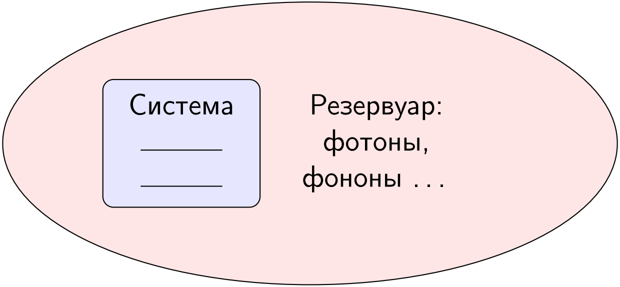
# Основы теории открытых квантовых систем. Лекция 1. Введение. Уровни описания открытых систем. Состояния и наблюдаемые в квантовой механике

Теретёнков Александр Евгеньевич

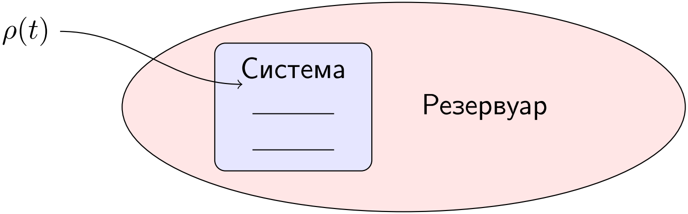
10 сентября 2024 г.

# О чём курс? Уровни описания открытых систем



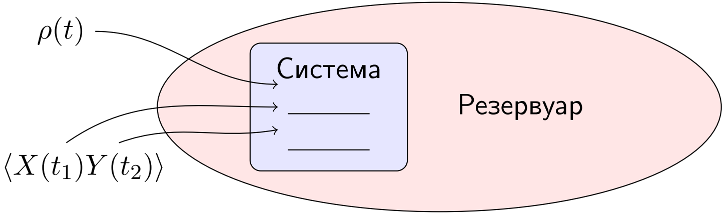

От резервуара мы хотим избавиться.

## О чём курс? Уровни описания открытых систем



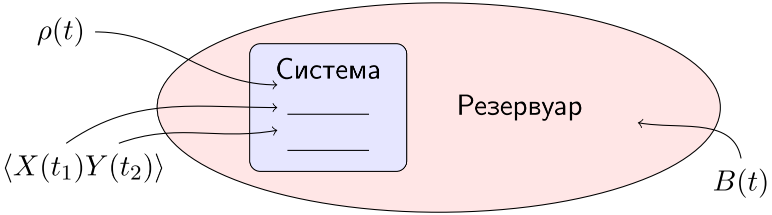

1. Уровень одновременной динамики.

# О чём курс? Уровни описания открытых систем




1. Уровень одновременной динамики.
2. Уровень многовременных корреляций.

# О чём курс? Уровни описания открытых систем




1. Уровень одновременной динамики.
2. Уровень многовременных корреляций.
3. Уровень динамики системы и резервуара.

# О чём курс? Марковское приближение

1. Уравнение Горини – Коссаковского – Сударшана – Линдблада

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H, \rho(t)] + \mathcal{D}(\rho(t)),$$

$$\mathcal{D}(\rho) \equiv \sum_j \left( C_j \rho C_j^\dagger - \frac{1}{2}\{C_j^\dagger C_j, \rho\} \right),$$

где $H$ — самосопряжённый оператор (гамильтониан),
$\mathcal{D}(\rho)$ — диссипатор,
$C_j$ — произвольные операторы,
$[X, Y] \equiv XY - YX$,
$\{X, Y\} \equiv XY + YX$.
Предполагается выбор единиц измерения так, что постоянная Планка $\hbar = 1$.

# О чём курс? Марковское приближение

1. Уравнение Горини – Коссаковского – Сударшана – Линдблада
2. Обобщённая регрессионная формула.
   $t_N \geqslant \dots \geqslant t_1 \geqslant 0$
   $$\langle Y^{(0)}(0) \cdot \ldots \cdot Y^{(N)}(t_N) X^{(N)}(t_N) \cdot \ldots \cdot X^{(0)}(0) \rangle =$$
   $$= \mathrm{Tr}_S \, X^{(N)} \Phi_{t_N - t_{N-1}}(\ldots X^{(1)} \Phi_{t_1}(X^{(0)} \rho Y^{(0)}) Y^{(1)} \ldots) Y^{(N)},$$
   где $\rho_t = \Phi_t \rho_0$.

