Πιο γενική περίπτωση

Διμερές σύστημα $\underbrace{\Sigma}_{\text{υποσύστημα που μας ενδιαφέρει}} \cup \overbrace{\Pi}^{\text{περιβάλλον}}$ ⇒ κλειστό

$\hat{U}_{\Sigma\Pi}(t)$: μοναδιακός τελεστής χρονικής εξέλιξης του $\Sigma \cup \Pi$

$$|\psi_{\Sigma\Pi}(t)\rangle = \hat{U}_{\Sigma\Pi}(t)|\psi_{\Sigma\Pi}(0)\rangle$$

Υπόθεση 1: Το $\Sigma \cup \Pi$ τη χρονική στιγμή $t=0$ βρίσκεται στην καθαρή κατάσταση $|\psi_{\Sigma\Pi}(0)\rangle$

Τότε: $\hat{\rho}_{\Sigma\Pi}(0) = |\psi_{\Sigma\Pi}(0)\rangle\langle\psi_{\Sigma\Pi}(0)|$

και $\hat{\rho}_{\Sigma\Pi}(t) = \hat{U}_{\Sigma\Pi}(t)\,\hat{\rho}_{\Sigma\Pi}(0)\,\hat{U}^{+}_{\Sigma\Pi}(t)$

Υπόθεση 2: Τα Σ και Π δεν είναι εναγκαλισμένα την χρονική στιγμή $t=0$: $\hat{\rho}_{\Sigma\Pi}(0) = \hat{\rho}_{\Sigma}(0) \otimes \hat{\rho}_{\Pi}(0)$

<u>Υπόθεση 3:</u> Το περιβάλλον Π βρίσκεται στη θεμελιώδη του κατάσταση για $t=0$:

$$\hat{\rho}_{\Pi}(0) = \underbrace{|0\rangle}_{\uparrow}\langle 0|$$

θεμελιώδης κατάσταση του Π

<u>Στόχος μας:</u> Ο υπολογισμός του ανηγμένου πίνακα πυκνότητας που αφορά το υποσύστημα Σ την χρονική στιγμή t

Προφανώς θα ισχύει:

$$\underbrace{\hat{\rho}_{\Sigma}(t)}_{\text{ανηγμένος πίνακας πυκνότητας του } \Sigma} = Tr_{\Pi}\, \overbrace{\hat{\rho}_{\Sigma\Pi}(t)}^{\text{πίνακας πυκνότητας του } \Sigma\cup\Pi}$$

Tr_{Π} → ίχνος ως προς τις καταστάσεις του Π

<u>Συμβολισμός:</u>

$$\underbrace{|\ell, M\rangle}_{\text{κατάσταση του } \Sigma\cup\Pi} = \underbrace{|\ell\rangle}_{\text{κατάσταση του } \Sigma} \otimes \underbrace{|M\rangle}_{\text{κατάσταση του } \Pi}$$

στοιχείο βάσης του χώρου Hilbert $\mathcal{H}_{\Sigma} \otimes \mathcal{H}_{\Pi}$

Το l,m στοιχείο του ανηγμένου πίνακα πυκνότητας $\hat{\rho}_\Sigma(t)$ θα δίνεται ως:

$$\left(\hat{\rho}_\Sigma(t)\right)_{l,m} = \sum_N \langle N, l | \hat{\rho}_{\Sigma\Pi}(t) | m, N \rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\hat{\rho}_\Sigma(t)\right)_{l,m} = \sum_N \langle N, l | \hat{U}_{\Sigma\Pi}(t) \underbrace{\hat{\rho}_{\Sigma\Pi}(0)}_{=\hat{\rho}_\Sigma(0)\otimes|0\rangle\langle 0|} \hat{U}^+_{\Sigma\Pi}(t) | m, N \rangle$$

