hat{L}\rho(t) \end{aligned} \tag{15}$$

Полученное Уравнение называют уравнением фон Неймана или квантовым уравнением Лиувилля. Оператор $\hat{L}$ называют супероператором Лиувилля или просто Лиувиллианом. В случае, если Гамильтониан системы $\hat{H}$ не зависит от времени решение такого уравнения фон Неймана можно записать в виде

$$\rho(t) = \hat{U}(t)\ \rho(0)\ \hat{U}^\dagger(t), \tag{16}$$

где $\hat{U}(t) = e^{\frac{-i(t-t_0)\hat{H}}{\hbar}}$.

2 Описание эволюции двухуровневой системы во времени

Пусть $|0\rangle$ и $|1\rangle$ являются собственными состояниями Гамильтониана $\hat{H}$. Тогда эволюция изолированной системы состоящей из одного кубита будет описываться

$$\hat{H} = E_0 |0\rangle \langle 0| + E_1 |1\rangle \langle 1| \tag{17}$$

Если кубит в момент времени $\mathrm{t} = 0$ находился в состоянии $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$, состояние в произвольный момент времени t будет соответствовать уравнению $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |1\rangle = e^{-iE_1 t} |1\rangle$. Эволюцию системы в таком случае можно описать добавлением фазы к состоянию получая

$$\hat{H} = E |1\rangle \langle 1| , \tag{18}$$

где, $E \equiv E_1$. Подставив выражеие (18) в уравнение фон Неймана (15), мы получим график распределение вероятности (Рис. 1)

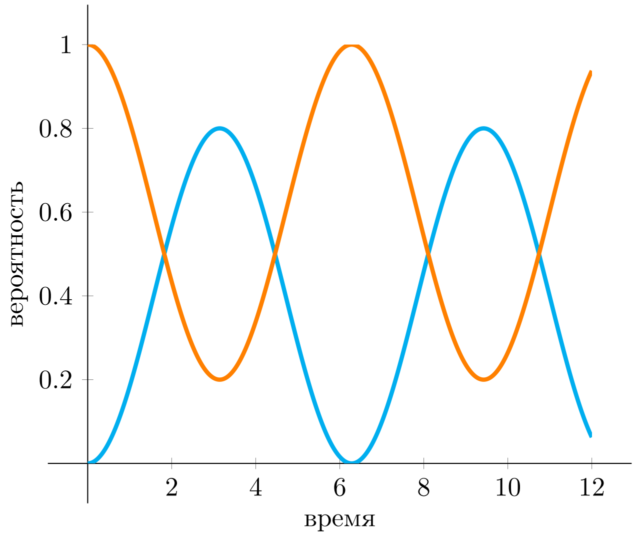

Рис. 1: Распределение вероятностей между двумя состояниями кубита