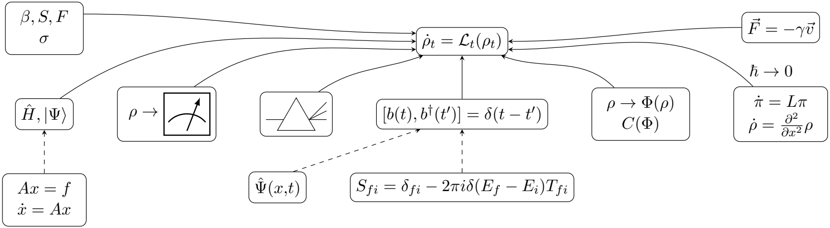
# О чём курс? Марковское приближение

1. Уравнение Горини – Коссаковского – Сударшана – Линдблада
2. Обобщённая регрессионная формула.
3. Квантовые стохастические дифференциальные уравнения.

$$dU(t) = \Bigg[-i\Bigg(H - \frac{i}{2}\sum_j L_j^\dagger L_j\Bigg)dt +$$

$$+\sum_j \Big(L_j^\dagger W_j dB_j(t) - L_j dB_j^\dagger(t) + (I - W_j)d\Lambda_j(t)\Big)\Bigg]U(t)$$

# Связь с другими разделами физики и математики



# Напоминание квантовой механики и линейной алгебры

Начнём с напоминания...

# Чистые состояния

**Как задаются *чистые* состояния?**

# Чистые состояния

$\mathcal{H}$ — гильбертово пространства на полем $\mathbb{C}$.

$$|\Psi\rangle \in \mathcal{H} : ||\Psi|| = 1,$$

где $||\Psi|| \equiv \sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle}$.

Предполагается, что $|\Psi\rangle$ и $e^{i\alpha}|\Psi\rangle$ соответствует одно и то же состояние, поэтому чистые состояния — элементы *проективного гильбертова пространства*.

# Чистые состояния

Для простоты сконцентрируемся на случае $\dim \mathcal{H} = n < \infty$. В этом случае с точностью до изоморфизма

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \vdots \\ \Psi_n \end{pmatrix}, \qquad \langle \Psi| = \begin{pmatrix} \overline{\Psi}_1 \dots \overline{\Psi}_n \end{pmatrix}$$

$$||\Psi||^2 = \langle \Psi|\Psi\rangle = |\Psi_1|^2 + \dots + |\Psi_n|^2$$

**Как задаются *смешанные* состояния?**

# Смешанные состояния

$\rho \in \mathbb{C}^{n\times n}$

1. $\rho^\dagger = \rho$
2. $\rho \geqslant 0$
3. $\operatorname{Tr}\rho = 1$

Что значит $\rho \geqslant 0$?

$$\langle v|\rho|v\rangle \geqslant 0, \qquad \forall |v\rangle \in \mathcal{H}$$

Эквивалентно все собственные числа неотрицательны.

**Какие матрицы плотности соответствуют чистым состояниям?**

# Смешанные состояния

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

В базисе

$$\rho = \begin{pmatrix} |\Psi_1|^2 & \overline{\Psi}_1\Psi_2 & \dots & \overline{\Psi}_1\Psi_n \\ \overline{\Psi}_2\Psi_1 & |\Psi_2|^2 & \dots & \overline{\Psi}_2\Psi_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \overline{\Psi}_n\Psi_1 & \overline{\Psi}_n\Psi_2 & \dots & |\Psi_n|^2 \end{pmatrix}$$

## Смешанные состояния

В общем случае эрмитову матрицу можно диагонализовать

$$\rho = \sum_i p_i |e_i\rangle\langle e_i|,$$

где $|e_i\rangle$ — собственные вектора, $p_i$ — собственные значения матрицы $\rho$.
Более того, 2 ведёт к

$$p_i \geqslant 0,$$

а из 3:

$$\sum_i p_i = 1.$$

# Смешанные состояния

В общем случае

$$\sum_i p_i A_i, \qquad p_i \geqslant 0, \sum_i p_i = 1$$

называется *выпуклой комбинацией*.
На выпуклую комбинацию можно смотреть как на математическое ожидание

$$\sum_i p_i A_i = \mathbb{E}_p A$$

В частности, это позволяет интерпретировать смешанное состояние $\rho$ как случайное чистое состояние.

# Смешанные состояния

Если фиксировать базис и рассматривать только диагональные матрицы в этом базисе

$$\begin{pmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & p_n \end{pmatrix}$$

то такие матрицы соответствуют классическим распределениям $p_i$. Так классическая теория вероятности вкладывается в квантовую.

