

Markovinen kvanttikollisimalli

LuK-tutkielma
Turun yliopisto
Fysiikka
2024
Fil. yo. Antti Peltola
Tarkastaja:
Dos. Kimmo Luoma

Turun yliopiston laatujärjestelmän mukaisesti tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu Turnitin OriginalityCheck-järjestelmällä

TURUN YLIOPISTO
Fysiikan laitos

Peltola, Antti Markovinen kvanttikollisiomalli

LuK-tutkielma, 27 s., 3 liites.
Fysiikka
Joulukuu 2024

Avoimet kvanttisysteemit ovat tärkeä tutkimuksen kohde niin perustutkimuksessa kuin soveltavassa tutkimuksessakin. Hyppy teoreettisista, pelkistetyistä suljetuista malleista avoimien systeemien dynamiikan tutkimiseen tarkoittaa todenmukaisempien systeemien kuvaamista; harva systeemi oikeassa maailmassa seuraa täysin yksinkertaistettuja malleja, vaikka ne usein antavatkin hyviä approksimaatioita.

Halu ja kyky hyödyntää kvanttimekaanisia ilmiöitä teknologiassa ja muissa sovelluksissa on nostanut ns. kvanttiteknologioiden tutkimisen suureen suosioon viime vuosikymmeninä. Tämä on tuonut pinnalle konseptuaalisesti yksinkertaisen ja perusteellisen kysymyksen: avoimet kvanttisysteemit ja niiden dynamiikan mallintaminen. Aihetta on lähestytty monesta suuntaa, mutta näistäkin suosiota viime vuosina saanut on erityisesti kvanttikollisiomallit (engl. quantum collision models), joissa avoimien systeemien dynamiikkaa lähestytään ajassa diskretisoitujen törmäysten (kollisioiden) ympäristön kanssa kautta. [2]

Tämän tekstin tarkoitus on esittää kvanttikollisiomalli-lähestymistavan konseptuaalinen ja matemaattinen pohjusta alustavalla, mutta perustellulla tasolla, tarjoten lukijalle osittain pedagoginen johdatus aiheeseen. Lisäksi tavoitteena on tarkastella jatkuvan vuorovaikutuksen mallin ja kollisiomallin eroja ja yhteyksiä. Käymme läpi yksinkertaisen mallin oletukset, toiminnan, kehityksen, jatkuvan ajan approksimaation, sekä lyhyesti mallin sovelluksia ja esimerkkejä.

Avoimien kvanttisysteemien (ja täten myös kvanttikollisiomallien) käsittely vaatii muutamia edellytyksiä. Ensimmäinen luku ja liite tutkielman lopussa käsittelevät näitä esitietoja johdattelevalla tarkkuudella pääaiheen näkökulmasta.

Asiasanat: Tila, avoin kvanttisysteemi, kollisiomalli, systeemin dynamiikka, master yhtälö, Lindblad-muoto

Sisällys

Johdanto	1
1 Esitietoja	2
1.1 Systemin tila	2
1.2 Tilavektorit ja yhdistetyt tilat	2
1.3 Tiheysoperaattorit ja sekoitetut tilat	4
2 Avoimet kvanttisysteemit ja kvanttikollisiohallit	5
2.1 Avoimista systeemeistä	5
2.2 Kollisiohalli	6
2.2.1 Markovisuus	9
2.2.2 Esimerkki yksinkertaisesta kollisiohallista	10
3 Systemin evoluutio	11
3.1 Aikakehitys	11
3.2 Lindblad-yhtälö kollisiohallissa	13
4 Kollisiohalli vs. perinteinen malli	14
4.1 Kvantittunut harmoninen oskillaattori	14
4.2 Jatkuva malli kollisiohallista	15
4.3 Kytkevävoimakkuus	17
4.4 Jatkuva Lindblad-muoto	18
4.5 Raja-arvon määrittelystä	19
5 Yhteenveto	20
Liite	21

Johdanto

Avoimella kvanttisysteemillä (AKS) tarkoitetaan kvanttisysteemiä, joka on tavallisen fysikaalisen määritelmän mukaan avoin; systeemi voi vapaasti vuorovaikuttaa ja vaihtaa energiaa ympäristönsä kanssa (kanoninen systeemi). Avoimien kvanttisysteemien tutkiminen on mielenkiintoista ja hyödyllistä erityisesti siksi, että oikeassa maailmassa systeemit ovat lähes aina avoimia ja vuorovaikuttavat hyvinkin paljon ympäristöidensä kanssa.