Θεωρούμε ότι η $\{|l,N\rangle\}$ είναι πλήρης βάση, οπότε:

$$\left(\hat{\rho}_\Sigma(t)\right)_{l,m} = \sum_N \langle N, l | \hat{U}_{\Sigma\Pi}(t) \underbrace{\sum_{k,M} |k,M\rangle\langle M,k|}_{\hat{I}_{\Sigma\cup\Pi}=\hat{I}_\Sigma\otimes\hat{I}_\Pi} \hat{\rho}_\Sigma(0)\otimes|0\rangle\langle 0| \underbrace{\sum_{n,L} |n,L\rangle\langle L,n|}_{\hat{I}_{\Sigma\cup\Pi}} \hat{U}^+_{\Sigma\Pi}(t) | m, N \rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\hat{\rho}_\Sigma(t)\right)_{l,m} = \sum_N \sum_{k,M} \sum_{n,L} \langle N, l | \hat{U}_{\Sigma\Pi}(t) | k, M \rangle \langle k | \hat{\rho}_\Sigma(0) | n \rangle \overbrace{\langle M | 0 \rangle}^{\delta_{M,0}} \overbrace{\langle 0 | L \rangle}^{\delta_{0,L}} \langle L, n | \hat{U}^+_{\Sigma\Pi}(t) | m, N \rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\hat{\rho}_\Sigma(t)\right)_{l,m} = \sum_N \sum_{k,n} \langle N, l | \hat{U}_{\Sigma\Pi}(t) | k, 0 \rangle \langle k | \hat{\rho}_\Sigma(0) | n \rangle \langle 0, n | \hat{U}^+_{\Sigma\Pi}(t) | m, N \rangle$$

Ορίζουμε τους τελεστές: $\langle N | \hat{U}_{\Sigma\Pi}(t) | 0 \rangle$ που δρουν στον $\mathcal{H}_\Sigma$

ως: $$\hat{K}_N(t) = \langle N | \hat{U}_{\Sigma\Pi}(t) | 0 \rangle$$

οπότε ο ανηγμένος πίνακας πυκνότητας $\hat{\rho}_\Sigma(t)$ γράφεται ως:

$$\left(\hat{\rho}_\Sigma(t)\right)_{\ell,m} = \sum_N \sum_k \sum_n \left(\hat{K}_N(t)\right)_{\ell,k} \left(\hat{\rho}_\Sigma(0)\right)_{k,n} \left(\hat{K}_N^{+}(t)\right)_{n,m}$$

ή σε μορφή πινάκων:

$$\hat{\rho}_\Sigma(t) = \sum_N \hat{K}_N(t)\, \hat{\rho}_\Sigma(0)\, \hat{K}_N^{+}(t)$$

Οι τελεστές $\hat{K}_N(t)$ που καθορίζουν απεικόνιση $\Phi_t : \mathcal{B}(\mathcal{H}_\Sigma) \longrightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_\Sigma)$ (δηλ. την απεικόνιση $\hat{\rho}_\Sigma(0) \rightarrow \hat{\rho}_\Sigma(t)$) όπως έχουμε αναφέρει. λέγονται τελεστές Kraus

Ο αριθμός τους καθορίζεται (φράσσεται) από την διάσταση του χώρου $\mathcal{H}_\Sigma$:

$$\boxed{1 \leq N_{max} \leq (\dim \mathcal{H}_\Sigma)^2}$$

καθώς: $\Phi_t(a\hat{\rho}_1+b\hat{\rho}_2) = \sum_N \hat{K}_N(a\hat{\rho}_1+b\hat{\rho}_2)\hat{K}_N^+ = a\underbrace{\sum_N \hat{K}_N\hat{\rho}_1\hat{K}_N^+}_{\Phi_t(\hat{\rho}_1)} + b\underbrace{\sum_N \hat{K}_N\hat{\rho}_2\hat{K}_N^+}_{\Phi_t(\hat{\rho}_2)}$

