Декогеренция и производство энтропии в марковских открытых квантовых систем

А. С. Трушечкин

Конференция «Декабрьские чтения»

23 декабря 2017 г.

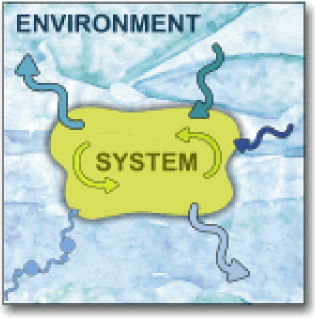
Изолированные квантовые системы

- Квантовая система — гильбертово пространство $\mathscr{H}$ (напр., $\mathbb{C}^d$)
- Квантовое состояние — положительный оператор (матрица плотности) $\rho \geqslant 0$, $\operatorname{Tr} \rho = 1$
- Динамика: ρ_t,
  уравнение фон Неймана (квантовое уравнение Лиувилля)

  $$\dot{\rho}_t = -i[H, \rho_t],$$

  H — гамильтониан (самосопряжённый оператор в $\mathscr{H}$),
  $[A, B] = AB - BA$.

Динамика открытых квантовых систем



Уравнение Линдблада:

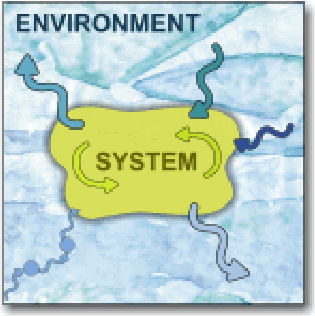
$$\dot{\rho}_t = -i[H, \rho_t] + \sum_k \left(L_k \rho_t L_k^* - \frac{1}{2}\{\rho_t, L_k^* L_k\} \right),$$

где

$$[A, B] = AB - BA,$$

$$\{A, B\} = AB + BA.$$

Динамика открытых квантовых систем



Уравнение Линдблада:

$$\dot{\rho}_t = -i[H, \rho_t] + \sum_k \left(L_k \rho_t L_k^* - \frac{1}{2}\{\rho_t, L_k^* L_k\} \right),$$

где

$$[A, B] = AB - BA,$$

$$\{A, B\} = AB + BA.$$

Строгий вывод: Davies (1974),
Accardi, Lu, Volovich "Quantum Theory and Its Stochastic Limit" (2002),
И.В. Волович, С.В. Козырев, А.Н. Печень.

Уравнение Линдблада

$$\dot{\rho}_t = -i[H, \rho_t] + \sum_{k=1}^{K} \left(L_k \rho_t L_k^\dagger - \frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k, \rho_t\} \right) \equiv \mathcal{L}(\rho_t),$$

Уравнение Линдблада

$$\dot{\rho}_t = -i[H, \rho_t] + \sum_{k=1}^{K} \left(L_k \rho_t L_k^\dagger - \frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k, \rho_t\} \right) \equiv \mathcal{L}(\rho_t),$$

Боровские частоты: $\Omega = \{\varepsilon' - \varepsilon |\, \varepsilon, \varepsilon' \in \operatorname{spec} H,\ \varepsilon \neq \varepsilon'\}$

$$L_k = \sum_{\varepsilon, \varepsilon' \in \operatorname{spec} H:\, \varepsilon' - \varepsilon = \omega_k} P_\varepsilon L_k P_{\varepsilon'},$$

Вопросы

$$\dot{\rho}_t = -i[H, \rho_t] + \sum_{k=1}^{K} \left(L_k \rho_t L_k^\dagger - \frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k, \rho_t\} \right) \equiv \mathcal{L}(\rho_t),$$

1. Каковы стационарные состояния?
2. Декогеренция: верно ли, что $P_\varepsilon \rho_t P_{\varepsilon'} \to 0$, $\varepsilon \neq \varepsilon'$, при $t \to \infty$?

Теорема

Пусть для любой пары векторов ϕ, φ *существуют (возможно повторяющиеся) операторы Линдблада* $L_{k_1}, \ldots, L_{k_n}$*, что*

$$(\varphi, L_{k_1}, \ldots, L_{k_n}\psi) \neq 0$$

Тогда имеет место декогеренция:
$P_\varepsilon \rho_t P_{\varepsilon'} \to 0$ *при* $t \to \infty$, $\varepsilon \neq \varepsilon'$.

Теорема

Пусть для любой пары векторов ϕ, φ существуют (возможно повторяющиеся) операторы Линдблада $L_{k_1}, \ldots, L_{k_n}$, что

$$(\varphi, L_{k_1}, \ldots, L_{k_n}\psi) \neq 0$$

Тогда имеет место декогеренция:
$P_\varepsilon \rho_t P_{\varepsilon'} \to 0$ *при* $t \to \infty$, $\varepsilon \neq \varepsilon'$.