Avoimia kvanttisysteemejä voidaan lähteä tutkimaan ja mallintamaan eri tavoin. Perinteisesti AKS:ejä tutkitaan jatkuvan vuorovaikutuksen mallin avulla, kuitenkin usein fysiikassa [2]. Mielenkiinnon kohteena oleva systeemi on siis jatkuvassa vuorovaikutuksessa ympäristönsä kanssa ja kokonaissysteemin (systeemi ja ympäristö) dynamiikka kehittyy matemaattisesti jatkuvan mallin mukaan. Kontrastina tähän, lähivuosina on noussut myös suosiossa diskreetti lähestymistapa, (kvanttikollisiomallit (KM), jotka ovat myös tämän tekstin keskiössä. Tässä lähestymistavassa ympäristöä kuvataan koostuvan pienistä *osaympäristöistä* (subenvironment, ancilla) ja systeemin mallinnetaan vuorovaikuttavan näiden kanssa yksitellen, diskreetisti ajassa tietyn aikaintervallein erotettuna.

Mikä sitten motivoi tutkijoita suosimaan kvanttikollisiomalleja yhä enemmän? KM:t tarjoavat edullisia hyötyjä itse mallintamiseen. Kun mallimme koostuu ajassa diskreeteistä osista, mallin dynamiikan säätely on erityisen ”helppoa”. Esimerkiksi tekemällä erilaisia oletuksia alkutilanteesta ja osaympäristöjen välisistä vuorovaikutuksista, saadaan konstruoitua eri dynamiikkoja halutun lopputuloksen mukaisesti (ts. voidaan säätää mallia helposti kuvaamaan juuri tiettyä systeemiä, jota tutkitaan esimerkiksi kokeellisestikin muista syistä). Laskut KM:ien kanssa ovat myös luontaisesti helpompia käsitellä niiden diskreetin luonteensa ansiosta. Lisäksi, kuten myöhemmin nähdään, perinteinen jatkuvan vuorovaikutuksen malli saadaan approksimoitua suoraan KM:ien matematiikasta kohtuullisen vaivatta.

1 Esitietoja

1.1 Systeemin tila

Ensin vähän historiallista näkökulmaa. Kvanttimekaniikassa tarkastellaan alkeellisia systeemejä ja niiden vuorovaikutuksia. Tämän fysiikan matemaattiseen kuvaukseen siis haluttaisiin ideaalisesti kyky kuvata systeemin tilaa, kehitystä ja vuorovaikutuksia. Kokeellisesti jo varhain tunnettiin, että kvanttimekaanisen systeemin tilan mittaaminen pystyi tuottamaan eri arvoja ennalta-arvaamattomasti, noudattaen ilmeisiä todennäköisyyksiä. Halutaan siis systeemin tilan kuvaukseen kyky jotenkin sisällyttää informaatio näistä eri mittaustulosmahdollisuuksista, sekä niiden todennäköisyyksistä. Kohtuullisella loogisella hypyllä voisi arvata kuvata tätä dynamiikkaa lineaarialgebralla, siis vektoreilla ja matriiseilla, jotka voidaan usein kuvata listoina tai joukkoina lukuja.

Aikaisempi motivaatio esitettynä todetaan, että nykyään kvanttimekaniikassa systeemin tilaa kuvataan vektoreilla (puhtaat tilat) tai matriiseilla / operaattoreilla (mahdollistaa myös ns. sekoitettujen tilojen kuvaamisen) kompleksisessa Hilbertin avaruudessa, joka on vektoriavaruus varustettuna etäisyyden määrittävällä sisätulolla (ja on myös ns. *Cauchy-täydellinen* [9,13]). Hilbertin avaruus mahdollistaa ääretönulotteisen avaruuden käsittelyn ja on hyvin soveltuva kvanttimekaniikkaan, jossa (puhtaat) tilat (joita voi siis olla ääretön määrä) voidaan samaistaa vektoreiden kanssa. [4]

