Часть 5

ОПИСАНИЕ ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Распад нестабильной микросистемы

Выше мы получили уравнение фон Неймана для замкнутых квантовых систем. Теперь напишем аналогичные уравнения для открытых квантовых систем. Простейшая ситуация – в системе происходит радиоактивный распад. В случае радиоактивного распада экспериментально установлено, что скорость распада пропорциональна числу нераспавшихся частиц, то есть:

$$\frac{dN(t)}{dt} = -\frac{N(t)}{\tau}.$$

Решение этого уравнения с начальным условием $N(t=0) = N_0$ **имеет вид**

$$N(t) = N_0\, e^{-t/\tau} \equiv N_0\, e^{-\Gamma\, t/\hbar}$$

и называется законом радиоактивного распада. Величина τ **– время жизни нестабильной системы,** Γ **– ширина распада. В рассматриваемом приближении ширина распада и время жизни предполагаются независящими от времени. По определению**

$$\Gamma\,\tau = \hbar.$$

Согласно частотному определению вероятности при $N(t) \gg 1$ вероятность распада есть

$$w(t) = \frac{N(t)}{N_0} = e^{-\Gamma\, t/\hbar}.$$

С точки зрения квантовой механики $w(t) = |\psi(t)|^2$, где $\psi(t)$ - некоторая волновая функция. Если считать, что распадающиеся частицы являются свободными, то такую (для простоты – монохроматическую) волновую функцию можно написать как:

$$\psi(t) \sim \chi_{s\, s_z}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\,(E_p t - px) - \frac{\Gamma\, t}{2\,\hbar}} = \chi_{s\, s_z}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\left(E_p - \frac{i\,\Gamma}{2}\right)\, t - px\right)}.$$

Такая волновая функция не может быть нормирована на единицу. И она является решением уравнения с неэрмитовым гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{i}{2}\,\hat{\Gamma}.$$

Тут нет противоречия с квантовой механикой, поскольку наблюдаемыми по-отдельности являются энергия частицы E_p и ширина распада Γ (время жизни τ). Поэтому $\hat{H}_0 = \hat{H}_0^\dagger$ и $\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}^\dagger$.

Квантовое уравнение Лиувилля для открытых систем

Гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{i}{2}\,\hat{\Gamma}$ представляет собой простейший пример гамильтониана открытой квантовой системы. Найдем уравнение фон Неймана для такого гамильтониана.

Начнем с уравнения для матрицы плотности чистого состояния в представлении Шредингера $\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t) = \left|\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right\rangle\left\langle\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right|$. Вектор состояния $\left|\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right\rangle$ удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера:

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\left|\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right\rangle}{\partial\,t} \;=\; \hat{H}^{(S)}\,\left|\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right\rangle = \left(\hat{H}_0^{(S)} - \frac{i}{2}\hat{\Gamma}^{(S)}\right)\,\left|\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right\rangle,$$

а вектор состояния $\left\langle\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right|$ – уравнению Шредингера:

$$-\,i\,\hbar\,\frac{\partial\,\left\langle\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right|}{\partial\,t} \;=\; \left\langle\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right|\,\hat{H}^{(S)\,\dagger} = \left\langle\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right|\,\left(\hat{H}_0^{(S)} + \frac{i}{2}\hat{\Gamma}^{(S)}\right).$$

Тогда решения этих уравнений можно записать при помощи оператора $\hat{\mathcal{U}}(t,\, t_0)$:

$$\left|\, \psi_\ell^{(S)}(t) \right\rangle = \hat{\mathcal{U}}(t,\, t_0) \left|\, \psi_{\ell\, 0}^{(S)} \right\rangle, \; \left\langle\, \psi_\ell^{(S)}(t) \right| = \left\langle\, \psi_{\ell\, 0}^{(S)} \right| \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,\, t_0),$$

Поскольку теперь вектора состояния не нормированы на единицу, то оператор $\hat{\mathcal{U}}(t,\, t_0)$ НЕ унитарен.

