



中山大學
SUN YAT-SEN UNIVERSITY

量子系统中的耗散

學大山中立國
中山大学物理学院



报告人：路尚润 合作者：简彬洋

目录

CONTENTS

01

主方程

02

芝诺效应

03

量子纠错

04

量子模拟

05

总结



中山大學

SUN YAT-SEN UNIVERSITY

Part.01

主方程



• Lindblad主方程

假定量子系统(子系统)和外界环境的联合哈密顿量形式为

$$\hat{H}_{\text{all}} = \hat{H}_S \otimes \hat{I}_B + \hat{I}_S \otimes \hat{H}_B + \lambda \hat{H}_{SB},$$

其中, $\hat{H}_S$ 和 $\hat{H}_B$ 分别表示量子系统和环境的自由哈密顿量, $\hat{H}_{SB}$ 表示两系统之间的耦合, λ 是耦合系数, 一般认为 λ 相对系统的能量尺度来说是一个小量。

在薛定谔绘景下, 系统的动力学演化由刘维尔方程给出

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{\text{all}}, \rho(t)],$$

能够描述二者整体的密度算符随时间的演化。

对于子系统的密度算符, 演化满足Lindblad主方程^{[1][2][3]}

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

其中 $\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_{LS}$ 为子系统的哈密顿量加由环境诱导的哈密顿量修正项, 对应QED中的兰姆位移项, $\gamma_k \geq 0$ 为耗散率, L_k 为Lindblad算符, 是系统与环境耦合导致系统状态发生改变的算符。



· 量子跳跃(轨迹)理论

考虑量子光学中的腔场耗散^[4], 对单模腔中的光子, 可以被腔壁吸收, 假设腔壁处于绝对零度 $T=0$ 。

①假设发生跳跃前的腔场处于 $|\psi\rangle$, 在 δt 时间间隔内一个光子被吸收的概率 δP 应当正比于时间间隔以及在 $|\psi\rangle$ 中的平均光子数 $\langle\psi|a^\dagger a|\psi\rangle$, 即

$$\delta P = \gamma \langle\psi|a^\dagger a|\psi\rangle \delta t,$$

其中 γ 为光子损耗速率。

②光子跳跃后的归一化量子态为

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi_{jump}\rangle = \frac{a|\psi\rangle}{[\langle\psi|a^\dagger a|\psi\rangle]^{1/2}} = \sqrt{\frac{\gamma\delta t}{\delta P}} a|\psi\rangle.$$

③在 δt 时间内一个光子不被吸收的概率为 $(1 - \delta P)$, 假设腔场非么正演化的有效哈密顿量为 $H_{\text{eff}} = H - i\frac{\gamma}{2}a^\dagger a$ (假设 $\hbar = 1$), 第二项表示腔场能量耗散。当光子不被吸收时, 腔场演化到归一化量子态

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi_{no-jump}\rangle = \frac{e^{-iH_{\text{eff}}\delta t}|\psi\rangle}{\left[\langle\psi|e^{iH_{\text{eff}}^\dagger\delta t}e^{-iH_{\text{eff}}\delta t}|\psi\rangle\right]^{1/2}} \approx \frac{[1 - iH\delta t - a^\dagger a(\gamma/2)\delta t]|\psi\rangle}{(1 - \delta P)^{1/2}}.$$



· 量子跳跃(轨迹)理论

④则密度矩阵的演化为

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| &\rightarrow |\psi(t+\delta t)\rangle\langle\psi(t+\delta t)| = \delta P|\psi_{jump}\rangle\langle\psi_{jump}| + (1-\delta P)|\psi_{no-jump}\rangle\langle\psi_{no-jump}| \\ &\approx |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| - i\delta t[H, |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|] + \frac{\gamma}{2}\delta t\{2a|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|a^\dagger - a^\dagger a|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| - |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|a^\dagger a\}. \end{aligned}$$

⑤利用密度算符，有

$$\rho(t+\delta t) = \rho(t) - i\delta t[H, \rho(t)] + \frac{\gamma}{2}\delta t\{2a\rho(t)a^\dagger - a^\dagger a\rho(t) - \rho(t)a^\dagger a\},$$

当 $\delta t \rightarrow 0$ 时

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + \frac{\gamma}{2}\{2a\rho(t)a^\dagger - a^\dagger a\rho(t) - \rho(t)a^\dagger a\},$$

即为量子力学主方程，可以给出有损耗时绝对零度情况下单模腔场中光场随时间的演化。

上式可以表示为

$$\frac{d\rho}{dt} = -i(H_{\text{eff}}\rho - \rho H_{\text{eff}}^\dagger) + \gamma a\rho(t)a^\dagger,$$

其中 $H_{\text{eff}} = H - i\frac{\gamma}{2}a^\dagger a$ ，分为非厄米有效哈密顿量的演化以及与环境耦合带来的量子跳跃。



中山大學

SUN YAT-SEN UNIVERSITY

Part.02

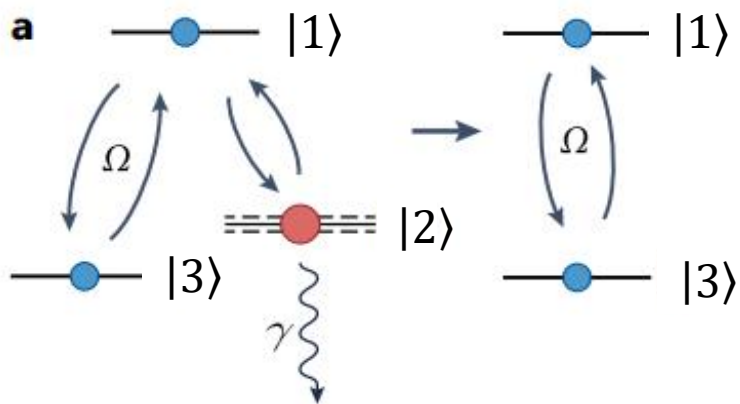
芝诺效应



量子芝诺效应



飞矢不动：在任意时刻看飞行中的箭其状态是不变的



芝诺效应构造二能级子空间^[5]

考虑二能级系统 $|1\rangle$ 、 $|2\rangle$ 与经典电磁场的共振相互作用，在旋转坐标系下

$$H = H_0 + H_I = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_z + \frac{1}{2} \hbar \Omega_R \sigma_x$$

利用相互作用绘景，其时间演化算符

$$U(t) = e^{iH_I t/\hbar} = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) & i \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \\ -i \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) & \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \end{bmatrix}$$

若初始状态处于 $|1\rangle$ 态，则

$$|\psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) |1\rangle - i \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) |2\rangle$$

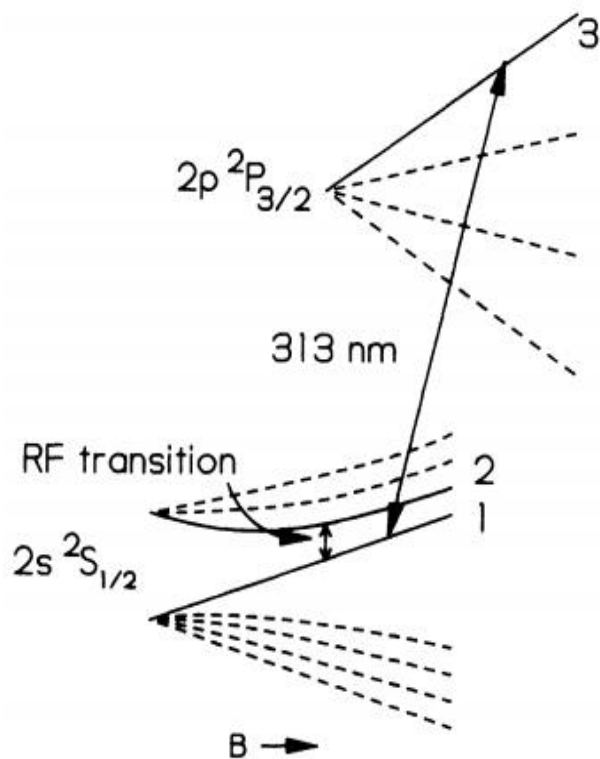
在 t 时刻对系统进行测量，则

$$P_1(t) = \cos^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right)$$

$$P_2(t) = \sin^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right)$$



量子芝诺效应



在磁场中的 $^9\text{Be}^+$ 离子^[6]

再对该系统进行测量，增加一个以 ω_{13} 频率的驱动脉冲

$$H'_I = \hbar g(a\sigma_{13}^+ + a^\dagger\sigma_{13}^-)$$

此时系统发生投影测量，检测有无光子出射：

①当系统坍缩至 $|1\rangle$ 上时，会发生 $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ 的拉比振荡，并发射出一系列光子，测量结束后会在一个振荡周期后返回 $|1\rangle$ 。