Идея доказательства (для невырожденного спектра):

$$\dot{\rho}_{\varepsilon\varepsilon'} = \sum_\omega \rho_{\varepsilon+\omega,\varepsilon'+\omega} \left(\sum_k L^k_{\varepsilon,\varepsilon+\omega} \overline{L^k_{\varepsilon',\varepsilon'+\omega}} \right) - \rho_{\varepsilon\varepsilon'} \sum_{k,\omega} \frac{|L^k_{\varepsilon-\omega,\varepsilon}|^2 + |L^k_{\varepsilon'-\omega,\varepsilon'}|^2}{2}$$

Динамика внедиагональной части оператора плотности не зависит от диагональной,

Теорема

Пусть для любой пары векторов ϕ, φ существуют (возможно повторяющиеся) операторы Линдблада $L_{k_1}, \ldots, L_{k_n}$, что

$$(\varphi, L_{k_1}, \ldots, L_{k_n}\psi) \neq 0$$

Тогда имеет место декогеренция:
$P_\varepsilon \rho_t P_{\varepsilon'} \to 0$ *при* $t \to \infty$, $\varepsilon \neq \varepsilon'$.

Идея доказательства (для невырожденного спектра):

$$\dot{\rho}_{\varepsilon\varepsilon'} = \sum_\omega \rho_{\varepsilon+\omega,\varepsilon'+\omega} \left(\sum_k L^k_{\varepsilon,\varepsilon+\omega} \overline{L^k_{\varepsilon',\varepsilon'+\omega}} \right) - \rho_{\varepsilon\varepsilon'} \sum_{k,\omega} \frac{|L^k_{\varepsilon-\omega,\varepsilon}|^2 + |L^k_{\varepsilon'-\omega,\varepsilon'}|^2}{2}$$

Динамика внедиагональной части оператора плотности не зависит от диагональной,

$$L^k_{\varepsilon-\omega,\varepsilon} \overline{L^k_{\varepsilon'-\omega,\varepsilon'}} \leqslant \frac{|L^k_{\varepsilon-\omega,\varepsilon}|^2 + |L^k_{\varepsilon'-\omega,\varepsilon'}|^2}{2}$$

Теорема

Пусть для любой пары векторов ϕ, φ существуют (возможно повторяющиеся) операторы Линдблада $L_{k_1}, \ldots, L_{k_n}$, что

$$(\varphi, L_{k_1}, \ldots, L_{k_n}\psi) \neq 0$$

Тогда имеет место декогеренция:
$P_\varepsilon \rho_t P_{\varepsilon'} \to 0$ *при* $t \to \infty$, $\varepsilon \neq \varepsilon'$.

Идея доказательства (для невырожденного спектра):

$$\dot{\rho}_{\varepsilon\varepsilon'} = \sum_\omega \rho_{\varepsilon+\omega,\varepsilon'+\omega} \left(\sum_k L^k_{\varepsilon,\varepsilon+\omega} \overline{L^k_{\varepsilon',\varepsilon'+\omega}} \right) - \rho_{\varepsilon\varepsilon'} \sum_{k,\omega} \frac{|L^k_{\varepsilon-\omega,\varepsilon}|^2 + |L^k_{\varepsilon'-\omega,\varepsilon'}|^2}{2}$$

Динамика внедиагональной части оператора плотности не зависит от диагональной,

$$L^k_{\varepsilon-\omega,\varepsilon} \overline{L^k_{\varepsilon'-\omega,\varepsilon'}} \leqslant \frac{|L^k_{\varepsilon-\omega,\varepsilon}|^2 + |L^k_{\varepsilon'-\omega,\varepsilon'}|^2}{2}$$

$$\dot{\rho}_{(i)} = \sum_j q^+_{ij} \rho_{(j)} - \sum_j q^-_{ji} \rho_{(i)},$$

$\forall (i)\ \sum_j |q^+_{ji}| < \sum_j q^-_{ji}$. Функция Ляпунова $\sum_{(i)} |\rho_{(i)}|$.

Следствие

В условиях теоремы нахождение стационарных состояний для систем с невырожденным спектром и связным графом сводится к нахождению стационарных состояний классической цепи Маркова. Стационарное состояние единственно, есть явная формула (на основе теории графов).