Операторы $\hat{\mathcal{U}}(t,\, t_0)$ и $\hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,\, t_0)$ удовлетворяют уравнениям:

$$i\,\hbar\, \frac{\partial\, \hat{\mathcal{U}}(t,\, t_0)}{\partial\, t} = \left(\hat{H}_0^{(S)} - \frac{i}{2}\, \hat{\Gamma}^{(S)} \right) \hat{\mathcal{U}}(t,\, t_0),$$

и

$$-\, i\,\hbar\, \frac{\partial\, \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,\, t_0)}{\partial\, t} = \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,\, t_0) \left(\hat{H}_0^{(S)} + \frac{i}{2}\, \hat{\Gamma}^{(S)} \right).$$

Теперь найдем, какому уравнению подчиняется матрица $\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)$.

Проделывая выкладки, полностью аналогичные выкладкам раздела "Эволюция матрицы плотности во времени...", получаем:

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)}{\partial\,t} = \hat{H}^{(S)}\,\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t) - \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)\,\hat{H}^{\dagger\,(S)} = \left[\hat{H}_0^{(S)},\,\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)\right] - \frac{i}{2}\left\{\hat{\Gamma}^{(S)},\,\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)\right\}.$$

Учтя, что $\hat{\rho}^{(S)}(t) = \sum_\ell W_\ell\,\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)$, легко находим уравнение точно такого же вида для матрицы $\hat{\rho}^{(S)}(t)$:

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}^{(S)}(t)}{\partial\,t} = \left[\hat{H}_0^{(S)},\,\hat{\rho}^{(S)}(t)\right] - \frac{i}{2}\left\{\hat{\Gamma}^{(S)},\,\hat{\rho}^{(S)}(t)\right\}.$$

Пример: уравнение Блоха с затуханием. В простейшем случае можно подобрать оператор $\hat{\Gamma}$ так, что $\left\{\hat{\Gamma},\,\hat{\rho}\right\} = 2\gamma\left(\left\langle\,\vec{S}(t)\,\right\rangle_\rho\,\vec{\sigma}\right)$. Тогда уравнение Блоха модифицируется следующим образом:

$$\frac{\partial\,\left\langle\,\vec{S}(t)\,\right\rangle_\rho}{\partial\,t} + \left[\left\langle\,\vec{S}(t)\,\right\rangle_\rho\times\vec{\Omega}\right] + \frac{\gamma}{\hbar}\left\langle\,\vec{S}(t)\,\right\rangle_\rho = 0.$$

Эволюция матрицы плотности открытых квантовых систем. Общий подход

Пусть некоторая квантовая система описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$ и состоит из двух подсистем "A" и "B". Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B + \hat{V}_{AB},$$

где $\hat{H}_A = \hat{H}_A^\dagger$ и $\hat{H}_B = \hat{H}_B^\dagger$ – гамильтонианы подсистем "A" и "B" соответственно, $\hat{V}_{AB} \neq \hat{V}_{AB}^\dagger$ – гамильтониан взаимодействия. Матрица плотности системы $\hat{\rho}$ подчиняется уравнению фон Неймана:

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}^{(S)}}{\partial\,t} = \hat{H}^{(S)}\,\hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)}\,\hat{H}^{\dagger\,(S)}.$$

Вопрос: какому уравнению подчиняется матрица плотности $\hat{\rho}_A$ подсистемы "A"?

Ответ: прежде всего ясно, что "A" – это открытая система. Поэтому уравнение, которое будет получено для матрицы плотности $\hat{\rho}_A$, станет обобщением уравнения для матрицы плотности распадающейся частицы, которое было получено выше.

Напомним, что $\hat{\rho}_A = \mathbf{Tr}_B \hat{\rho}$. Тогда:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_A^{(S)}}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial \mathbf{Tr}_B \hat{\rho}^{(S)}}{\partial t} = i\hbar \mathbf{Tr}_B \left(\frac{\partial \hat{\rho}^{(S)}}{\partial t} \right) =$$

$$= \mathbf{Tr}_B \left(\hat{H}^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}^{\dagger\,(S)} \right) = \mathbf{Tr}_B \left(\hat{H}_A^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_A^{(S)} \right) +$$

$$+ \mathbf{Tr}_B \left(\hat{H}_B^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_B^{(S)} \right) + \mathbf{Tr}_B \left(\hat{V}_{AB}^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{V}_{AB}^{\dagger\,(S)} \right).$$

Разберемся с первым слагаемым в правой части. Имеем:

$$\mathbf{Tr}_B \left(\hat{H}_A^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_A^{(S)} \right) = \hat{H}_A^{(S)} \left(\mathbf{Tr}_B \hat{\rho}^{(S)} \right) - \left(\mathbf{Tr}_B \hat{\rho}^{(S)} \right) \hat{H}_A^{(S)} =$$

$$= \hat{H}_A^{(S)} \hat{\rho}_A^{(S)} - \hat{\rho}_A^{(S)} \hat{H}_A^{(S)} = \left[\hat{H}_A^{(S)}, \hat{\rho}_A^{(S)} \right].$$

При выводе мы использовали тот факт, что гамильтониан $\hat{H}_A^{(S)}$ не зависит от переменных системы "B".