②当系统坍缩至 $|2\rangle$ 上时，则无光子产生，测量持续过程中一直处在 $|2\rangle$ 。

考虑初态处于 $|1\rangle$ ，测量间隔足够短 $\Omega_R t \ll 1$

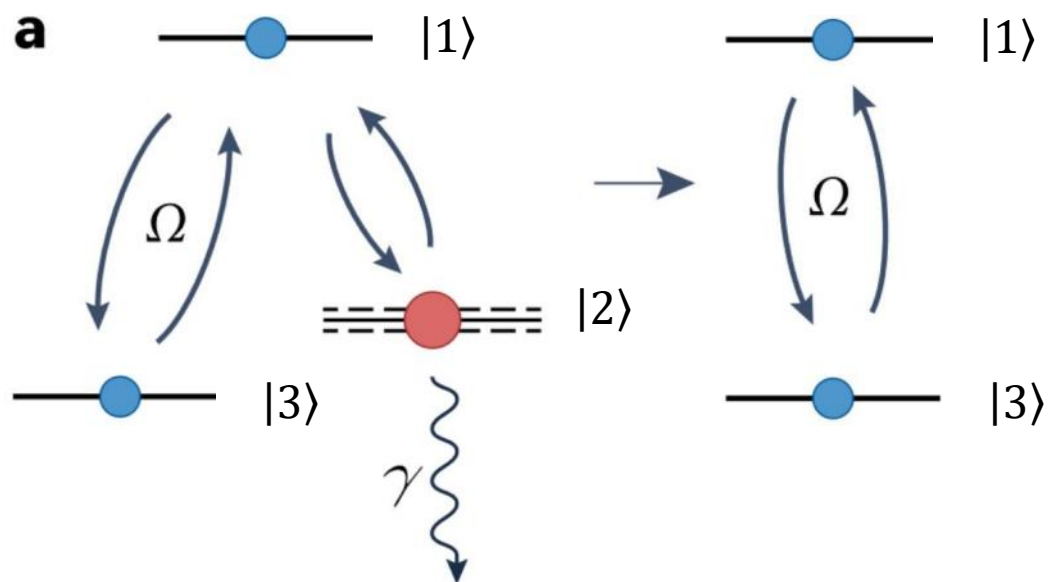
$$P_1(t) \rightarrow 1, P_2(t) \rightarrow 0$$

在总时间为 t 均匀进行 n 次投影测量后，系统初始状态的维持概率为

$$P(t) = \cos^{2n} \left(\frac{\Omega_R t}{2n} \right)$$

当 $n \rightarrow \infty$ 时， $P(t) \rightarrow 1$ 。

量子芝诺效应



芝诺效应构造二能级子空间^[5]

而耗散与连续测量一样实际上也可以实现芝诺效应，引入一个从 $|2\rangle$ 到 $|1\rangle$ 的非相干衰减，对应于耗散速率 Γ 的光子的自发辐射，其Lindblad算符(跳跃算符)描述

$$L = \sqrt{\Gamma}|1\rangle\langle 2|$$

① $\Gamma \ll \Omega$ 时

耗散几乎可以忽略，系统处于迅速的Rabi振荡。

② $\Omega \ll \Gamma$ 时

耗散起着重要的作用，其非厄米有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = H - i\Gamma|2\rangle\langle 2|$$

能量偏离实轴产生失谐， $|1\rangle$ 与 $|2\rangle$ 的耦合将会是非共振的，系统将冻结在 $|1\rangle$ 态。

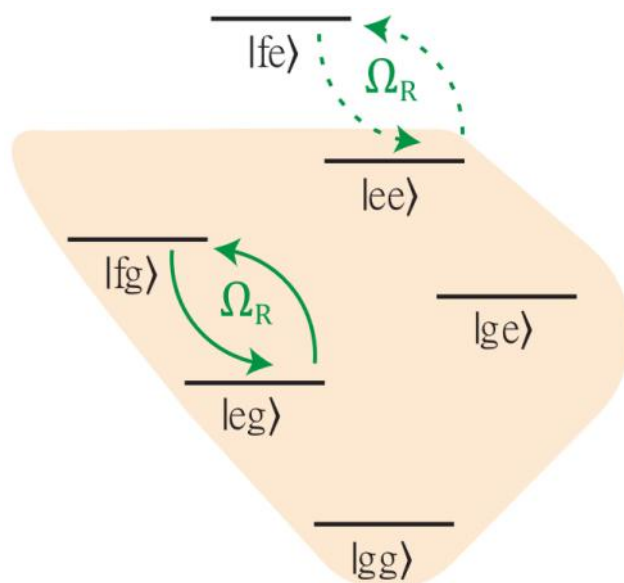
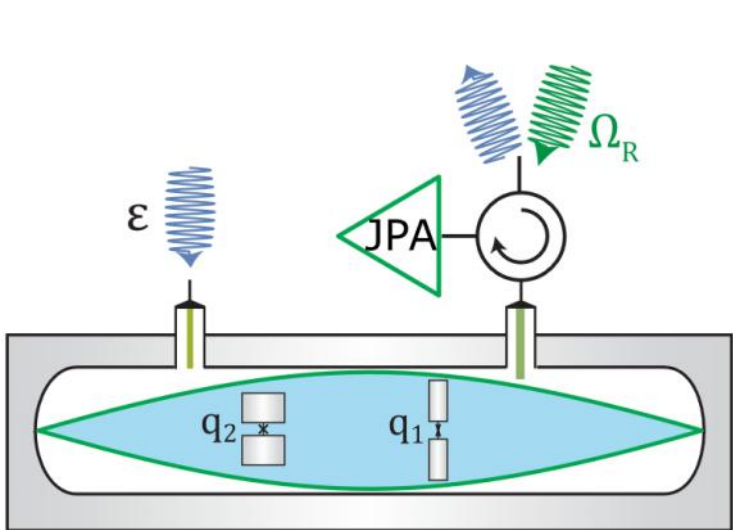
从量子跳跃的物理图像可以很好理解这个行为，当系统存在 $|2\rangle$ 态时，其会发生量子跳跃，迅速跳至 $|1\rangle$ 。

耗散→来自环境的测量

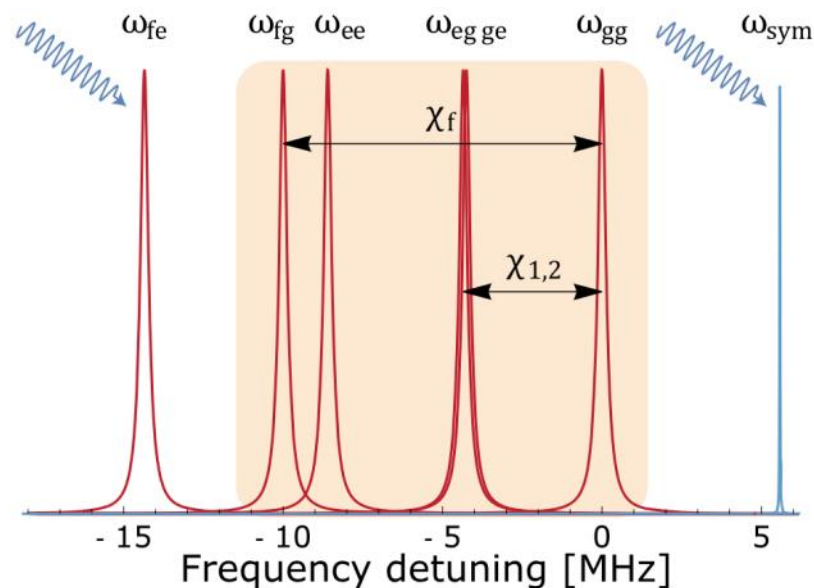
· 芝诺门

系统内将一个qutrit($q1$)和一个qubit($q2$)分别与谐振腔耦合，且 $q1$ 与 $q2$ 之间无相互作用，输入一个频率为 Ω_R 的光，则qutrit发生Rabi振荡，同时打入频率 ω_{fe} 的脉冲 ε ，相当于系统无限快的连续投影测量 $P = \mathbb{I} - |fe\rangle\langle fe|$ ，则

$$H_{\text{Zeno}} = PHP = i\hbar \frac{\Omega_R}{2} \underbrace{P(|e\rangle\langle f| - |f\rangle\langle e|)}_{\text{qutrit}} \otimes \underbrace{(|g\rangle\langle g| + |e\rangle\langle e|)}_{\text{qubit}} P = i\hbar \frac{\Omega_R}{2} (|eg\rangle\langle fg| - |fg\rangle\langle eg|)$$



芝诺门^[7]