1.2 Tilavektorit ja yhdistetyt tilat

Tilavektoria kuvataan ket-notaatiolla $|\psi\rangle$. Tila voi olla määrätty tai superpositio useammasta tilasta, esimerkiksi elektronin tila superpositiona (matemaattisesti lineaarikombinaationa) sen spinin suhteen: $|\psi\rangle = a|+\frac{1}{2}\rangle + b|-\frac{1}{2}\rangle$. Superpositio voidaan

ilmaista yleisesti n -ulotteisena ortonormaalin kannan lineaarikombinaationa

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n a_i |\psi_i\rangle, \quad (1)$$

missä $\sum_{i=1}^n |a_i|^2 = 1$ sekä $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j}$, $\langle \psi | = |\psi\rangle^\dagger$, missä $\delta_{i,j}$ on Kroneckerin delta ja $|\psi\rangle^\dagger$ on vektorin $|\psi\rangle$ adjungaatti [4,7,9,13]. Vakiokertoimet a_i ovat ns. todennäköisyysamplitudeja, joiden itseisarvon neliö $|a_i|^2$ on kyseisen tilan todennäköisyys (Bornin sääntö [4,9,13]). Edellä mainittu ehto varmistaa todennäköisyyksien normalisointia, toisin sanoen, että superposition eri "osatilojen" todennäköisyyksien summa on yksi:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{i,j=1}^n a_i a_j^* \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \sum_{i=1}^n a_i a_i^* \langle \psi_i | \psi_i \rangle = \sum_{i=1}^n |a_i|^2 = 1,$$

missä a^* on a :n kompleksikonjugaatti. [4]

Jos systeemi koostuu useammasta osasysteemistä, niin koko systeemin tilaa voidaan kuvata osasysteemien tilavektoreiden *tensoritulona* (ks. liite **A.1**). Tässä esimerkiksi kahden kubitin, eli kaksitilasyntemien yhdistetty tila:

$$\sigma = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle = (a|0\rangle_A + b|1\rangle_A) \otimes (c|0\rangle_B + d|1\rangle_B)$$

$$\sigma = ac (|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B) + ad (|0\rangle_A \otimes |1\rangle_B) + bc (|1\rangle_A \otimes |0\rangle_B) + cd (|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B),$$

missä tensoritulotermit $|i\rangle \otimes |j\rangle$ luetaan, että "ensimmäinen" kubitin on tilassa i ja toinen tilassa j . Joskus myös kirjoitetaan $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \equiv |\psi, \phi\rangle$ [4]. Tämä merkintätapa on kuitenkin hieman harhaanjohtava; se antaa mielikuvan, että kyseessä on tavallinen tilavektori, vaikka todellisuudessa tarkoitetaan kahden vektorin tensorituloa, joka on matemaattisesti täysin eri objekti. Yleisesti n :n osasysteemin tensoritulo voidaan kirjoittaa lyhyemmin

$$|\sigma\rangle = \bigotimes_{i=1}^n |\psi_i\rangle. \quad (2)$$

Kun σ on tensoritulo korreloimattomista tiloista, kutsutaan sitä *tulotilaksi* (engl. product state). Kun tulon osat ovat normitettuja ket-vektoreita, niin kyseessä on

tulotila. Samaa formalismia käytetään myös tässä tutkielmassa kuvaamaan kiinnostuksen kohteena olevan systeemin ja sen ympäristön yhdistettyä systeemiä, kun $|S\rangle$ on systeemin tila ja $|E\rangle$ on ympäristön tila. Myöhemmin tosin käsitellään tiheysoperaattoerita (ks. luku 1.3) ket-vektoreiden sijaan.

$$|\sigma\rangle = |S\rangle \otimes |E\rangle. \quad (3)$$

Lisäkuriositeettina, systeemit voivat olla *lomittuneita* (*entangled*) keskenään. Tällöin systeemien välillä on yhteys, jonka kautta voidaan saada selville molempien tila mittaamalla vain toinen. Esimerkiksi yksi ns. *Bellin tiloista*:

$$|\Phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + |1\rangle_A \otimes |1\rangle_B),$$

missä nähdään että jos kubitin A mitataan tilassa $|0\rangle$, täytyy myös kubitin B olla tilassa $|0\rangle$, sillä se on ainut vaihtoehto kyseisessä A :n tilassa. [4]

1.3 Tiheysoperaattorit ja sekoitetut tilat

Systeemin tilaan ei voida aina liittää määrättyä tilavektoria. Esimerkiksi jos kubitin preparointi ei ole tiedetty, jolloin ennen mittausta se voisi tilassa $|0\rangle, |1\rangle, |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ tai $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ eri todennäköisyyksillä. Tällaista tilaa kutsutaan *sekoitetuksi tilaksi* (engl. mixed state) [2,4]. Sekoitettu tila on siis kuin distribuutio puhtaita tiloja. Tällaisia tiloja kuvataan *tiheysoperaattoreilla* (*-matriiseilla*):