Теперь рассмотрим второе слагаемое. Воспользуемся определением частичного следа и условием $\hat{H}_B \,|\, b \,\rangle = E_b \,|\, b \,\rangle$. Тогда:

$$\mathbf{Tr}_B \left(\hat{H}_B^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_B^{(S)} \right) = \int db \left\langle b \,\middle|\, \hat{H}_B^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_B^{(S)} \,\middle|\, b \right\rangle =$$

$$= \int db\, E_b \left\langle\, b \,\middle|\, \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \,\middle|\, b \,\right\rangle E_b \,=\, 0.$$

Поэтому окончательно для матрицы плотности подсистемы $"A"$ **находим следующее уравнение фон Неймана:**

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}_A^{(S)}}{\partial\,t} \,=\, \left[\hat{H}_A^{(S)},\,\hat{\rho}_A^{(S)}\right] + \mathbf{Tr}_B\left(\hat{V}_{AB}^{(S)}\,\hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)}\,\hat{V}_{AB}^{\dagger\,(S)}\right).$$

В частном случае, когда $\hat{V}_{AB}^{(S)} = \int db' \mid b' \,\rangle\, \frac{i}{2}\,\Gamma^{(S)}\,\langle\, b' \mid$**, воспроизводим уравнение для матрицы плотности радиоактивно распадающейся частицы, которое было получено в предыдущем разделе.**

Заметим, что взяв след по переменным подсистемы $"B"$ **в последнем слагаемом, мы сделали уравнение для матрицы плотности** $\hat{\rho}_A$ **подсистемы** $"A"$ **формально необратимым.**

Операторы Крауса и представление Крауса для матрицы плотности открытой квантовой системы

Рассмотрим удобную запись для эволюции матрицы плотности открытой системы. Пусть квантовая система состоит из двух подсистем "A" ($\equiv$ частица) и "B" ($\equiv$ термостат или резервуар). Если известен полный гамильтониан системы $\hat{H}^{(S)}$, то можно построить и оператор эволюции $\hat{\mathcal{U}}(t,\, t_0)$.

Пусть в начальный момент времени $t = t_0$ подсистемы "A" и "B" не взаимодействовали друг с другом. Подсистема "A" находилась в смешанном состоянии $\hat{\rho}_{A\,0}$, а подсистема "B" в чистом (для простоты!) состоянии $\hat{\rho}_{B\,0} = \left|\, in^{(B)} \right\rangle \left\langle\, in^{(B)} \right|$.

Тогда матрица плотности подсистемы "A" в представлении Шредингера (S) в произвольный момент времени t будет иметь вид:

$$\hat{\rho}_A^{(S)}(t) = \mathbf{Tr}_B \left(\hat{\mathcal{U}}(t,\, t_0)\, \hat{\rho}_{A\,0}\, \hat{\rho}_{B\,0}\, \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,\, t_0) \right) =$$
$$= \mathbf{Tr}_B \left(\hat{\mathcal{U}}(t,\, t_0) \left|\, in^{(B)} \right\rangle \hat{\rho}_{A\,0} \left\langle\, in^{(B)} \right| \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,\, t_0) \right).$$

Введем для операторов подсистемы "B" базис $\left| f_{k'}^{(B)} \right\rangle$ собственных векторов некоторой наблюдаемой F_B из этой подсистемы. Выбор базиса определяется лишь удобством дальнейших вычислений. Тогда:

$$\hat{\rho}_A^{(S)}(t) = \sum_{k'} \left\langle f_{k'}^{(B)} \middle| \hat{\mathcal{U}}(t,t_0) \middle| in^{(B)} \right\rangle \hat{\rho}_{A\,0} \left\langle in^{(B)} \middle| \hat{\mathcal{U}}^{\dagger}(t,t_0) \middle| f_{k'}^{(B)} \right\rangle =$$

$$= \sum_{k'} \hat{M}_{k'}(t)\, \hat{\rho}_{A\,0}\, \hat{M}_{k'}^{\dagger}(t).$$

Такая форма записи эволюции матрицы плотности открытой квантовой подсистемы называется **представлением Крауса** или **представлением в виде операторной суммы**, а входящие в нее операторы $\hat{M}_{k'}(t) = \left\langle f_{k'}^{(B)} \middle| \hat{\mathcal{U}}(t,t_0) \middle| in^{(B)} \right\rangle$ – **операторами Крауса**.