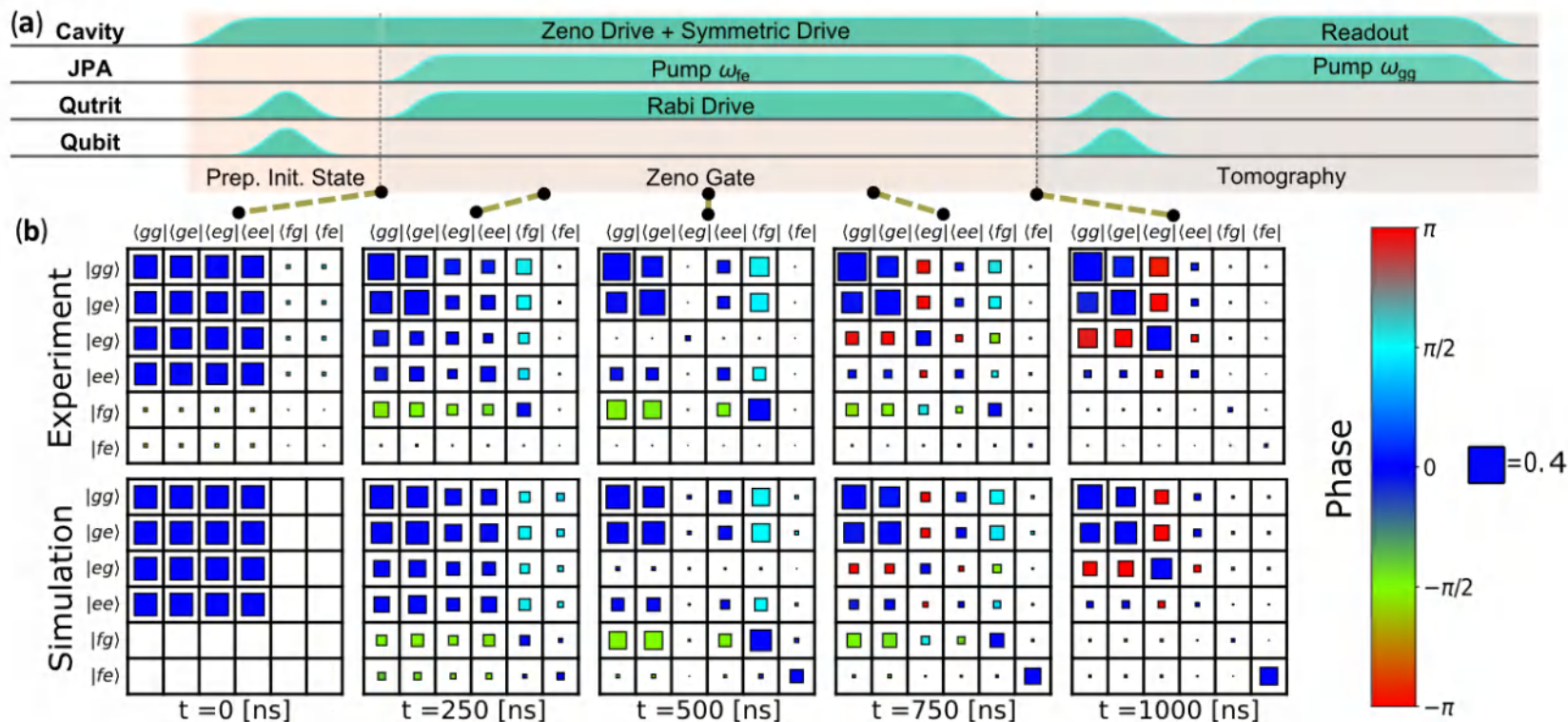




· 芝诺门

$$U = \exp(-iH_{\text{Zeno}}t/\hbar) \text{ where } H_{\text{Zeno}} = i\hbar \frac{\Omega_R}{2} (|eg\rangle\langle fg| - |fg\rangle\langle eg|)$$

演化一个周期 $t = 2\pi/\Omega_R$ 后 $|eg\rangle$ 会携带 π 的相位，故可以实现一种相位门。



芝诺门实验和模拟结果^[7]



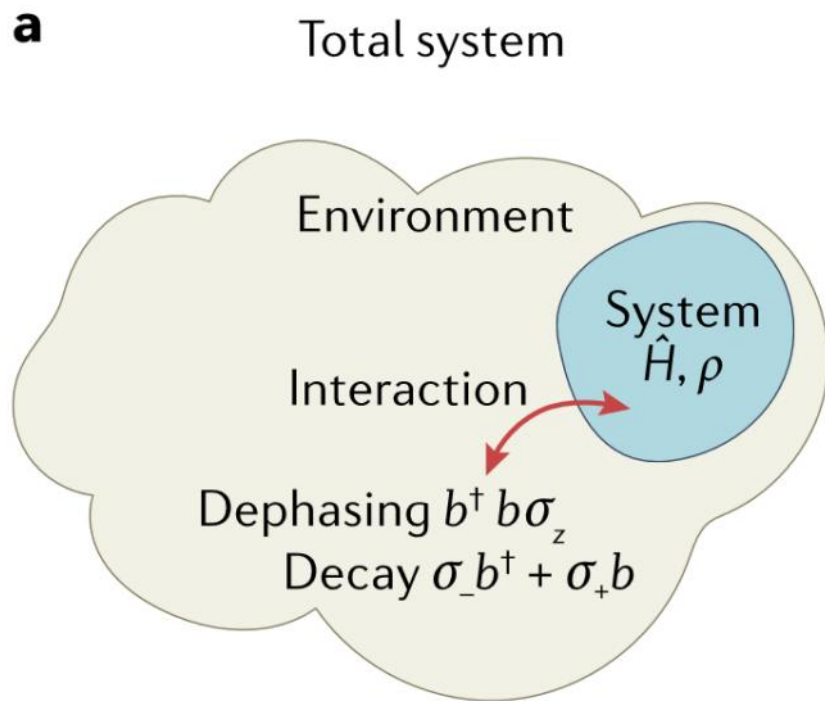
中山大學

SUN YAT-SEN UNIVERSITY

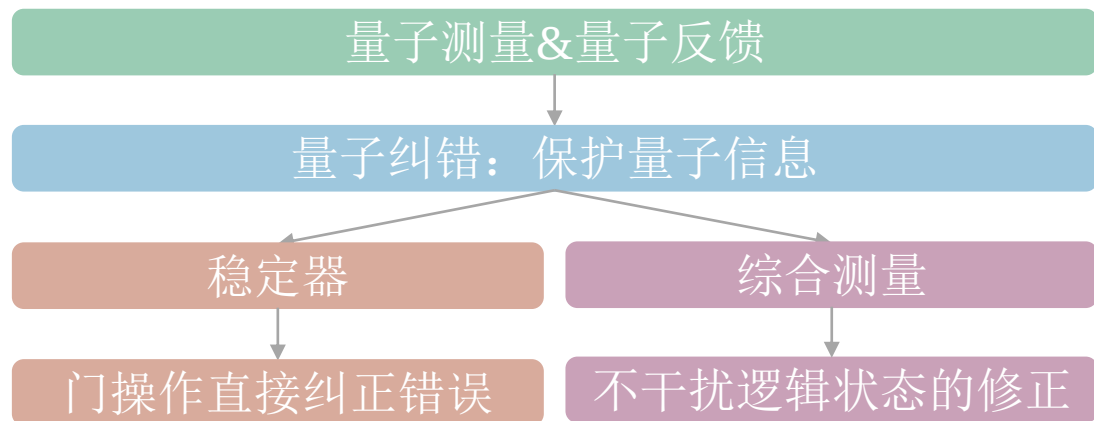
Part.03

量子糾錯

· 量子纠错



量子系统的退相干与耗散^[5]



量子比特与环境发生相互作用

$$\sigma_- b^\dagger + \sigma_+ b$$

向下跃迁并发射一个光子或向上跃迁并吸收一个光子

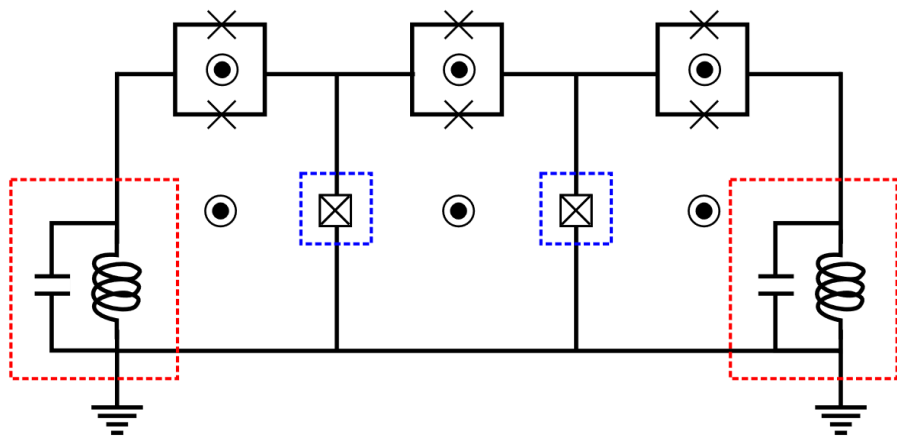
耗散算符可以表示为量子比特下降算符

$$L = \sqrt{\gamma} \sigma_-$$

或非二能级系统激发态的湮灭算符

$$L = \sqrt{\gamma} a$$

量子纠错



超导量子电路电路图^[8]

电路由两个transmon量子比特(为三能级, 记为 l 和 r), 两个 LC 谐振器(记为 Sl 和 Sr)以及三个SQUID组成
定义几个算符:

$$P_k^n = |n_k\rangle\langle n_k| \quad n = 0, 1, 2 \quad k = l, r$$

$$X_k = (a_k^\dagger a_k^\dagger + a_k a_k)/2$$

$$Z_l = P_l^2 - P_l^0$$

2024/04/22

$$H = H_P + H_S + H_{PS}$$

$$H_P = -W X_l X_r + \frac{\delta}{2} (P_l^1 + P_r^1)$$

$$H_S = (W + \frac{\delta}{2}) (a_{Sl}^\dagger a_{Sl} + a_{Sr}^\dagger a_{Sr})$$

$$H_{PS} = \Omega (a_l^\dagger a_{Sl} + a_r^\dagger a_{Sr} + \text{H. c.})$$

$$\text{逻辑态: } |L_0\rangle = \frac{|0_l\rangle + |2_l\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0_r\rangle + |2_r\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |0_{Sl} 0_{Sr}\rangle$$

$$\begin{aligned} \text{单光子激发态: } |E_{0\pm}\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|1_l\rangle \otimes \frac{|0_r\rangle + |2_r\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |0_{Sl} 0_{Sr}\rangle \right. \\ & \left. \pm \frac{|0_l\rangle + |2_l\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0_r\rangle + |2_r\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |1_{Sl} 0_{Sr}\rangle \right] \end{aligned}$$

考虑左量子比特出现单光子损失

$$a_l |L_0\rangle = |1_l\rangle \otimes \frac{|0_r\rangle + |2_r\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |0_{Sl} 0_{Sr}\rangle = \frac{|E_{0+}\rangle + |E_{0-}\rangle}{\sqrt{2}}$$