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (4)$$

$$\rho = \sum_{i,j} p_{ij} |\psi_i\rangle \langle \psi_j|, \quad (4.1)$$

missä $|\psi_i\rangle$ ovat ρ :n ominaistiloja (puhtaita ja normalisoituja) ja p_i näiden ominaisarvoja (todennäköisyyksiä). Esitetty muoto (4) on ns. *spektraalihajotelma* ja (4.1) yleisempi muoto [9,13]. Tiheysoperaattorit ovat määritelmän mukaan hermiittisiä $\rho = \rho^\dagger$, positiivisia (pos. ominaisarvot) ja niiden jälki on yksi (todennäköisyyksien normalisointi) $\text{Tr } \rho = \sum_i p_i = 1$. Tiheysoperaattoreiden tensoritulo $\rho_1 \otimes \rho_2$

on myös tiheysoperaattori, kuten on unitaarisesti muunnettu tiheysoperaattorikin $\rho = \hat{U}\rho_0\hat{U}^\dagger$. [6]

Operaattorin \hat{A} jälki $\text{Tr} \hat{A}$ on hyödyllinen operaatio tiheysoperaattoreita käsitellessä. Sillä voidaan muun muassa laskea mittauksen odotusarvo

$$\langle A \rangle = \text{Tr}\{\rho\hat{A}\}, \quad (5)$$

missä kulmatut sulkeet merkitsevät odotusarvoa. Lisäksi on määritelty *osittainen jälki* Tr_i , jota hyödynnetään kun ollaan esimerkiksi kiinnostuneita yhdistetyn systeemin $\sigma = \rho_a \otimes \rho_b$ *reduoidusta dynamiikasta*:

$$\rho_a := \text{Tr}_b\{\sigma\} = \text{Tr}_b\{\rho_a \otimes \rho_b\}, \quad (6)$$

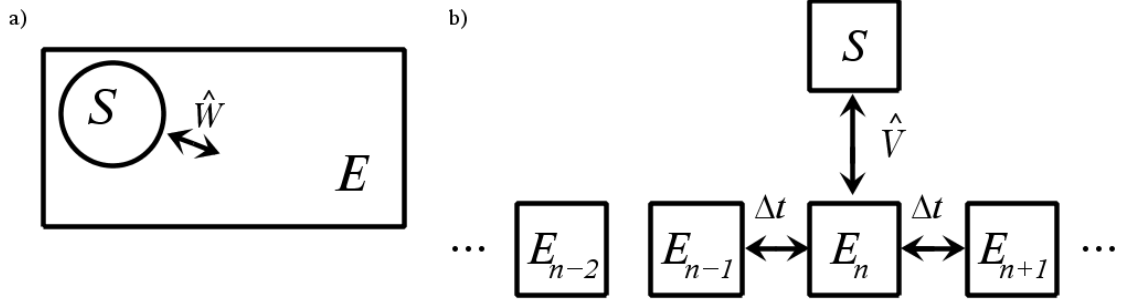
missä osittaisen jäljen alaindeksi merkkää minkä osajärjestelmän yli jälki lasketaan. Jälkeä ja osittaista jälkeä sekä niiden ominaisuuksia esitellään tarkemmin liitteessä **A.2**. [4,6]

2 Avoimet kvanttisysteemit ja kvanttikollisio mallit

2.1 Avoimista systeemeistä

Avoimien kvanttisysteemien dynamiikka on yksi modernin kvanttimekaniikan tärkeimmistä, mutta myös haastavimmista kysymyksistä [2]. Dynamiikkojen yleinen epäunitaarisuus on kiistatta yksi pääsyistä käsittelyn hankaluuteen. Ei voida johtaa liikeyhtälöä, joka kuvaisi yleisesti minkä tahansa avoimen systeemin dynamiikkaa. Niinpä siis avoimia systeemejä tutkiessa päädyimme muodostamaan erilaisia malleja kuvaamaan eri tavoin määriteltyjä/rajoitettuja systeemejä. Näistä "yksinkertaisimmillakin" malleilla on oikean maailman vastineensa ja hyötynsä sovelluksesta riippuen.

Annetun systeemin dynamiikkaa kuvaa niin kutsutut master-yhtälöt (MY) (engl. master equation). Ehkä olennaisin tunnetuista MY:istä on niin kutsuttu Gorini-



Kuva 1: Graafinen esitys mallin rakenteesta. a) Jatkuvan vuorovaikutuksen mallissa systeemin S ja ympäristön E välillä on jatkuva vuorovaikutus \hat{W} . b) Kvanttikollisiomallissa ympäristö on partitionoitu osiin E_i , jotka vuorovaikuttavat systeemin S kanssa ajassa diskretisoituna, ajan Δt välein. Osaympäristöiden E_i alaindeksi i kuvaa aika-askelta.