Условие нормировки операторов Крауса (для систем, описываемых **эрмитовым** гамильтонианом $\hat{H}^{(S)} \equiv$ **унитарная эволюция**):

$$1 = \mathbf{Tr}_A\, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) = \sum_{k'} \hat{M}_{k'}^{\dagger}(t)\, \hat{M}_{k'}(t).$$

Хотя подсистема "B" может быть достаточно сложной, а ее эволюция – нетривиальной, но часто удается найти простые выражения для операторов $\hat{M}_{k'}$, чтобы описать влияние подсистемы "B" на эволюцию подсистемы "A".

Для неэрмитовых гамильтонианов и связанной с ними неунитарной эволюции (например, в случае рассмотренного выше радиоактивного распада) $\mathbf{Tr}_A\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t) \le 1$. Соответствующим образом изменяется и условие нормировки операторов Крауса.

Представление Крауса является обобщением проекционного постулата Дирака-фон Неймана (Постулата N4'). Действительно, если в момент времени t произвести измерение спектра наблюдаемой F_B, не интересуясь конечным результатом измерения (неселективное измерение), то после этого матрица плотности подсистемы "A" примет вид:

$$\hat{\rho}_A^{(S)}(t) = \sum_{k'} \mathbf{Tr}_B \left(\frac{\hat{P}_{k'}^{(B)}\,\hat{\rho}(t)\,\hat{P}_{k'}^{(B)}}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{k'}^{(B)}\,\hat{\rho}(t)\right)} \right),$$

где $\hat{P}_{k'}^{(B)} = \left| f_{k'}^{(B)} \right\rangle \left\langle f_{k'}^{(B)} \right|$. Очевидно, что это частный случай представления Крауса, когда $\hat{\rho}(t=0) = \hat{\rho}_{A\,0}\,\hat{\rho}_{B\,0}$.

Уравнение Линдблада

В параграфе "Эволюция матрицы плотности открытых квантовых систем. Общий подход" уже было найдено уравнение для эволюции матрицы плотности $\hat{\rho}_A^{(S)}(t)$. Однако, чтобы получить эволюцию матрицы плотности подсистемы "A" в таком подходе необходимо знать явную зависимость от времени матрицы плотности $\hat{\rho}^{(S)}(t)$ всей квантовой системы, что делает практически бессмысленным написание подобных уравнений эволюции для каждой из подсистем по-отдельности.

При помощи представления Крауса появляется возможность написать уравнение эволюции для матрицы плотности $\hat{\rho}_A^{(S)}(t)$ БЕЗ использования явного вида матрицы плотности $\hat{\rho}(t)$. Для этого применим разложение Крауса к двум моментам времени t и $t+\Delta t$. Имеем:

$$\sum_{k'} \hat{M}_{k'}(t+\Delta t)\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\,\hat{M}_{k'}^{\dagger}(t+\Delta t) = \hat{\rho}_A^{(S)}(t+\Delta t) \approx \hat{\rho}_A^{(S)}(t) + \Delta\hat{\rho}_A^{(S)}(t).$$

Выберем базис в подсистеме "B" таким образом, чтобы оператор $\hat{M}_0$ мало отличался от единичного оператора $\hat{1}$. То есть, пусть оператор $\hat{M}_0 = \hat{1} + \Delta\hat{M}_0$. Произвольный оператор можно записать как сумму эрмитового и антиэрмитового операторов. Используем этот математический факт для нахождения самого общего вида оператора $\Delta\hat{M}_0$.