此时, 只需要将谐振腔中的光子快速耗散即可纠错

$$a_{Sl} |E_{0\pm}\rangle = \pm \sqrt{2} |L_0\rangle$$

15/33



量子纠错

主方程
$$\partial_t \rho = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] + \frac{\Gamma_P}{2} \sum_{j=L,R} (2a_j \rho a_j^\dagger - \{a_j^\dagger a_j, \rho\}) + \frac{\Gamma_S}{2} \sum_{j=L,R} (2a_{Sj} \rho a_{Sj}^\dagger - \{a_{Sj}^\dagger a_{Sj}, \rho\})$$

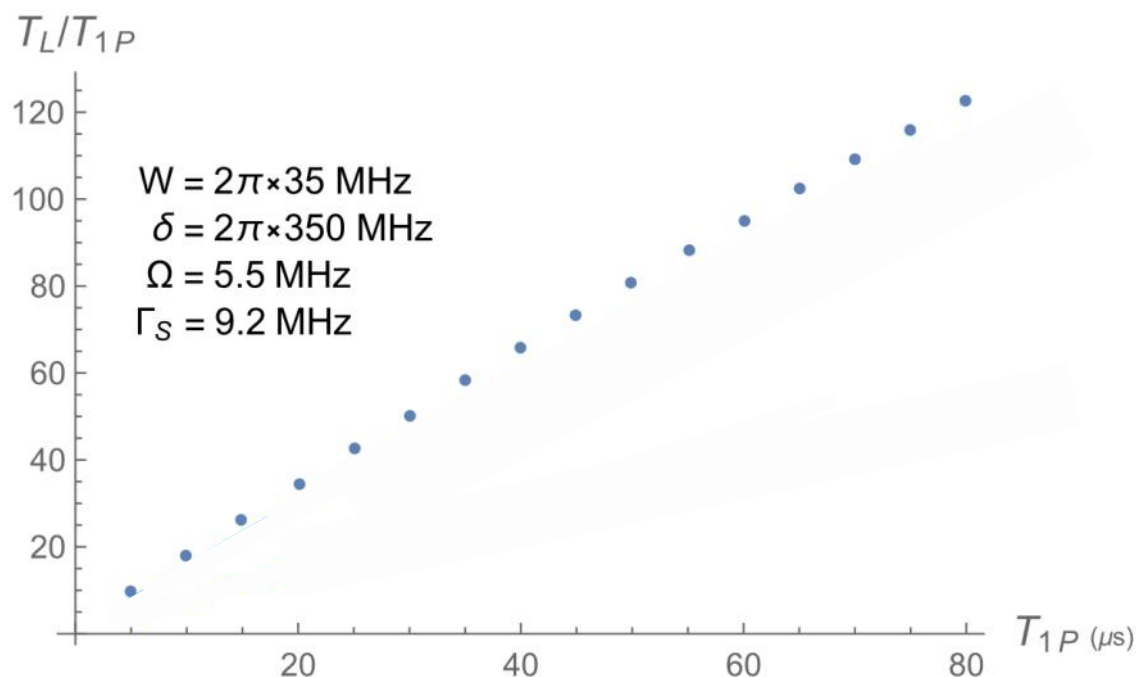
修复率(出现单光子损失后的修复速率)

$$\Gamma_R(\Delta E) = \frac{4\Omega^2 \Gamma_S}{4\Omega^2 + 4\left(\Delta E + W + \frac{\delta}{2}\right)^2 + \Gamma_S^2}$$

净逻辑错误率(各个方向上的退相干速率)

$$\Gamma_E^X \simeq 2\Gamma_R \left(W + \frac{\delta}{2} \right) + \frac{2\Gamma_P \left(2\Gamma_P + \Gamma_R \left(+W - \frac{\delta}{2} \right) \right)}{\Gamma_R \left(-W - \frac{\delta}{2} \right)}$$

$$\Gamma_E^Y \simeq \frac{2\Gamma_P \left(2\Gamma_P + \Gamma_R \left(+W - \frac{\delta}{2} \right) \right)}{\Gamma_R \left(-W - \frac{\delta}{2} \right)}$$



有效逻辑态寿命曲线[8]



中山大學

SUN YAT-SEN UNIVERSITY

Part.04

量子模拟



· 两体JC模型的耗散相变

对于传统的光与二能级原子相互作用，考虑弱耦合，利用旋转波近似可得Jaynes-Cummings哈密顿量

$$\hat{H}^{JC} = \nu_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \nu_a \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma}^- + g(\hat{\sigma}^+ \hat{a} + \hat{\sigma}^- \hat{a}^\dagger).$$

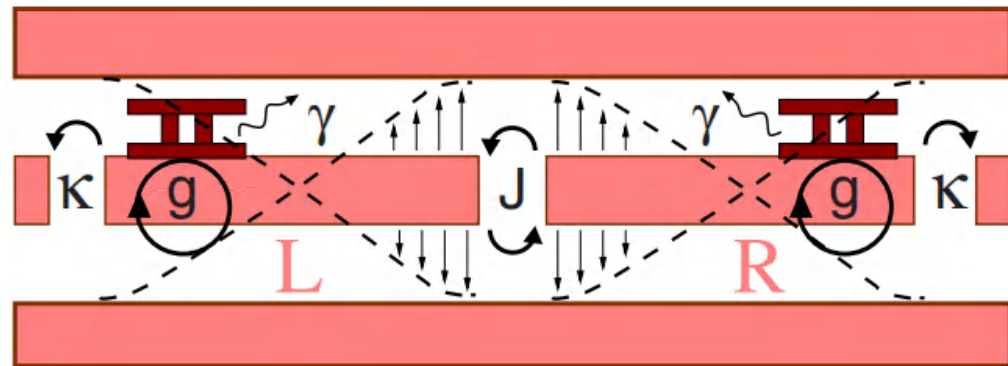
将其推广到两体，并在两侧分别耦合一个腔场

$$\hat{H}^{dimer} = \sum_{s=L/R} \hat{H}_s^{JC} - J(\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L),$$

其中 J 代表两侧声子的hopping，主方程为

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = i[\hat{\rho}, \hat{H}^{dimer}] + \sum_{i=L,R} \left(\frac{\kappa}{2} \mathcal{L}[\hat{a}_i] + \frac{\gamma}{2} \mathcal{L}[\hat{\sigma}_i^-] \right),$$

其中 $\mathcal{L}[\hat{O}] = 2\hat{O}\hat{\rho}\hat{O}^\dagger - \hat{\rho}\hat{O}^\dagger\hat{O} - \hat{O}^\dagger\hat{O}\hat{\rho}$ 为Liouvillian超算符，描述体系的耗散。



超导量子电路耦合示意图^[9]

制备相干态用于测量，考虑研究

$$\hat{I} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{2},$$

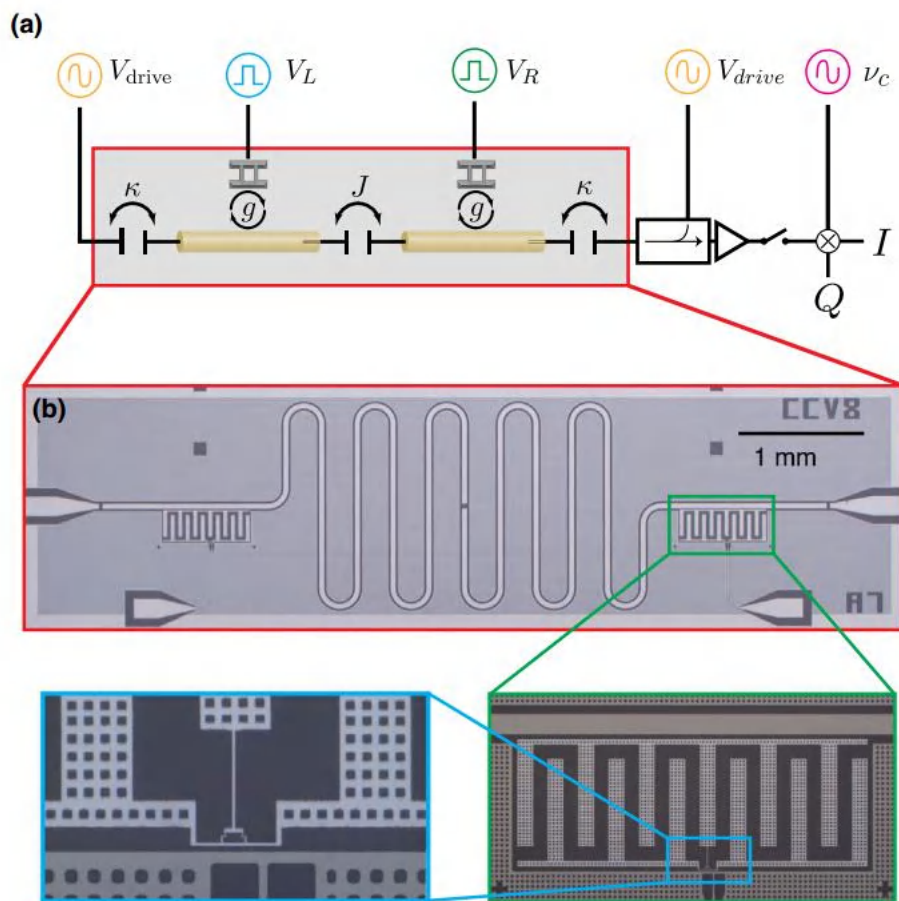
$$\hat{Q} = i \frac{\hat{a}^\dagger - \hat{a}}{2},$$