Kossakowski-Sudarshan-Lindblad (GKSL) master yhtälö, tai lyhyemmin Lindblad MY, joka kuvaa Markovista ("muistitonta", ks. luku 2.3) dynamiikkaa [5]. Johdamme tässäkin tutkielmassa Lindblad MY:n kollisiomallista (luku 3.2). Markovinen dynamiikka on harvoja tapauksia, joka tunnetaan varsin hyvin, mutta se on kuitenkin alkuehdoiltaan hyvin rajattu malli. Niinpä monet sovellukset ja uusi tutkimus keskittyy paljon vaikeampaan, mutta soveltuvampaan ei-Markoviseen ("muistilliseen") dynamiikkaan.

2.2 Kollisiomalli

Avoimia systeemejä tutkiessa olemme usein kiinnostuneita systeemistä S , joka vuorovaikuttaa ympäristön E kanssa. Kvanttikollisiomallin (KM) pääidea on dynamiikan diskretisoiminen törmäyksiin tai "kollisioihin". Tämä saavutetaan partitioimalla ympäristö E osiin, osaympäristöihin E_n (engl. ancilla). Kiinnostuksen kohteena oleva systeemi S sitten vuorovaikuttaa yksitellen näiden osien kanssa (ks. kuva 1). Kollisiomalleja voidaan konstruoida Markovisiksi tai ei-Markovisiksi alkuehtojen ja

kollisioiden määrittämisen kautta (tässä tutkielmassa keskitytään Markoviseen dynamiikkaan, myös määritelmässä). [2,5]

KM:iin voidaan tehdä jatkuvan ajan approksimaatio, jolla saadaan dynamiikalle jatkuva liikeyhtälö. Näin usein tehdäänkin tarkastelun lopuksi, mutta tämä ei ole välttämätöntä. KM:eja voidaan soveltaa sellaisinaan moniin systeemeihin, esimerkiksi kvanttioptiikassa, milloin KM:n oletukset ja rakenne kuvaavat hyvinkin intuitiivisesti ja aidosti fysikaalista tilannetta [5,10]. Niitä voidaan kuitenkin hyödyntää myös väylänä tutkia jatkuvaa dynamiikkaa edellä mainitun approksimaation kautta. KM:ia on usein helpompi tarkastella, jolloin on mielekästä tutkia ensin dynamiikkaa KM:n kautta, ja ottaa sitten jatkuvan ajan approksimaatio, jolla saadaan fysikaalisesti mielekkäämmät tulokset (tutkimuksen kohteena olevasta systeemistä riippuen tietenkin). Erityinen KM:ien vakuuttavuutta kasvattava ominaisuus on se, että niistä voidaan johtaa Lindblad MY ilman ylimääräisiä approksimaatioita, joita tyypillisesti tarvitaan [3,5].

Olkoon systeemi S ja ympäristö E , joka koostuu osaympäristöistä E_n . Oletetaan, että ympäristön osat ovat kaikki samassa alkutilassa. Systeemin ja ympäristön yhdistetyn systeemin (A.1) alkutila ilmaistaan tulotilana

$$\sigma_0 = \rho_0 \otimes \eta \otimes \eta \otimes \dots, \quad (7)$$

missä ρ_0 on systeemin alkutila ja η osaympäristöjen (yhteinen) alkutila. Myöhemmin tensoritulosymbolit jätetään kirjoittamatta. Oletetaan myös, että systeemin ja osaympäristöjen välisten kollisioiden kesto Δt on sama jokaisella kollisiolla (kuva 1). Tässä (Markovisessa) mallissa oletetaan, että osaympäristöt ovat keskenään korreloimattomia ja kaikki samassa alkutilassa. Lisäksi oletetaan, että systeemin S vuorovaikuttaa n :nen osaympäristön kanssa vain kerran. Tällöin jokaista S - n (systeemin ja n :nen osaympäristön) kollisiota kuvaa unitaarinen operaattori

$$\hat{U}_n = e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_S + \hat{H}_n + \hat{V}_n)\Delta t}, \quad (8)$$

missä $\hat{H}_S \equiv \hat{H}_S \otimes \mathbb{1}$ on S :n ja $\hat{H}_n \equiv \mathbb{1} \otimes \hat{H}_n$ n :nnen osaympäristön vapaat Hamiltonin operaattorit, sekä \hat{V}_n molempiin operoiva vuorovaikutusoperaattori (ks liite **A.1**). Hamiltonin operaattorit ovat tunnetusti itseadjungoituja $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ [9,13]. Myöhemmin tutkielmassa redusoitu Planckin vakio \hbar jätetään kirjoittamatta (asetetaan $\hbar = 1$, kuten on usein tapana). Huomaa, että siis \hat{U}_n ja \hat{V}_n operoivat sekä S :ään, että n :ään. [2,5]