• • • Θετικότητα: $\langle n|\Phi_t(\hat{\rho})|n\rangle \geqslant 0 \quad \forall\, |n\rangle \in \mathcal{H}_\Sigma$

και $\hat{\rho}$ θετικός

Πράγματι, αν $\hat{\rho}$ θετικός τότε: $\hat{\rho} = \sum_m \lambda_m |m\rangle\langle m|$ με $\lambda_m \geqslant 0 \ \forall m$

οπότε: $\langle n|\Phi_t(\hat{\rho})|n\rangle = \langle n|\sum_N \hat{K}_N\hat{\rho}\hat{K}_N^+|n\rangle$

$$= \sum_N\sum_m \underbrace{\langle n|\hat{K}_N\ \lambda_m|m\rangle}_{\lambda_m(\hat{K}_N)_{n,m}}\underbrace{\langle m|\hat{K}_N^+|n\rangle}_{(\hat{K}_N)^*_{n,m}} = \sum_N\sum_m \lambda_m |(\hat{K}_N)_{n,m}|^2 \geqslant 0$$

Παρατήρηση 1: Η σχέση πληρότητας $\sum_N \hat{K}_N^+\hat{K}_N = \hat{I}$ των τελεστών Kraus λέγεται και διατήρηση του ίχνους αφού εξασφαλίζει ότι: $Tr\,\hat{\rho}(t) = 1 \quad \forall t$

Παρατήρηση 2:

Επειδή μας ενδιαφέρει να είναι θετικός, όχι μόνο ο $\Phi_t(\hat{\rho})$, αλλά και οποιοσδήποτε υπερτελεστής $\Phi_t(\hat{\rho}) \otimes \underbrace{\hat{I}_R^{(k)}}_{}$ $(\forall\, k \in \mathbb{N})$

μοναδιαίος στο χώρο Hilbert $\mathcal{H}_R$ διάστασης k

θα πρέπει ο $\Phi_t(\hat{\rho})$ να είναι πλήρως θετικός υπερτελεστής.

$$\Downarrow$$

Αυστηρότερη διατύπωση θεωρήματος Kraus

Μια απεικόνιση $\Phi : B(\mathcal{H}) \to B(\mathcal{H})$ έχει αναπαράσταση Kraus

δηλ. $\Phi(\hat{\rho}) = \sum_N \hat{K}_N \hat{\rho} \hat{K}_N^{+}$ με $\sum_N \hat{K}_N^{+} \hat{K}_N = \hat{I}$

εαν και μόνο εαν διατηρεί το ίχνος, είναι γραμμική και πλήρως θετική

Άσκηση: Έστω η απεικόνιση $\hat{T}$ που δίνεται ως:

$$\hat{T}: \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \quad \text{(αναστροφή)}$$

Να δείξετε ότι η απεικόνιση αυτή είναι μεν θετική αλλά όχι πλήρως θετική.

Θεωρείστε τον πίνακα: $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$

με $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle_S|0\rangle_R + |1\rangle_S|1\rangle_R\right)$

και δείξτε ότι η δράση του τελεστή

$\hat{T}_{SR} = \hat{T}_S \otimes \hat{I}_R$ στον $\hat{\rho}$

οδηγεί σε πίνακα με τουλάχιστον μία ιδιοτιμή αρνητική.

Τοπική περιγραφή χρονικής εξέλιξης ανηγμένων πινάκων πυκνότητας – εξίσωση Lindblad

Υπόθεση 1: Θεωρούμε ότι ισχύει:

$$\hat{\rho}(t+\Delta t) = \sum_N \hat{K}_N(\delta t)\,\hat{\rho}(t)\,\hat{K}_N^{+}(\delta t)$$