Кроме того, в левой части равенства оставим только линейные по Δt слагаемые . Из всего вышесказанного следует, что в самом общем виде операторы Крауса можно написать следующим образом:

$$\hat{M}_0 = \hat{1} + \left(\hat{L}_0 - \frac{i\hat{H}_A}{\hbar}\right)\Delta t;$$
$$\hat{M}_{k'} = \hat{L}_{k'}\sqrt{\Delta t} \quad \textbf{при} \quad k' \neq 0,$$

где $\hat{L}_0^\dagger = \hat{L}_0$ и $\hat{H}_A^\dagger = \hat{H}_A$ – два эрмитовых оператора. Заметим, что операторы $\hat{L}_{k'}$ при $k' \neq 0$ не обязательно должны быть эрмитовыми. Тогда в линейном приближении по Δt имеем:

$$\hat{M}_0\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\,\hat{M}_0^\dagger \approx \hat{\rho}_A^{(S)}(t) + \left(\left\{\hat{L}_0,\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\right\} - \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_A,\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\right]\right)\Delta t$$

и

$$\hat{M}_{k'}\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\,\hat{M}_{k'}^\dagger = \hat{L}_{k'}\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\,\hat{L}_{k'}^\dagger\,\Delta t.$$

Операторы $\hat{L}_{k'}$ называются операторами Линдблада.

Подставляем выражения для операторов Линдблада в левую часть разложения Крауса и получаем:

$$\frac{\Delta\hat{\rho}_A^{(S)}(t)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t}\left(\sum_{k'} \hat{M}_{k'}\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\,\hat{M}_{k'}^{\dagger} - \hat{\rho}_A^{(S)}(t)\right) \approx$$
$$\approx \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}_A,\, \hat{\rho}_A^{(S)}(t)\right] + \left\{\hat{L}_0,\, \hat{\rho}_A^{(S)}(t)\right\} + \sum_{k'\neq 0} \hat{L}_{k'}\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\,\hat{L}_{k'}^{\dagger}.$$

Из условий нормировки $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t+\Delta t)=1$ и $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)=1$ следует, что

$$0 = \mathbf{Tr}\frac{\Delta\hat{\rho}_A^{(S)}(t)}{\Delta t} = \mathbf{Tr}\left(\left\{\hat{L}_0,\, \hat{\rho}_A^{(S)}(t)\right\} + \sum_{k'\neq 0} \hat{L}_{k'}\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\,\hat{L}_{k'}^{\dagger}\right).$$

Мы сразу учли, что след от коммутатора двух операторов равен нулю. Используя цикличность следа, получаем

$$\mathbf{Tr}\left(2\,\hat{L}_0,\, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) + \sum_{k'\neq 0} \hat{L}_{k'}^{\dagger}\,\hat{L}_{k'}\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\right) = 0,$$

откуда находим связь между $\hat{L}_0$ и $\hat{L}_{k'}$ в виде:

$$\hat{L}_0 = -\frac{1}{2} \sum_{k' \neq 0} \hat{L}^{\dagger}_{k'} \hat{L}_{k'}$$

Используя это условие и заменяя приращения Δ на дифференциалы, приходим к следующему уравнению эволюции для матрицы плотности подсистемы "A":

$$\frac{d\,\hat{\rho}^{(S)}_A(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}_A, \hat{\rho}^{(S)}_A(t)\right] + \sum_{k' \neq 0}\left(\hat{L}_{k'}\hat{\rho}^{(S)}_A(t)\hat{L}^{\dagger}_{k'} - \frac{1}{2}\left\{\hat{L}^{\dagger}_{k'} \hat{L}_{k'}, \hat{\rho}^{(S)}_A(t)\right\}\right).$$

Сравнивая полученное уравнение с аналогичным уравнением из параграфа "Эволюция матрицы плотности открытых квантовых систем. Общий подход", видим, что оператор $\hat{H}_A$ следует отождествить с гамильтонианом подсистемы "A", записанным в представлении Шредингера.