Yhdistetyn systeemin tila n :n kollision jälkeen on siis

$$\begin{aligned} \sigma_n &= \hat{U}_n \cdots \hat{U}_1 \sigma_0 \hat{U}_1^\dagger \cdots \hat{U}_n^\dagger \\ &= \hat{U}_n \cdots \hat{U}_1 (\rho_0 \eta_1 \cdots \eta_n) \hat{U}_1^\dagger \cdots \hat{U}_n^\dagger \\ &= (\hat{U}_n \cdots (\hat{U}_2 (\hat{U}_1 \rho_0 \eta_1 \hat{U}_1^\dagger) \eta_2 \hat{U}_2^\dagger) \cdots \eta_n \hat{U}_n^\dagger) \eta_{n+1} \cdots, \end{aligned} \quad (9)$$

missä lopussa hyödynnettiin faktaa, että unitaariset \hat{U}_i kommutoivat tilojen η_j ($i \neq j$) kanssa, sillä ne operoivat eri Hilbertin avaruuksiin. Myöhemmin tilaoperaattorit η_m ($m > n$) jätetään kirjoittamatta, sillä ne eivät osallistu mitenkään n :n kollision tarkasteluun. Seuravaaksi voidaan eritellä yhdistetystä systeemistä systeemin S dynamiikka, ottamalla osittainen jälki (liite **A.2**) ympäristön yli σ_n :stä:

$$\begin{aligned} \rho_n &= \text{Tr}_E \{ \sigma_n \} = \text{Tr}_n \cdots \text{Tr}_1 \{ \sigma_n \} \\ &= \text{Tr}_n \{ \hat{U}_n \cdots \text{Tr}_2 \{ \hat{U}_2 \text{Tr}_1 \{ \hat{U}_1 \rho_0 \eta_1 \hat{U}_1^\dagger \} \eta_2 \hat{U}_2^\dagger \} \cdots \eta_n \hat{U}_n^\dagger \}, \end{aligned} \quad (10)$$

missä Tr_i on osittainen jälki yli i :nnen osaympäristön. Emme tässä tutkielmassa käsittele osaympäristöiden redusoitua dynamiikkaa. Kirjoitusta selventäeksi voidaan määrittää ns. *kollisiokuvaus* (*collision map*) $\mathcal{E}[\cdots]$

$$\rho_n = \mathcal{E}[\rho_{n-1}] = \text{Tr}_n \{ \hat{U}_n (\rho_{n-1} \eta_n) \hat{U}_n^\dagger \}, \quad (11)$$

jonka avulla voidaan kirjoittaa yhtälö (10) uudelleen:

$$\rho_n = \mathcal{E}[\cdots [\mathcal{E}[\mathcal{E}[\rho_0]]]] := \mathcal{E}^n[\rho_0]. \quad (12)$$

Tiheysoperaattoreiden muutoksia $\hat{U}\rho\hat{U}^\dagger$ yleisesti kutsutaan kartoiksi (map). Tässä voidaan jo nähdä aiemmin mainittu Markovisuus. Yhtälön (11) mukaan systeemin S

tila ρ_n riippuu vain aiemmasta tilasta, mikä voidaan yhtälön (12) avulla jatkaa aina alkutilaan ρ_0 asti. Koska systeemin n :s tila ei riipu muista kuin $(n-1)$:nnestä tilasta, se ei siis säilytä muistijälkeä aiemmista tiloista. Systeemin aiemmalla dynamiikalla ei siis ole mitään merkitystä haluttuun ajan hetkeen; dynamiikka on *muistiton* (Markovinen). [2,5]

Erittäin tärkeä karttojen luokka on *täysin positiiviset ja jäljen säilyttävät* (*completely positive and trace-preserving*) CPT-kartat, jonka kaltainen yllä esitetty kollisio-kuvauskin (11) on. CPT-kartat voidaan kirjoittaa *Krausin hajotelmana*

$$\rho' = \mathcal{M}[\rho] = \sum_m \hat{K}_m \rho \hat{K}_m^\dagger, \quad (13)$$

missä \hat{K}_m , $\sum_m \hat{K}_m^\dagger \hat{K}_m = \mathbb{1}$ ovat ns. Krausin operaattoreita [2]. Huomaa, että edellä annettu ehto Krausin operaattoreille ei suinkaan tarkoita unitaarisuutta niiden summalle.