利用上式定义零差信号用于测量

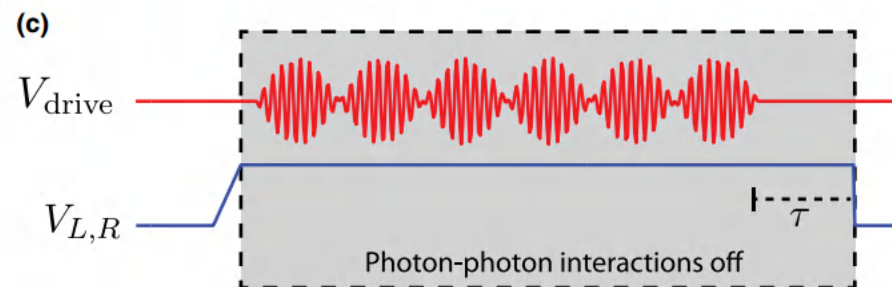
$$\xi = \langle \hat{I} \rangle^2 + \langle \hat{Q} \rangle^2,$$

而光子数应当为 $\langle \hat{I}^2 + \hat{Q}^2 \rangle$ 。

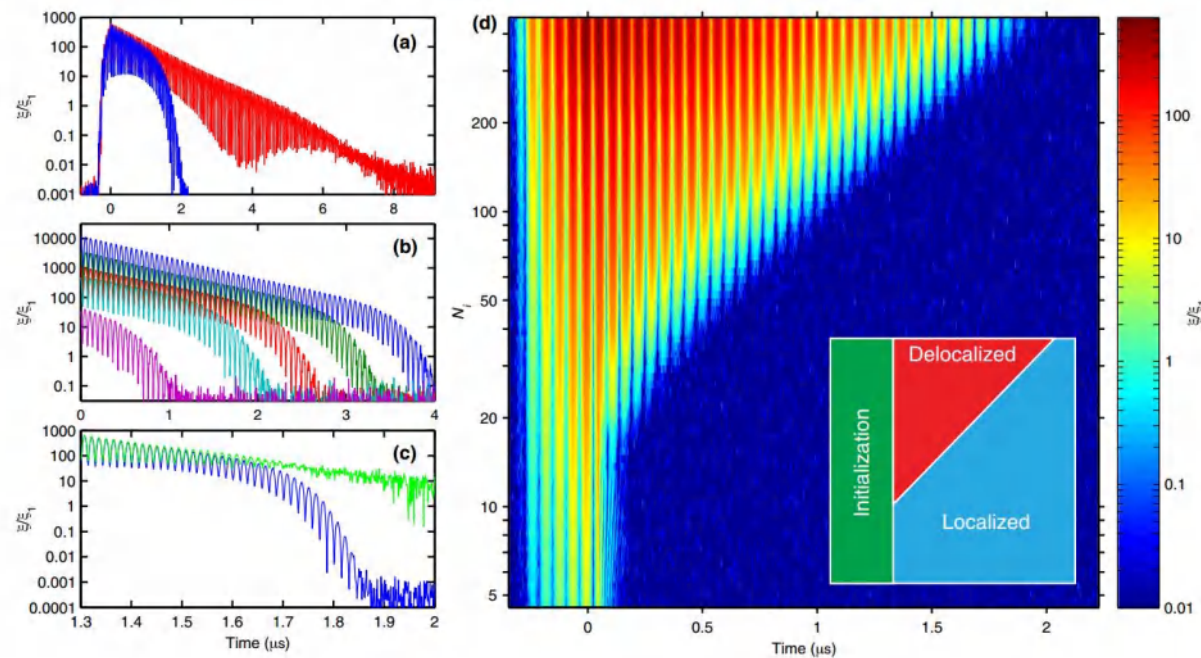
· 两体JC模型的耗散相变



实验装置图^[10]



信号脉冲波形^[8]



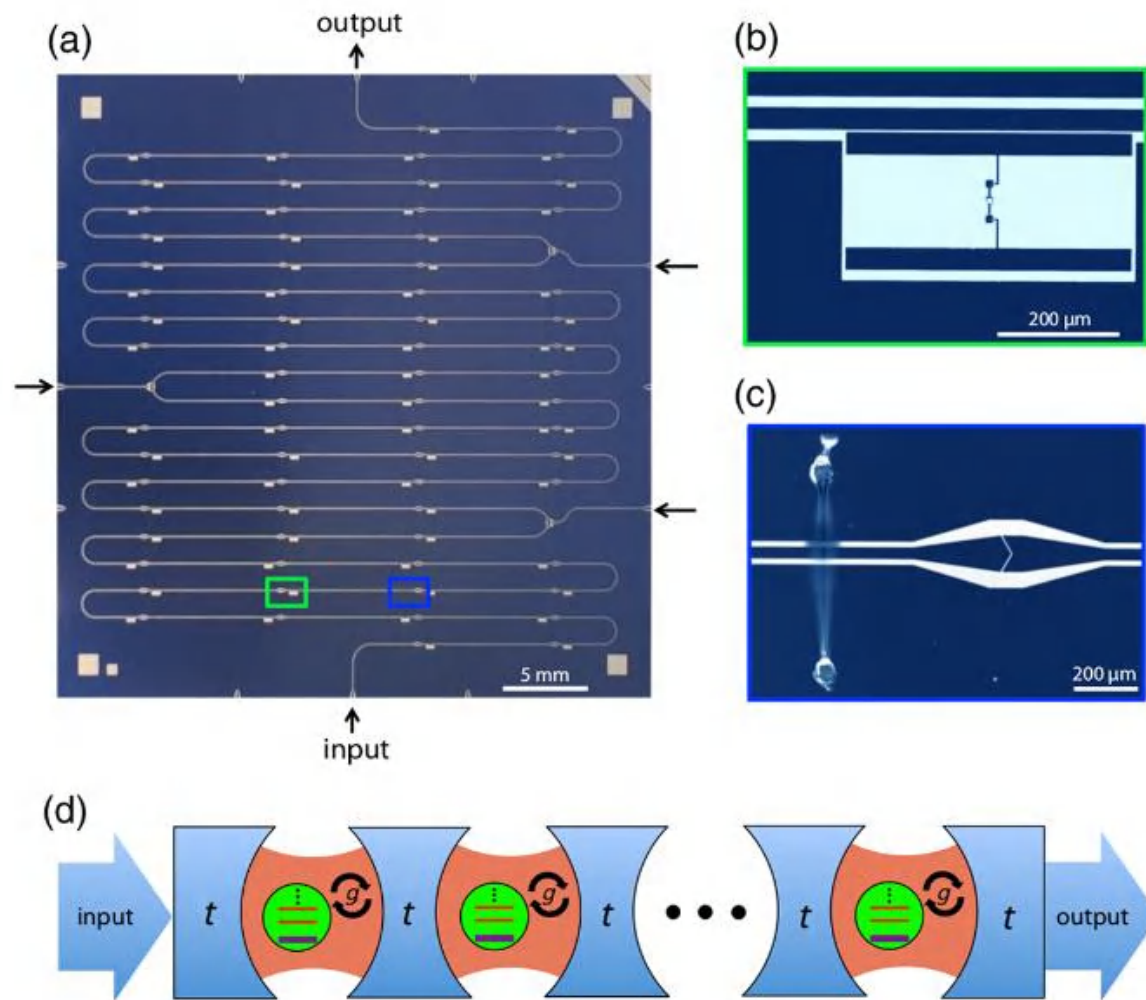
测量结果^[10]

· 一维cQED晶格中的耗散相变

利用一维cQED构建类似Bose-Hubbard模型，与腔进行耦合，对应的哈密顿量为

$$H = \sum_j \left(H_j^r + H_j^q + H_j^{rq} \right) + \sum_{\langle j,j' \rangle} H_{j,j'}^{hop} + H^d,$$

其中谐振器能量 $H_j^r = \hbar\omega_c a_j^\dagger a_j$; transmon量子比特能量 $H_j^q = \hbar\Omega_j b_j^\dagger b_j + \frac{1}{2} U b_j^\dagger b_j^\dagger b_j b_j$, 后者为Hubbard相互作用; 谐振器和量子比特间的弱相互作用, 利用旋转波近似 $H_j^{rq} = \hbar g_j (a_j b_j^\dagger + \text{H.c.})$; 近邻谐振器声子的hopping项 $H_{j,j'}^{hop} = \hbar t (a_j a_{j'}^\dagger + \text{H.c.})$; 第一个节点微波驱动项 $H^d = \hbar\epsilon(t) a_1 e^{i\omega_d t} + \text{H.c.}$ 。



实验装置图^[11]



· 一维cQED晶格中的耗散相变

考虑耗散，主方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\rho, H] + \sum_j \left(\frac{\kappa}{2} \mathcal{L}[a_j] + \frac{\Gamma}{2} \mathcal{L}[b_j] \right)$$