Запишем данное уравнение в более симметричной форме. Для этого воспользуемся операторным тождеством:

$$\hat{A}\,\hat{B}\,\hat{A}^{\dagger} - \frac{1}{2}\left\{\hat{A}^{\dagger}\,\hat{A}, \hat{B}\right\} = \frac{1}{2}\left(\left[\hat{A}\,\hat{B}, \hat{A}^{\dagger}\right] + \left[\hat{A}, \hat{B}\,\hat{A}^{\dagger}\right]\right).$$

Тогда

$$\frac{d\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}_A^{(S)},\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\right] + \frac{1}{2}\sum_k\left(\left[\hat{L}_k\hat{\rho}_A^{(S)}(t),\,\hat{L}_k^\dagger\right] + \left[\hat{L}_k,\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\hat{L}_k^\dagger\right]\right).$$

Найденное уравнение называется уравнением Линдблада. Оно является наиболее общим уравнением, описывающим неунитарную эволюцию матрицы плотности открытой квантовой подсистемы. Часто данное уравнение называют квантовым марковским уравнением. В окончательной записи мы специально заменили k' на k, чтобы подчеркнуть, что индексы, которыми нумеруются операторы Линдблада $\hat{L}_k$, достаточно условны.

Впервые уравнение Линдблада было, естественно, получено в работе G.Lindblad, ''On the generators of quantum dynamical semigroups'', Commun. Math. Phys. 48, pp. 119 –130 (1976) с использованием аппарата квантовой теории групп. Ясный физический вывод уравнения был предложен в статье V.Gorini, A.Kossakowski, E. C. G. Sudarshan, ''Completely positive dynamical semigroups of N-level systems'', J. Math. Phys. 17, pp.821-825 (1976).

Как работает уравнением Линдблада. Простой пример

Пусть "A" – двухуровневая квантовая система, имеющая основное состояние $\left|\,0^{(A)}\right\rangle$ и возбужденное состояние $\left|\,1^{(A)}\right\rangle$, которое за счет радиоактивного распада переходит в основное состояние. Выше было показано, что подобный процесс описывается неэрмитовым гамильтонианом и неунитарным оператором эволюции, не сохраняющим норму состояния. Для описания перехода $\left|\,1^{(A)}\right\rangle \to \left|\,0^{(A)}\right\rangle$ необходимо написать единственный оператор Линдблада

$$\hat{L} \sim \left|\,0^{(A)}\right\rangle\left\langle\,1^{(A)}\right| = \sqrt{\frac{\Gamma}{\hbar}}\left|\,0^{(A)}\right\rangle\left\langle\,1^{(A)}\right|.$$

Поскольку размерность операторов Линдблада равна $\sqrt{(\text{сек}^{-1})}$, то размерность параметра Γ совпадает с размерностью энергии. Состояния $\left|\,0^{(A)}\right\rangle$ и $\left|\,1^{(A)}\right\rangle$ ортогональны друг другу. Тогда легко проверить, что:

$$\hat{L}^\dagger\,\hat{L} = \frac{\Gamma}{\hbar}\left|\,1^{(A)}\right\rangle\left\langle\,1^{(A)}\right| \quad \text{и} \quad \hat{L}\,\hat{L}^\dagger = \frac{\Gamma}{\hbar}\left|\,0^{(A)}\right\rangle\left\langle\,0^{(A)}\right|.$$

Невозмущенный гамильтониан двухуровневой системы можно написать в виде:

$$\hat{H}_A^{(S)} = E_0 \left| 0^{(A)} \right\rangle \left\langle 0^{(A)} \right| + E_1 \left| 1^{(A)} \right\rangle \left\langle 1^{(A)} \right|.$$

Матрица плотности $\hat{\rho}_A^{(S)}(t)$ в базисе $\left| 0^{(A)} \right\rangle$ и $\left| 1^{(A)} \right\rangle$ в самой общей форме запишется как:

$$\hat{\rho}_A^{(S)} = \rho_{00} \left| 0^{(A)} \right\rangle \left\langle 0^{(A)} \right| + \rho_{11} \left| 1^{(A)} \right\rangle \left\langle 1^{(A)} \right| + \rho_{01} \left| 0^{(A)} \right\rangle \left\langle 1^{(A)} \right| + \rho_{10} \left| 1^{(A)} \right\rangle \left\langle 0^{(A)} \right|.$$

Тогда

$$\frac{1}{i\hbar} \left[\hat{H}_A^{(S)}, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \right] = i\omega_{10}\, \rho_{01} \left| 0^{(A)} \right\rangle \left\langle 1^{(A)} \right| - i\omega_{10}\, \rho_{10} \left| 1^{(A)} \right\rangle \left\langle 0^{(A)} \right|,$$

где $\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar$.

Для дальнейших вычислений удобно ввести базис

$$\left| 0^{(A)} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| 1^{(A)} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

и перейти к матричному представлению.