2.2.1 Markovisuus

On jo todettu useaan otteeseen, että tähän asti kuvailtu dynamiikka on Markovista. Määritetään tässä alaluvussa tämä ominaisuus nyt tarkemmin. Yllä esitetystä mallista tekee Markovisen kolme pääoletusta: Kaikki osaympäristöt ovat aluksi korreloimattomia, osaympäristöt eivät vuorovaikuta keskenään, sekä että jokainen osaympäristö vuorovaikuttaa systeemin kanssa vain kerran [2]. Voidaan kuitenkin määrittää Markovisuus vieläkin tarkemmin.

Olkoon *dynaaminen kuvaus* Λ_n , joka kuvaa systeemin sen alkutilasta n :n kollisio-jälkeiseen tilaan:

$$\rho_n = \Lambda_n[\rho_0]. \quad (14)$$

Yllä esitetystä mallista dynaaminen kuvaus on muotoa (12) $\Lambda_n = \mathcal{E}^n$. Tällöin siis dynamiikka seuraa niin sanottua *puoliryhmäominaisuutta*:

$$\Lambda_n = \Lambda_{n-m} \Lambda_m, \quad (15)$$

missä m ja n ovat kokonaislukuja, ($m < n$).[2,8] Tunnetusti puoliryhmäominaisuu-
den täyttävät kartat noudattavat Lindblad MY:ä, joka kuvaa Markovisten systeemien
dynamiikkaa. Tämän ominaisuuden noudattamista voidaan siis pitää myös
eräänä Markovisuuden määritelmänä avoimien systeemien dynamiikassa. Voimme
kuitenkin laajentaa tätä määritelmää vielä hiukan.

Olkoon nyt alkutilanne niin, että unitaarinen (8) ja osaympäristön tila η riippu-
vat kehityksen askelnumerosta n , mutta aiemmin mainitut kolme pääoletusta yhä
pätevät. Tällöin dynaaminen kuvaus on muotoa

$$\Lambda_n = \mathcal{E}_n \cdots \mathcal{E}_1 \neq \mathcal{E}^n, \quad (16)$$

missä \mathcal{E}_i on kollisiokuvaus i :nnelle kollisiolle. Tämä dynaaminen kuvaus ei selväs-
tikään noudata yhtälöä (15), joten yllä olevan määritelmän mukaan dynamiikka ei
ole Markovista. Jokaisessa vaiheessa kuitenkin systeemi kehittyy täysin positiivisen
(CP, completely positive) kartan mukaan. Jos siis otetaan jatkuvan ajan approk-
simaatio (käsitellään myöhemmin), niin jokaisena hetkenä systeemi kehittyy täysin
positiivisesti, eli jokaisena hetkenä kehitystä voidaan periaatteessa kuvata GKSL-
MY:llä. Tätä Markovisuutta laajentavaa ominaisuutta kutsutaan CP-jaollisuudeksi
(CP-divisibility), ja Markovisuus voidaankin määritellä CP-jaollisuuden toteuttami-
senä. Edellä kuvattu tilanne edustaakin siis ajasta riippuvaa Markovista dynamiik-
kaa.[2,3,5]

2.2.2 Esimerkki yksinkertaisesta kollisiomallista

Tarkastellaan tässä alaluvussa yksinkertaista kubiteista koostuvaa KM:a, jota on
laajemmin tarkasteltu mm. viitteessä [2]. Olkoon sitten törmäykseen osallistuvat
kaksi kubittia A ja B Hilbertin avaruuksissa \mathcal{H}_2 , jotka voivat olla siis kumpikin
tilassa $|0\rangle, |1\rangle$ tai jossain niiden superpositiossa $a|0\rangle + b|B\rangle$. Nyt Hilbertin avaruudella