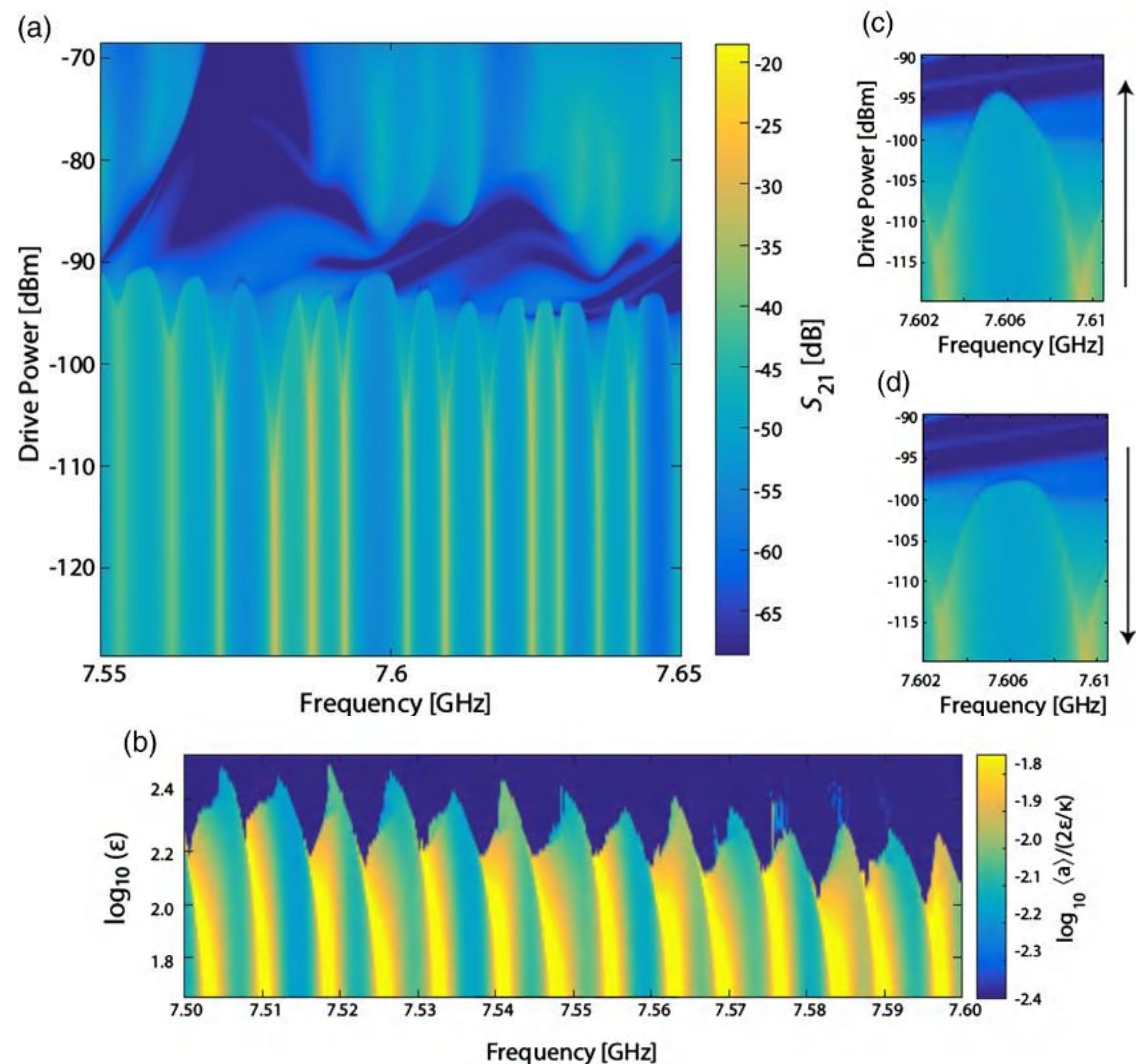
其中 $\mathcal{L}[\hat{O}]$ 为Liouvillian超算符。

取平均场近似 $\alpha_j = \langle a_j \rangle$ 和 $\beta_j = \langle b_j \rangle$ ，利用主方程求迹，得到平均值的动力学演化满足^[12]

$$i\dot{\alpha}_j = \left(\omega_c - \omega_p - i\frac{\kappa}{2} \right) \alpha_j + g_j \beta_j + t(\alpha_{j-1} + \alpha_{j+1}) + \epsilon \delta_{j,1},$$

$$i\dot{\beta}_j = \left(\Omega_j - \omega_p - i\frac{\Gamma}{2} \right) \beta_j + \frac{U}{\hbar} |\beta_j|^2 \beta_j + g_j \alpha_j.$$

可以计算得 $S_{21} \sim \langle a_j \rangle$ ，设驱动功率为 ϵ ，腔与量子比特耗散率均为 κ ，计算得右图(b)。



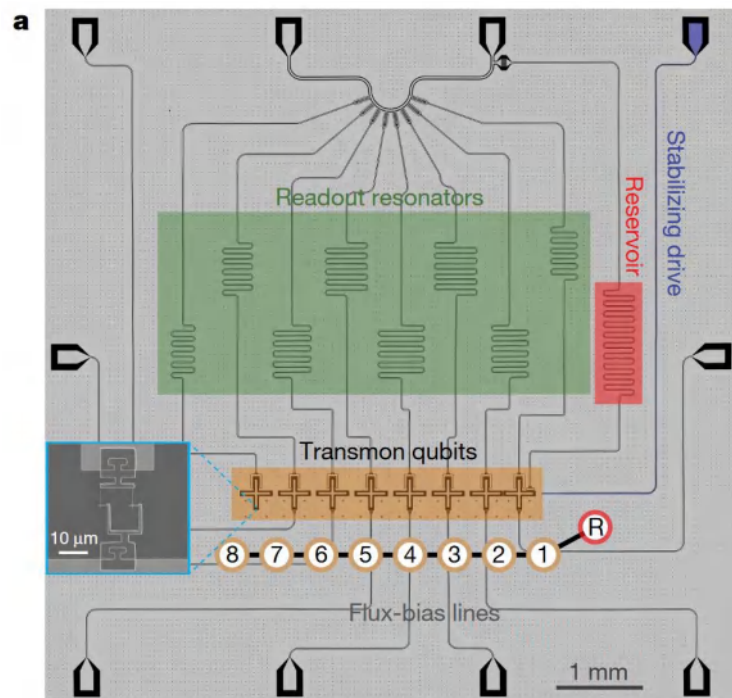
实验及仿真结果^[11]



· 耗散稳定的光子Mott绝缘体

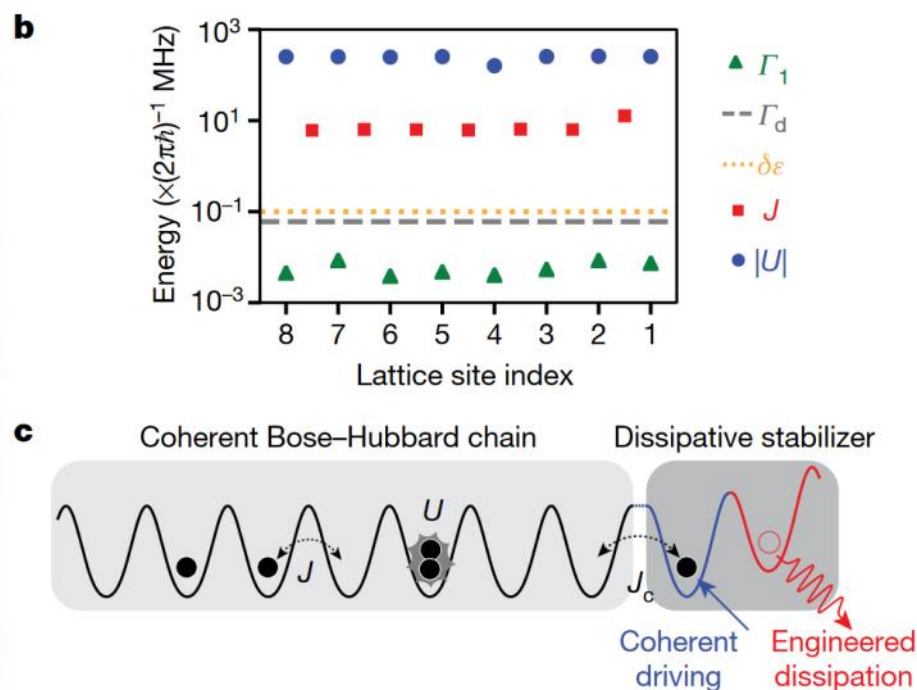
同样考虑Bose-Hubbard模型，哈密顿量为

$$H_{BH}\hbar = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) + \sum_i \epsilon_i n_i$$

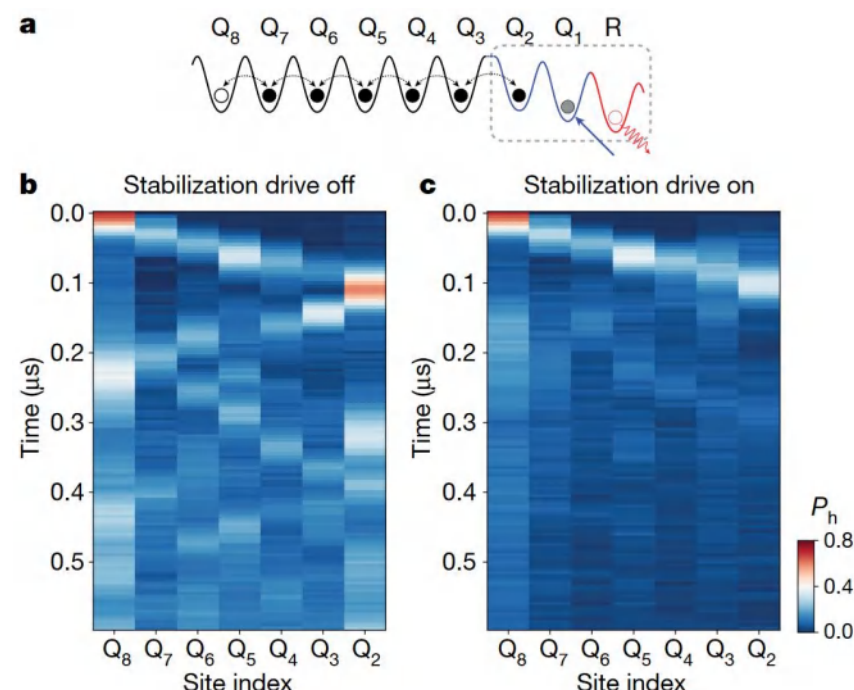


实验装置 [13]