С учетом всего вышесказанного, уравнение Линдблада в матричной форму будет иметь вид:

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\rho_{00}(t) & \rho_{01}(t)\\ \rho_{10}(t) & \rho_{11}(t)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{\Gamma}{\hbar}\,\rho_{11}(t) & \left(i\omega_{01}-\frac{\Gamma}{2\hbar}\right)\,\rho_{01}(t)\\ -\left(i\omega_{01}+\frac{\Gamma}{2\hbar}\right)\,\rho_{10}(t) & -\frac{\Gamma}{\hbar}\,\rho_{11}(t)\end{pmatrix}.$$

Решение уравнения:

$$\begin{pmatrix}\rho_{00}(t) & \rho_{01}(t)\\ \rho_{10}(t) & \rho_{11}(t)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1-\rho_{11}(0)e^{-\Gamma t/\hbar} & \rho_{01}(0)e^{i\omega_{01}t}e^{-\Gamma t/2\hbar}\\ \rho_{10}(0)e^{-i\omega_{01}t}e^{-\Gamma t/2\hbar} & \rho_{11}(0)e^{-\Gamma t/\hbar}\end{pmatrix}.$$

Легко видеть, что число частиц в возбужденном состоянии (которое, очевидно, $\sim \rho_{11}(t)$) убывает согласно закону радиоактивного распада. Недиагональные матричные элементы тоже экспоненциально убывают со временем, но медленнее, чем $\rho_{11}(t)$. Это еще одно проявление явления декогеренции, которое с другой точки зрения уже обсуждалось в параграфе "Суперпозиция или смесь!".

Уравнением Линдблада для наблюдаемых в представлении Гейзенберга

В параграфе "Эволюция матрицы плотности во времени. Квантовое уравнение Лиувилля (уравнение фон Неймана)", было показано, что среднее значение наблюдаемой F_A, которая относится к подсистеме "A", можно записать как в представлении Шредингера, так и в представлении Гейзенберга:

$$\langle F_A \rangle_{\rho_{\boldsymbol{A}}} = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\ \hat{F}_A^{(S)}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_{A\,0}\ \hat{F}_A^{(H)}(t)\right).$$

Отсюда с с учетом явного вида уравнением Линдблада для матрицы плотности $\hat{\rho}_A^{(S)}(t)$ в представлении Шредингера, получаем уравнение Линдблада для эволюции оператора $\hat{F}_A(t)$ наблюдаемой F_A в представлении Гейзенберга:

$$\frac{d\,\hat{F}_A^{(H)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}_A^{(H)},\, \hat{F}_A^{(H)}(t)\right] + \frac{1}{2}\sum_k \left(\left[\hat{L}_k \hat{F}_A^{(H)}(t),\, \hat{L}_k^\dagger\right] + \left[\hat{L}_k,\, \hat{F}_A^{(H)}(t)\hat{L}_k^\dagger\right]\right),$$

которое описывает неунитарную эволюцию наблюдаемой в открытой квантовой системе.

Релаксационное уравнение для частицы в термостате

Рассмотрим часто используемый приближенный подход, который позволяет не имея детального знания о матрицах плотности $\hat{\rho}(t)$ и $\hat{\rho}_B(t)$, получить нетривиальную информацию об эволюции матрицы плотности $\hat{\rho}_A(t)$.

Пусть микрочастица (подсистема "A") находится в термостате (подсистема "B"). В представлении взаимодействия ((I)) уравнение для вектора состояния $\left|\psi_\ell^{(I)}(t)\right\rangle$ принимает вид:

$$i\hbar\,\frac{\partial\left|\psi_\ell^{(I)}(t)\right\rangle}{\partial t} = \hat{V}_{AB}^{(I)}\left|\psi_\ell^{(I)}(t)\right\rangle.$$

Решение этого уравнения по аналогии с решением для нестационарного уравнения Шредингера можно представить при помощи оператора эволюции: $\left|\psi_\ell^{(I)}(t)\right\rangle = \hat{S}(t,t_0)\left|\psi_{\ell\,0}^{(I)}\right\rangle$. Если для простоты дополнительно предположить, что оператор $\hat{V}_{AB}$ – эрмитов, то уравнение для вектора $\left\langle\psi_\ell^{(I)}(t)\right|$ запишется следующим образом:

$$i\hbar\,\frac{\partial\left\langle\psi_\ell^{(I)}(t)\right|}{\partial t} = \left\langle\psi_\ell^{(I)}(t)\right|\hat{V}_{AB}^{(I)}.$$

с решением $\left\langle\psi_\ell^{(I)}(t)\right| = \left\langle\psi_{\ell\,0}^{(I)}\right|\hat{S}^\dagger(t,t_0)$. Оператор $\hat{S}(t,t_0)$ в рассматриваемом приближении должен быть унитарным.