Нахождение стационарных состояний с помощью исследования функционала производства энтропии

Уравнение Линдблада

$$\dot{\rho}_t = -i[H, \rho_t] + \sum_{k=1}^{K} \left(L_k \rho_t L_k^\dagger - \frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k, \rho_t\} \right) \equiv \mathcal{L}(\rho_t),$$

Боровские частоты: $\Omega = \{\varepsilon' - \varepsilon | \, \varepsilon, \varepsilon' \in \operatorname{spec} H, \, \varepsilon \neq \varepsilon'\}$

$$L_k = \sum_{\varepsilon, \varepsilon' \in \operatorname{spec} H \colon \varepsilon' - \varepsilon = \omega_k} P_\varepsilon L_k P_{\varepsilon'}.$$

Для каждого k существует $\tilde{k}$:

$$\begin{aligned} \omega_{\tilde{k}} &= -\omega_k, \\ L_{\tilde{k}} &= \sqrt{\pi_k} L_k^\dagger, \\ \pi_{\tilde{k}} &= \pi_k^{-1}, \\ \tilde{\tilde{k}} &= k. \end{aligned}$$

Тепловой резервуар с обратной температурой β: $\pi_k = e^{-\beta\omega_k}$

Производство энтропии

$$\Pi(\rho_t) = -\frac{d}{dt}S(\rho_t) + \sum_k \operatorname{Tr} L_k^\dagger L_k \rho_t \ln \pi_k^{-1} =$$

$$= -\operatorname{Tr} \mathcal{L}(\rho_t) \ln \rho_t + \sum_k \operatorname{Tr} L_k^\dagger L_k \rho_t \ln \pi_k^{-1},$$

где $S(\rho) = -\operatorname{Tr} \rho \ln \rho$ (энтропия фон Неймана), $L_{\tilde{k}} = \sqrt{\pi_k} L_k^\dagger$.

Теорема

Если $\Pi(\rho_t)$ *можно представить в виде*

$$\Pi(\rho_t) = -\frac{d}{dt}S(\rho_t \| \rho^{\mathrm{st}}) = \operatorname{Tr} \mathcal{L}(\rho_t)[\ln \rho_t - \ln \rho^{\mathrm{st}}]$$

где $S(\rho\|\sigma) = \operatorname{Tr} \rho \ln \rho - \operatorname{Tr} \rho \ln \sigma$ *(квантовая относительная энтропия),* ρ^{st} *— некоторое стационарное состояние уравнения Линдблада, то стационарность состояния* ρ *эквивалентна следующему условию:*

$$\forall k \quad L_k \rho = \rho L_k \pi_k.$$

$$\forall k \quad L_k \rho = \rho L_k \pi_k.$$

Если $\rho = \sum_i p_i P_{e_i}$, то эквивалентно:

$$\frac{p_j}{p_i} = \pi_k \qquad \forall (i, j, k): \;\; L_{ij}^k \neq 0$$

.

Спиновая цепочка с резервуарами на концах

$$H = \varepsilon_a a^\dagger a + \varepsilon_b b^\dagger b + \nu (a^\dagger b + a b^\dagger),$$

$$\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2, \quad a = |0\rangle\langle 1| \otimes I, \quad b = I \otimes |0\rangle\langle 1|, \quad |0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Спиновая цепочка с резервуарами на концах

$$H = \varepsilon_a a^\dagger a + \varepsilon_b b^\dagger b + \nu(a^\dagger b + a b^\dagger),$$

$$\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2, \quad a = |0\rangle\langle 1| \otimes I, \quad b = I \otimes |0\rangle\langle 1|, \quad |0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon_{00} = 0, \quad |e_{00}\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle,$$

$$\varepsilon_{01} = \frac{1}{2}\left(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \sqrt{\Delta\varepsilon + 4\nu^2}\right), \quad |e_{01}\rangle = \cos\alpha\, |0\rangle \otimes |1\rangle - \sin\alpha\, |1\rangle \otimes |0\rangle,$$

$$\varepsilon_{10} = \frac{1}{2}\left(\varepsilon_a + \varepsilon_b + \sqrt{\Delta\varepsilon + 4\nu^2}\right), \quad |e_{10}\rangle = \cos\alpha\, |1\rangle \otimes |0\rangle + \sin\alpha\, |0\rangle \otimes |1\rangle,$$

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_a + \varepsilon_b, \quad |e_{11}\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle,$$

где $\Delta\varepsilon = \varepsilon_a - \varepsilon_b$, $\alpha = \operatorname{arctg} \frac{2\nu}{\Delta\varepsilon}$. Боровские частоты:

$$\omega_a = \varepsilon_{11} - \varepsilon_{01} = \varepsilon_{10} - \varepsilon_{00} = \frac{1}{2}\left(\varepsilon_a + \varepsilon_b + \sqrt{\Delta\varepsilon + 4\nu^2}\right),$$

$$\omega_b = \varepsilon_{11} - \varepsilon_{10} = \varepsilon_{01} - \varepsilon_{00} = \frac{1}{2}\left(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \sqrt{\Delta\varepsilon + 4\nu^2}\right),$$

а также $-\omega_a$ и $-\omega_b$.