με $N = 0, 1, \dots, \underbrace{N_{max}}_{\text{αριθμός Kraus}} - 1$

Υπόθεση 2: $$\hat{K}_0(\delta t) = \hat{I} - \hat{A}\,\delta t$$

Η μορφή αυτή ισχύει π.χ. στη περίπτωση στην σε εξωτερικό πεδίο με χρονικά μεταβαλλόμενες στοχαστικής διακυμάνσεις (σενάριο 2). Δεν ισχύει όμως, όπως είδαμε, για χρονικά σταθερές, στοχαστικές διακυμάνσεις (σενάριο 1)

Χωρίς βλάβη γενικότητας θέτουμε:

$$\hat{A} = \hat{D} + i\hat{H} \quad \text{με} \quad \hat{D} = \hat{D}^{+} \quad \text{και} \quad \hat{H} = \hat{H}^{+}$$

Γράφουμε:

$$\hat{\rho}(t+\Delta t) = \hat{K}_0(\delta t)\hat{\rho}(t)\hat{K}_0^{+}(\delta t) + \sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{K}_j(\delta t)\hat{\rho}(t)\hat{K}_j^{+}(\delta t)$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{\rho}(t+\Delta t) = \underbrace{(\hat{I} - (\hat{D}+i\hat{H})\delta t)\hat{\rho}(t)(I - (\hat{D}-i\hat{H})\delta t)} + \sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{K}_j(\delta t)\hat{\rho}(t)\hat{K}_j^{+}(\delta t)$$

$$= \hat{\rho}(t) - (\hat{D}\hat{\rho}(t) + \hat{\rho}(t)\hat{D})\delta t - i[\hat{H},\hat{\rho}(t)]\delta t + O((\delta t)^2)$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{\rho}(t+\Delta t) - \hat{\rho}(t) = -i[\hat{H},\hat{\rho}(t)]\delta t - (\hat{D}\hat{\rho}(t) + \hat{\rho}(t)\hat{D})\delta t + \sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{K}_j(\delta t)\hat{\rho}(t)\hat{K}_j^{+}(\delta t)$$

$$+ O((\delta t)^2)$$

Επίσης θα ισχύει η σχέση πληρότητας (διατήρηση ίχνους)

$$\sum_{N=0}^{N_{max}-1} \hat{K}_N^+(\delta t)\hat{K}_N(\delta t) = \hat{I} \Rightarrow \underbrace{\hat{K}_0^+(\delta t)\,\hat{K}_0(\delta t)}_{(\hat{I}-(\hat{D}-i\hat{H})\delta t)(\hat{I}-(\hat{D}+i\hat{H})\delta t)+O((\delta t)^2)} + \sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{K}_j^+(\delta t)\hat{K}_j(\delta t) = \hat{I}$$

που οδηγεί στη σχέση:

$$\cancel{\hat{I}} - 2\hat{D}\delta t + \cancel{i\hat{H}\delta t} - \cancel{i\hat{H}\delta t} + O((\delta t)^2) + \sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{K}_j^+(\delta t)\hat{K}_j(\delta t) = \cancel{\hat{I}}$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{D} = \frac{1}{2\delta t}\sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{K}_j^+(\delta t)\hat{K}_j(\delta t) + O(\delta t)$$

Για να υπάρχει ο πίνακας $\hat{D}$ (να είναι πεπερασμένος) στο όριο $\delta t \to 0$ θα πρέπει να ισχύει:

$$\hat{K}_j(\delta t) \sim \sqrt{\delta t} \qquad \forall\ j \geq 1$$

Θέτουμε λοιπόν:

$$\hat{K}_j(\delta t) = \hat{R}_j \sqrt{\delta t} \qquad \text{όπου} \qquad \hat{R}_j = \lim_{\delta t \to 0} \frac{\hat{K}_j(\delta t)}{\sqrt{\delta t}}$$

και έτσι βρίσκουμε:

$$\hat{D} = \lim_{\delta t \to 0} \frac{1}{2\delta t} \sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{K}_j^{+}(\delta t)\, \hat{K}_j(\delta t) + O(\delta t)$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{D} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{R}_j^{+} \underbrace{\hat{R}_j}_{\text{δεν εξαρτώνται από το χρόνο}} + O(\delta t)$$