В общем случае произвольного базиса $\rho_{ii}$ — населённости (уровня, узла) = population, $\rho_{ij}$ — когерентности между (уровнями, узлами) $i$ и $j$.

**Как определить функцию от диагонализуемой матрицы?**

## Функции от матриц

$$f(\rho) = \sum_i f(p_i)|e_i\rangle\langle e_i|,$$

Кроме того, отметим, что

$$\operatorname{Tr} f(\rho) = \sum_i f(p_i)$$

# Функции от матриц

В случае, если ряд Тейлора функции $f$ существует и сходится в круге с центром в точке $0$, то можно дать другое определение (не требующее диагонализуемости)

$$f(\rho) = \sum_j \frac{f^{(j)}(0)}{j!} \rho^j,$$

где $\rho^j = \rho \cdot \ldots \cdot \rho$ понимается в смысле умножения матриц. Эти определения совпадают. В частности если $\rho = \sum_i p_i |e_i\rangle\langle e_i|$, то

$$\rho^j = \sum_i p_i^j |e_i\rangle\langle e_i|.$$

# Функции от матриц

$\operatorname{Tr}\rho^2$ называется *чистотой (purity)*.
**Упражнение** $\operatorname{Tr}\rho^2 \leqslant 1$ и $\operatorname{Tr}\rho^2 = 1 \Leftrightarrow \rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$.
Ещё одна важная величина — энтропия фон Неймана

$$S = -\operatorname{Tr}\rho\ln\rho = -\sum_i p_i \ln p_i$$

Справа стоит классическое (не квантовое) определение. Важна в физике.

# Функции от матриц

Вообще можно ввести энтропии Реньи

$$S_\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \ln \operatorname{Tr} \rho^\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \ln \sum_i p_i^\alpha$$

**Упражнение**

$$\lim_{\alpha \to 1} S_\alpha = S$$

— энтропия Шенона.

$$\lim_{\alpha \to +0} S_\alpha = \ln \#\{i : p_i \neq 0\} = \ln \dim \operatorname{supp} \rho$$

— энтропия Хартли.

# Некоторые специальные состояния

Хаотическое состояние (Характерно для конечномерных г.п.)

$$\rho = \frac{I}{n}$$

Далее мы будем задавать динамику системы с помощью гамильтониана $H = H^\dagger$. Если $H \geqslant 0$ и состояние $|0\rangle$ такое, что $H|0\rangle = 0$ единственно, то его можно называть вакуумным или основным (graund state) состоянием.

**Какое смешанное состояние играет центральную роль в статистической физике?**

# Некоторые специальные состояния

Гиббсовское состояние

$$\rho_\beta = \frac{e^{-\beta H}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}}$$

где $\beta$ — обратная температура. $Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}$ — статистическая сумма.
Если $H = \sum_{i=0}^{N-1} \varepsilon_i |i\rangle\langle i|$, то $\rho = \frac{1}{Z}\sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}|i\rangle\langle i|$, $Z = \sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}$.
**Упражнение**

$$\lim_{\beta\to+0}\rho_\beta \to ? \qquad \lim_{\beta\to+\infty}\rho_\beta \to ?$$

# Наблюдаемые

(Чёткие) наблюдаемые — эрмитовы матрицы в $\mathcal{H}$.
Каково средние значение? (Статистический постулат Борна - фон Неймана) Пусть $X$— (чёткая) наблюдаемая, тогда

$$\langle X \rangle = \mathrm{Tr}\, X\rho$$

— статистический постулат Борна - фон Неймана.
В частности, если $[X, \rho] = 0$, то приходим к формуле из классической теории вероятностей

$$\langle X \rangle = \sum_i x_i p_i$$

# Наблюдаемые

С какой вероятностью мы получаем значения? Для этого необходимо разложить

$$X = \sum_x x \Pi_x$$

$$\Pi_x = \sum_{i: x_i = x} |i\rangle\langle i|$$

Вероятность получить значение $x$ наблюдаемой равна

$$\mu_\rho(x) = \operatorname{Tr} \Pi_x \rho$$

В частности, если $[X, \rho] = 0$, то получим классический ответ

$$\mu_p(x) = \sum_{i: x_i = x} p_i$$

# Наблюдаемые

Отметим, что операторы $\Pi_x$ обладают свойствами

1. $\Pi_x \geqslant 0$
2. $\Pi_x \Pi_y = \delta_{xy} \Pi_x$
3. $\sum_x \Pi_x = I$

поэтому будем говорить об ортогональном разложении единицы.