Спиновая цепочка с резервуарами на концах

$$H_I^A = (a + a^\dagger) \otimes R_A, \quad H_I^B = (b + b^\dagger) \otimes R_B$$

Каждый спин взаимодействует со своим резервуаром со своей температурой, неравновесная система.

Спиновая цепочка с резервуарами на концах

$$H_I^A = (a + a^\dagger) \otimes R_A, \quad H_I^B = (b + b^\dagger) \otimes R_B$$

Каждый спин взаимодействует со своим резервуаром со своей температурой, неравновесная система.

$$\dot{\rho}_t = -i[H, \rho_t] + \sum_{R=A,B} \sum_{f=a,b} \gamma_{Rf} \mathcal{D}_{Rf}(\rho_t),$$

где $\gamma_{Rf} > 0$,

$$\mathcal{D}_{Rf}(\rho_t) = L_{Rf} \rho_t L_{Rf}^\dagger - \frac{1}{2}\{L_{Rf}^\dagger L_{Rf}, \rho_t\} + e^{-\beta_R \omega_f} \left(L_{Rf}^\dagger \rho_t L_{Rf} - \frac{1}{2}\{L_{Rf} L_{Rf}^\dagger, \rho_t\} \right),$$

$$\begin{aligned}
L_{Aa} &= \cos\alpha(|e_{01}\rangle \langle e_{11}| + |e_{00}\rangle \langle e_{10}|), \\
L_{Ab} &= \sin\alpha(|e_{10}\rangle \langle e_{11}| - |e_{00}\rangle \langle e_{01}|), \\
L_{Ba} &= \sin\alpha(-|e_{01}\rangle \langle e_{11}| + |e_{00}\rangle \langle e_{10}|), \\
L_{Bb} &= \cos\alpha(|e_{10}\rangle \langle e_{11}| + |e_{00}\rangle \langle e_{01}|).
\end{aligned}$$

Спиновая цепочка с резервуарами на концах

$$\dot{\rho}_t = -i[H, \rho_t] + \sum_{R=A,B} \sum_{f=a,b} \gamma_{Rf} \mathcal{D}_{Rf}(\rho_t),$$

$$\mathcal{D}_{Rf}(\rho_t) = L_{Rf} \rho_t L_{Rf}^\dagger - \frac{1}{2}\{L_{Rf}^\dagger L_{Rf}, \rho_t\} + e^{-\beta_R \omega_f} \left(L_{Rf}^\dagger \rho_t L_{Rf} - \frac{1}{2}\{L_{Rf} L_{Rf}^\dagger, \rho_t\} \right),$$

$$L_{Aa} = \cos\alpha(|e_{01}\rangle \langle e_{11}| + |e_{00}\rangle \langle e_{10}|),$$
$$L_{Ab} = \sin\alpha(|e_{10}\rangle \langle e_{11}| - |e_{00}\rangle \langle e_{01}|),$$
$$L_{Ba} = \sin\alpha(- |e_{01}\rangle \langle e_{11}| + |e_{00}\rangle \langle e_{10}|),$$
$$L_{Bb} = \cos\alpha(|e_{10}\rangle \langle e_{11}| + |e_{00}\rangle \langle e_{01}|).$$

Утверждение. Стационарное состояние единственно:

$$\rho^{\mathrm{st}} = Z^{-1}(P_{00} + \pi_b P_{01} + \pi_a P_{10} + \pi_a \pi_b P_{11}),$$

$$Z = (1 + \pi_a + \pi_b + \pi_a \pi_b), \qquad \pi_a = \gamma_a^+ / \gamma_a^-, \qquad \pi_b = \gamma_b^+ / \gamma_b^-,$$

$$\gamma_a^- = \gamma_{Aa} \cos^2\alpha + \gamma_{Ba} \sin^2\alpha, \quad \gamma_a^+ = \gamma_{Aa} e^{-\beta_A \omega_a} \cos^2\alpha + \gamma_{Ba} e^{-\beta_B \omega_a} \sin^2\alpha,$$
$$\gamma_b^- = \gamma_{Bb} \cos^2\alpha + \gamma_{Ab} \sin^2\alpha, \quad \gamma_b^+ = \gamma_{Bb} e^{-\beta_B \omega_b} \cos^2\alpha + \gamma_{Ab} e^{-\beta_A \omega_b} \sin^2\alpha.$$