Αντικαθιστώντας το $\hat{D}$ στην αρχική μας εξίσωση για τον ανηγμένο πίνακα πυκνότητας $\hat{\rho}(t)$ παίρνουμε:

$$\hat{\rho}(t+\delta t) - \hat{\rho}(t) = -i\left[\hat{H}, \hat{\rho}(t)\right]\delta t - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{R}_j^{+}\hat{R}_j\, \hat{\rho}(t)\delta t - \frac{1}{2}\hat{\rho}(t)\sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{R}_j^{+}\hat{R}_j\, \delta t + \sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{K}_j(\delta t)\hat{\rho}(t)\hat{K}_j^{+}(\delta t)$$

$$+ O\left((\delta t)^2\right)$$

Επίσης ισχύει: $\sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{K}_j(\delta t)\,\hat{\rho}(t)\,\hat{K}_j^{+}(\delta t) = \sum_{j=1}^{N_{max}-1} \hat{R}_j\,\hat{\rho}(t)\,\hat{R}_j^{+}\,\delta t$

οπότε παίρνουμε τελικά:

$$\frac{\hat{\rho}(t+\delta t)-\hat{\rho}(t)}{\delta t} = -i\left[\hat{H},\hat{\rho}(t)\right] - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N_{max}-1}\hat{R}_j^{+}\hat{R}_j\,\hat{\rho}(t) - \frac{1}{2}\hat{\rho}(t)\sum_{j=1}^{N_{max}-1}\hat{R}_j^{+}\hat{R}_j + \sum_{j=1}^{N_{max}-1}\hat{R}_j\hat{\rho}(t)\hat{R}_j^{+} + O(\delta t)$$

$\Downarrow$ στο όριο $\delta t \to 0$

$$\boxed{\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -i\left[\hat{H},\hat{\rho}(t)\right] - \frac{1}{2}\hat{\Lambda}\,\hat{\rho}(t) - \frac{1}{2}\hat{\rho}(t)\,\hat{\Lambda} + \sum_{j=1}^{N_{max}-1}\hat{R}_j\hat{\rho}(t)\hat{R}_j^{+}}$$

με $\hat{\Lambda} = \sum_{j=1}^{N_{max}-1}\hat{R}_j^{+}\hat{R}_j$

εξίσωση Lindblad για το $\hat{\rho}(t)$

Στο παράδειγμα του σπιν σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο με στοχαστικές διακυμάνσεις που μελετήσαμε, ισχύουν τα εξής:

Σενάριο 1

χρονικά σταθερές στοχαστικές διακυμάνσεις

$$\hat{K}_0(\delta t) \approx \hat{I}\left(1 - \frac{\Gamma^2}{4}(\delta t)^2\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{K}_0(\delta t) = \hat{I} + O\left((\delta t)^2\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{R}_1^{+}\hat{R}_1 = 0 \Rightarrow \hat{R}_1 = \emptyset$$

$$\Downarrow$$

δεν οδηγεί σε εξίσωση Lindblad

Σενάριο 2

χρονικά μεταβαλλόμενες, ασυσχέτιστες, στοχαστικές διακυμάνσεις

$$\hat{K}_0(\delta t) \approx \hat{I}\left(1 - \frac{\gamma}{4}\delta t\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{K}_1(\delta t) \approx \sqrt{\frac{\gamma \delta t}{2}}\,\hat{\sigma}_z$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{R}_1 = \sqrt{\frac{\gamma}{2}}\,\hat{\sigma}_z$$

$$\hat{D} = \frac{\gamma}{4}\hat{I}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{\gamma}{2}\hat{\rho}(t) + \frac{\gamma}{2}\hat{\sigma}_z \rho(t)\hat{\sigma}_z}$$

Εξίσωση Lindblad