2024/04/22



实验参数测量及等效模型 [13]



测量结果 [13]

22/33



中山大學

SUN YAT-SEN UNIVERSITY

Part.05

总结

• 总结

1

主方程：描述耗散体系的数学理论方法。

2

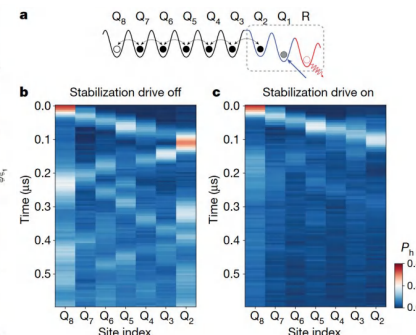
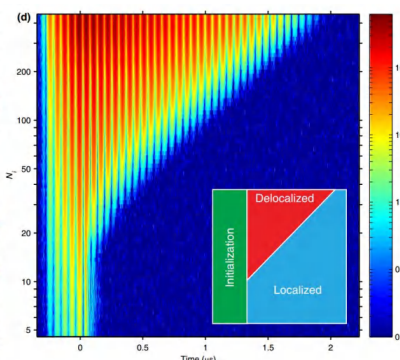
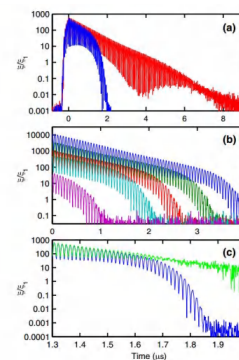
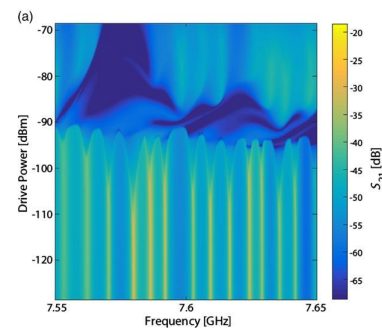
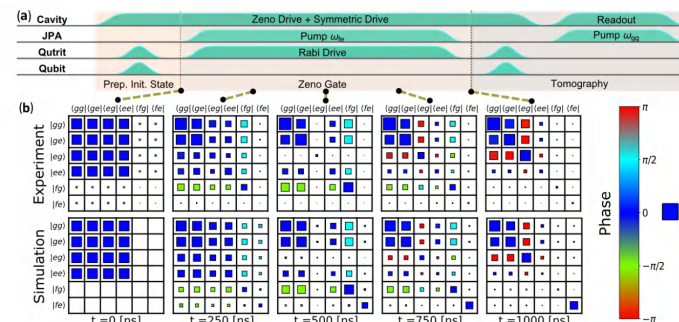
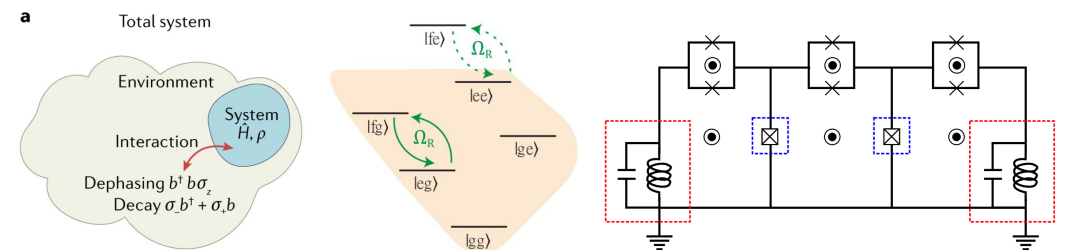
芝诺效应：利用快速测量维持系统状态，可以实现逻辑门。

3

量子纠错：利用耗散进行运算纠错，确保系统状态正确。

4

量子模拟：研究耗散给系统带来的相变，或实现稳定的相。





中山大學
SUN YAT-SEN UNIVERSITY

Thanks

國立中山大學
中山大学物理学院



报告人：路尚润 合作者：简彬洋



中山大學

SUN YAT-SEN UNIVERSITY

Part.00

附录



• References

- [1] Daniel Manzano. A short introduction to the Lindblad master equation. AIP Advances, 2020, 10 (2): 025106.
- [2] Breuer H P, Petruccione F. The Theory of Open Quantum Systems. Oxford: Oxford University Press, 2002.
- [3] 郭光灿,周祥发 著. 量子光学[M]. 北京: 科学出版社, 2022.
- [4] 张智明. 量子光学[M]. 北京: 科学出版社, 2015.
- [5] Harrington P M, Mueller E J, Murch K W. Engineered dissipation for quantum information science[J]. Nature Reviews Physics, 2022, 4(10): 660-671.
- [6] Itano, W. M., Heinzen, D. J., Bollinger, J. J. & Wineland, D. J. Quantum Zeno effect. Phys. Rev. A 41,2295–2300 (1990).
- [7] Geerlings, K. et al. Demonstrating a driven reset protocol for a superconducting qubit. Phys. Rev. Lett.110, 120501 (2013).
- [8] Kapit, E. Hardware- efficient and fully autonomous quantum error correction in superconducting circuits. Phys. Rev. Lett. 116, 150501 (2016).
- [9] S. Schmidt, D. Gerace, A. A. Houck, G. Blatter, and H. E. Türeci, Nonequilibrium Delocalization-Localization Transition of Photons in Circuit Quantum Electrodynamics. Phys. Rev. B 82, 100507 (2010).
- [10] Raftery, J., Sadri, D., Schmidt, S., Türeci, H. E. & Houck, A. A. Observation of a dissipation-induced classical to quantum transition. Phys. Rev. X 4, 031043 (2014).
- [11] Fitzpatrick, M., Sundaresan, N. M., Li, A. C., Koch, J. & Houck, A. A. Observation of a dissipative phase transition in a one-dimensional circuit QED lattice. Phys. Rev. X 7, 011016 (2017).
- [12] U. Naether, F. Quijandría, J. J. García-Ripoll, and D. Zueco, Stationary Discrete Solitons in a Driven Dissipative BoseHubbard Chain, Phys. Rev. A 91, 033823 (2015).
- [13] Ma, R. et al. A dissipatively stabilized Mott insulator of photons. Nature 566, 51–57 (2019).



· 主方程推导

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes \hat{I}_B + \hat{I}_S \otimes \hat{H}_B + \lambda \hat{H}_{SB},$$

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \rho(t)].$$

相互作用绘景

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_S \otimes \hat{I}_B + \hat{I}_S \otimes \hat{H}_B \quad \text{及} \quad U = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar},$$

$$\tilde{\rho}(t) = U^\dagger(t) \rho(t) U(t), \quad \tilde{H}_I(t) = U^\dagger(t) \hat{H}_{SB} U(t)$$

$$\frac{d\tilde{\rho}(t)}{dt} = \frac{\lambda}{i\hbar} [\tilde{H}_I(t), \tilde{\rho}(t)].$$

薛定谔绘景下

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_0, \rho(t)] + U(t) \frac{d\tilde{\rho}}{dt} U^\dagger(t).$$

形式解

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(t) = & \tilde{\rho}(0) + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t ds [\tilde{H}_I(s), \tilde{\rho}(s)] \\ & - \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 [\tilde{H}_I(s_1), [\tilde{H}_I(s_2), \tilde{\rho}(s_2)]] + O(\lambda^3). \end{aligned}$$

当系统与环境的耦合系数 λ 相对其他能量尺度是小量时，忽略高阶项，称为**Born**近似。

一般来讲，子系统与环境耦合较弱，假设其处于纯态

$$\tilde{\rho}(0) = \tilde{\rho}_S(0) \otimes \tilde{\rho}_B.$$

再假设环境较大，其发生微小变动，近似不变

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_B.$$

对环境取trace，获得子系统约化密度矩阵，其满足

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = \frac{\lambda}{i\hbar} \text{Tr}_B [\tilde{H}_I(t), \tilde{\rho}(0)] - \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^t ds \text{Tr}_B [\tilde{H}_I(t), [\tilde{H}_I(s), \tilde{\rho}(s)]].$$



• 主方程推导

一般来讲，算符可以写为

$$\tilde{H}_I = \sum_{\alpha} \hat{S}_{\alpha} \otimes \hat{B}_{\alpha}.$$

而假设环境始终处于热平衡态，密度矩阵只包含对角项，通过调节环境的能量零点，总可以有

$$\text{Tr}[\tilde{\rho}_B \hat{B}_{\alpha}] = 0.$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = -\frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^t ds \text{Tr}_B[\tilde{H}_I(t), [\tilde{H}_I(s), \tilde{\rho}(s)]].$$

上式包含了热库算符的关联函数

$$\text{Tr}_B[\hat{B}_{\alpha}(t) \hat{B}_{\beta}(s) \tilde{\rho}_B].$$

而可以假定算符之间的关联时间很短，将其近似成 $\delta(t-s)$ 函数，则进行替换，即Markov近似

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = -\frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^t ds \text{Tr}_B[\tilde{H}_I(t), [\tilde{H}_I(s), \tilde{\rho}(t)]].$$

假设考察时间远大于系统稳定的弛豫时间，则

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = -\frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^{\infty} ds \text{Tr}_B[\tilde{H}_I(t), [\tilde{H}_I(t-s), \tilde{\rho}(t)]].$$