Операторы $\hat{S}(t, t_0)$ и $\hat{S}^\dagger(t, t_0)$ удовлетворяют уравнениям:

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\mathcal{S}}(t,\ t_0)}{\partial\,t} = \hat{V}_{AB}^{(I)}\,\hat{\mathcal{S}}(t,\ t_0) \ \text{ и } \ -i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\mathcal{S}}^\dagger(t,\ t_0)}{\partial\,t} = \hat{\mathcal{S}}^\dagger(t,\ t_0)\,\hat{V}_{AB}^{(I)}.$$

Тогда легко показать, что уравнения для матрицы плотности чистого $\hat{\rho}_\ell^{(I)}$ и смешанного $\hat{\rho}^{(I)}$ состояний очень похожи на уравнения фон Неймана и имеют вид:

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}_\ell^{(I)}(t)}{\partial\,t} = \left[\hat{V}_{AB}^{(I)}(t),\,\hat{\rho}_\ell^{(I)}(t)\right],$$

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}^{(I)}(t)}{\partial\,t} = \left[\hat{V}_{AB}^{(I)}(t),\,\hat{\rho}^{(I)}(t)\right]$$

соответственно. Принимая во внимание начальное условие для матрицы плотности $\hat{\rho}^{(I)}(t = t_0) = \hat{\rho}^{(S)}(t = t_0) = \hat{\rho}_0$, последнее уравнение можно записать в эквивалентной интегральной форме:

$$\hat{\rho}^{(I)}(t) = \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} d\tau\,\left[\hat{V}_{AB}^{(I)}(\tau),\,\hat{\rho}^{(I)}(\tau)\right].$$

Формально подставим интегральное уравнение в дифференциальное и получим:

$$\frac{\partial\,\hat{\rho}^{(I)}(t)}{\partial\,t} = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{V}_{AB}^{(I)}(t),\,\hat{\rho}_0\right] + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int\limits_{t_0}^{t} d\tau \left[\hat{V}_{AB}^{(I)}(t),\,\left[\hat{V}_{AB}^{(I)}(\tau),\,\hat{\rho}^{(I)}(\tau)\right]\right].$$

Предположим, что в моменты времени $t < t_0$ микросистема "A" и термостат "B" не взаимодействовали между собой. Тогда матрица плотности $\hat{\rho}_0$ факторизуется, то есть: $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_{A\,0}\,\hat{\rho}_{B\,0}$. Когда $t \geq t_0$, термостат продолжает оставаться в состоянии термодинамического равновесия при температуре T. Поэтому с хорошей степенью точности можно заменить полную матрицу плотности $\hat{\rho}^{(I)}(t)$ ее факторизационным приближением, то есть: $\hat{\rho}^{(I)}(t) \approx \hat{\rho}_A^{(I)}(t)\,\hat{\rho}_{B\,0}$. С учетом сделанной замены, для матрицы плотности подсистемы "A" получаем следующее уравнение

$$\frac{\partial\,\hat{\rho}_A^{(I)}(t)}{\partial\,t} = \mathbf{Tr}_B\left(\frac{\partial\,\hat{\rho}^{(I)}(t)}{\partial\,t}\right) = -\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{Tr}_B\left(\left[\hat{V}_{AB}^{(I)}(t),\,\hat{\rho}_{A\,0}\,\hat{\rho}_{B\,0}\right]\right) +$$

$$+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int\limits_{t_0}^{t} d\tau\,\mathbf{Tr}_B\left[\hat{V}_{AB}^{(I)}(t),\,\left[\hat{V}_{AB}^{(I)}(\tau),\,\hat{\rho}_A^{(I)}(\tau)\,\hat{\rho}_{B\,0}\right]\right],$$

которое НЕ зависит от точной матрицы плотности $\hat{\rho}_B^{(I)}(t)$ и описывает необратимые процессы в подсистеме "A".