假设

$$\hat{H}_I = \sum_{\alpha} \hat{A}_{\alpha} \otimes \hat{B}_{\alpha}$$

相互作用绘景下

$$\tilde{A}_{\alpha}(t) = e^{iH_S t/\hbar} \hat{A}_{\alpha} e^{-iH_S t/\hbar}, \quad \tilde{B}_{\alpha}(t) = e^{iH_B t/\hbar} \hat{B}_{\alpha} e^{-iH_B t/\hbar}.$$

此时会多一个时间因子，利用频率区分

$$\hat{A}_{\alpha} = \sum_{\omega} \hat{A}_{\alpha}(\omega) \quad \hat{A}_{\alpha}(\omega) = \sum_{a,b} \delta(\omega_{ab} - \omega) |a\rangle \langle a| \hat{A}_{\alpha} |b\rangle \langle b|,$$

$$\omega_{ab} = \omega_a - \omega_b, \text{ 及 } \delta(\omega_{ab} - \omega) = \begin{cases} 0, & \omega_{ab} \neq \omega \\ 1, & \omega_{ab} = \omega \end{cases}.$$

则变换后得

$$\tilde{A}_{\alpha}(\omega) = e^{-i\omega t} \hat{A}_{\alpha}(\omega)$$

$$\tilde{H}_I = \sum_{\alpha, \omega} e^{-i\omega t} \hat{A}_{\alpha}(\omega) \otimes \tilde{B}_{\alpha}(t) = \sum_{\alpha, \omega} e^{i\omega t} \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \otimes \tilde{B}_{\alpha}(t),$$



· 主方程推导

将哈密顿量带入有

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty ds \text{Tr}_B \left[\tilde{H}_I(t-s) \tilde{\rho}_S(t) \otimes \rho_B \tilde{H}_I(t) \right. \\ &\quad \left. - \tilde{H}_I(t) \tilde{H}_I(t-s) \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_B \right] + h.c. \\ &= \sum_{\substack{(\omega, \omega') \\ (\alpha, \beta)}} e^{i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega) \tilde{\rho}_S(t) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega') - \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega') \hat{A}_\beta(\omega) \tilde{\rho}_S(t) \right] \\ &\quad + e^{-i(\omega' - \omega)t} \tilde{\Gamma}_{\beta\alpha}(\omega) \left[\hat{A}_\alpha(\omega') \tilde{\rho}_S(t) \hat{A}_\beta^\dagger(\omega) - \tilde{\rho}_S(t) \hat{A}_\beta^\dagger(\omega) \hat{A}_\alpha(\omega') \right],\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \text{Tr}_B [\tilde{B}_\alpha^\dagger(t) \tilde{B}_\beta(t-s) \tilde{\rho}_B] \\ &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \text{Tr}_B [\tilde{B}_\alpha^\dagger(s) \tilde{B}_\beta(0) \tilde{\rho}_B].\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_{\beta\alpha}(\omega) &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty ds e^{-i\omega s} \text{Tr}_B [\tilde{B}_\beta^\dagger(t-s) \tilde{B}_\alpha(t) \tilde{\rho}_B] \\ &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty ds e^{-i\omega s} \text{Tr}_B [\tilde{B}_\beta^\dagger(0) \tilde{B}_\alpha(s) \tilde{\rho}_B] \\ &= [\Gamma_{\alpha\beta}(\omega)]^*\end{aligned}$$

假定系统和环境得耦合交换很快，利用旋转波近似

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) &= \sum_{\omega, (\alpha, \beta)} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega) \tilde{\rho}_S(t) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) - \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \hat{A}_\beta(\omega) \tilde{\rho}_S(t) \right] \\ &\quad + \tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega) \tilde{\rho}_S(t) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) - \tilde{\rho}_S(t) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \hat{A}_\beta(\omega) \right].\end{aligned}$$

定义

$$\Gamma(\omega) = [\Gamma_{\alpha\beta}(\omega)], \quad \tilde{\Gamma}(\omega) = [\tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}(\omega)] = \Gamma(\omega)^\dagger,$$

分为厄米和非厄米项

$$\Gamma(\omega) = \frac{\Gamma(\omega) + \Gamma(\omega)^\dagger}{2} + i \frac{\Gamma(\omega) - \Gamma(\omega)^\dagger}{2i}.$$

引入厄米矩阵

$$\gamma(\omega) = \Gamma(\omega) + \Gamma(\omega)^\dagger, \quad \Delta(\omega) = \frac{1}{2i} [\Gamma(\omega) - \Gamma(\omega)^\dagger].$$



· 主方程推导

带入有

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) = & \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}_{LS}, \tilde{\rho}_S(t)] + \sum_{\omega, \alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega) \tilde{\rho}_S(t) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \hat{A}_\beta(\omega), \tilde{\rho}_S(t) \right\} \right]. \end{aligned}$$

H_{LS} 为环境诱导的哈密顿量修正，对应QED中的兰姆位移

$$\begin{aligned} \hat{H}_{LS} &= \hbar \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \Delta_{\alpha\beta}(\omega) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \hat{A}_\beta(\omega). \\ \tilde{\Gamma}_{\alpha\beta} &= \Gamma_{\beta\alpha}^* = \left(\frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \text{Tr}_B [\tilde{B}_\beta^\dagger(s) \tilde{B}_\alpha(0) \tilde{\rho}_B] \right)^* \\ &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty ds e^{-i\omega s} \text{Tr}_B [\tilde{B}_\alpha^\dagger(0) \tilde{B}_\beta(s) \tilde{\rho}_B] \\ &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 ds e^{i\omega s} \text{Tr}_B [\tilde{B}_\alpha^\dagger(s) \tilde{B}_\beta(0) \tilde{\rho}_B], \end{aligned}$$

则

$$\gamma_{\alpha\beta} = \Gamma_{\alpha\beta} + \tilde{\Gamma}_{\alpha\beta} = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_{-\infty}^\infty ds e^{i\omega s} \text{Tr}_B [\tilde{B}_\alpha^\dagger(s) \tilde{B}_\beta(0) \tilde{\rho}_B].$$

可见， γ 矩阵是另一矩阵 M 的Fourier变换

$$M_{\alpha\beta} = \text{Tr}_B [\tilde{B}_\alpha^\dagger(s) \tilde{B}_\beta(0) \tilde{\rho}_B].$$

而 M 应当为正定的，因此 γ 也是正定的，且是厄米的，对角化

$$\mathbf{O} \gamma(\omega) \mathbf{O}^\dagger = \begin{pmatrix} \gamma_1(\omega) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2(\omega) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_N(\omega) \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_S(t) = & \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}_{LS}, \tilde{\rho}_S(t)] + \sum_{\omega, k} \gamma_k(\omega) \left[\hat{L}_k(\omega) \tilde{\rho}_S(t) \hat{L}_k^\dagger(\omega) \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \left\{ \hat{L}_k^\dagger(\omega) \hat{L}_k(\omega), \tilde{\rho}_S(t) \right\} \right], \end{aligned}$$



· 主方程推导

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{LS}, \tilde{\rho}_S(t)] + \sum_{\omega, k} \gamma_k(\omega) \left[\hat{L}_k(\omega) \tilde{\rho}_S(t) \hat{L}_k^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{L}_k^\dagger(\omega) \hat{L}_k(\omega), \tilde{\rho}_S(t) \right\} \right],$$

其中耗散算符(对 β 求和)

$$\hat{L}_k(\omega) = O_{k\beta} \hat{A}_\beta(\omega).$$

对于单频热库

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{LS}, \tilde{\rho}_S(t)] + \sum_k \gamma_k \left[\hat{L}_k \tilde{\rho}_S(t) \hat{L}_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k, \tilde{\rho}_S(t) \right\} \right],$$

变换为薛定谔绘景下

$$\dot{\rho}_S(t) = \mathcal{L}\rho_S(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_S + \hat{H}_{LS}, \rho_S(t)] + \sum_k \gamma_k \left[\hat{L}_k \rho_S(t) \hat{L}_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k, \rho_S(t) \right\} \right],$$

其中, $\gamma_k \geq 0$ 为耗散率, $\hat{L}_k$ 为系统与环境耦合导致系统状态发生改变的算符, 通常称之为 Lindblad 算符, 上述方程也称为 Lindblad 主方程。



• Lamb Shift

原子能级:

①中心力场 E_n

②SOC

$$H_{SO} = \frac{1}{2rm_0^2c^2} \frac{dV}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

③相对论修正

$$H_{RKE} = -\frac{p^4}{8m_0^3c^2}$$

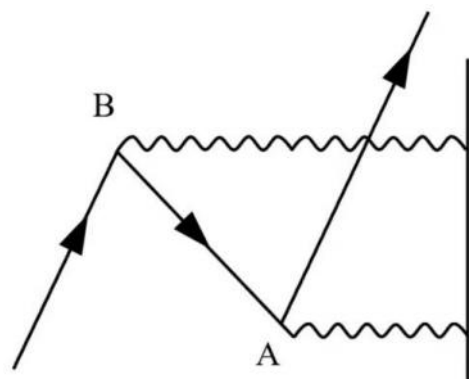
④达尔文项

$$H_D = \frac{1}{8} \frac{\hbar^2}{m_0^2c^2} \nabla^2 V$$

⑤Lamb 位移

$$\Delta E_{SE} = \frac{\alpha}{\pi} \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} F(nl_j, Z\alpha) m_e$$

虚光子过程



$$E_{RKE} = (Z\alpha)^2 (-E_n) \frac{1}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l + \frac{1}{2}} \right)$$

$$E_D = \frac{-(Z\alpha)^2 E_n}{n}, \quad l = 0$$

$$E_{SO} = (Z\alpha)^2 (-E_n) \frac{1}{2n} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l + \frac{1}{2})(l+1)}$$