$\mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_2$ on kanta

$$\begin{aligned}
|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B &\equiv |0, 0\rangle_{AB} \\
|0\rangle_A \otimes |1\rangle_B &\equiv |0, 1\rangle_{AB} \\
|1\rangle_A \otimes |0\rangle_B &\equiv |1, 0\rangle_{AB} \\
|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B &\equiv |1, 1\rangle_{AB}.
\end{aligned} \tag{17}$$

Olkoon systeemin kehitystä ohjaava unitaarinen operaattori $\hat{U} = \hat{U}_{\text{SWAP}}$, joka on varsin yleinen *looginen portti* kvantti-informaatioteoriassa ja -kvanttitekniologioissa [1,2]. Operaattori yksinkertaisesti vaihtaa sen operoitavien systeemien tilat päittäin $\hat{U}_{\text{SWAP}}|i, j\rangle = |j, i\rangle$. Operaattori määräytyy täysin sen käyttäytymisestä kantavektoreihin, mikä on tarpeeksi tälle esimerkille. SWAP-portin voi yleistää vielä lisäämällä vapausasteen kuvaamaan törmäyksen voimakkuutta [2]. Tällöin saadaan osittaisvaihto-portti (partial SWAP gate) [1,2]

$$\hat{U}_n = e^{-i\theta\hat{U}_{\text{SWAP}}} = \cos\theta\mathbb{1} - i\sin\theta\hat{U}_{\text{SWAP}}, \tag{18}$$

missä vaiheparametri θ kuvaa vuorovaikutuksen voimakkuutta. Tällä operaattorilla saadaan eräs kollisiomalli, kun törmäykset määräävä unitaarinen (8) on muotoa (18).

3 Systeemin evoluutio

3.1 Aikakehitys

Tarkastellaan tässä luvussa systeemin evoluutiota, eli siis aikakehitystä. Aloitamme käsitellen diskreettiä aikakehitystä, siis aika-askelin Δt etenevää evoluutiota, jolla luomme pohjaa tulevalle jatkuvan ajan approksimaatiolle. Tämä tavoitteena ei kuitenkaan tarkoita, että diskreetti aikakehitys olisi vain askel seuraavaan; kollisiomallia voidaan soveltaa sellaisenaankin diskreettinä, esimerkiksi kvanttioptiikassa [1,2,5].

Aloitamme yhdistetystä tilasta (9) aika-askeleessa n . Pitäen mielessä, että jatkamme tästä jatkuvaan aikaan (ts. $\Delta t \rightarrow 0$), voimme huoletta ajatella vain lyhyen

kollisioajan Δt kehitystä. Voimme siis approksimoida unitaarista (8) sarjakehitelmänä toiseen asteeseen kollisioajan suhteen:

$$\hat{U} \approx \mathbf{1} - i(\hat{H}_0 + \hat{V}_n)\Delta t - \frac{1}{2}\hat{V}_n^2(\Delta t)^2, \quad (19)$$

missä $\hat{H}_0 = \hat{H}_S + \hat{H}_n$. Tässä on myös oletettu, että vuorovaikutustermi \hat{V}_n on paljon voimakkaampi kuin vapaat hamiltonin operaattorit \hat{H}_0 , jolloin termeistä $\mathcal{O}(\Delta t)^2$ vain \hat{V}_n :stä toisessa asteessa riippuvat termit jätetään mukaan. Voimme määritellä muutoksen yhdistetyn systeemin tilassa

$$\Delta\sigma_n = \hat{U}_n\sigma_n\hat{U}_n^\dagger - \sigma_n, \quad (20)$$

josta saadaan suoralla laskulla (ks. liite **A.3.1**)

$$\Delta\sigma_n = -i[\hat{H}_0 + \hat{V}_n, \sigma_n]\Delta t + (\hat{V}_n\sigma_n\hat{V}_n - \frac{1}{2}[\hat{V}_n^2, \sigma_n]_+)\Delta t^2, \quad (21)$$

missä $[\cdot, \cdot]_+$ on ns. antikommutaattori $[A, B]_+ = AB + BA$. [2,5]

Tarkastellaan nyt tilaa, jossa on otettu jälki muun ympäristön yli, paitsi n :nnen osaympäristön

$$\sigma_n = \rho_n \otimes \eta_n =: \rho_{Sn}. \quad (22)$$

Sijoittamalla tämän yhtälöön (21) ja jakamalla puolittain Δt :llä, saadaan

$$\frac{\Delta\rho_{Sn}}{\Delta t} = -i[\hat{H}_0 + \hat{V}_n, \rho_n\eta_n] + \Delta t \left(\hat{V}_n\rho_n\eta_n\hat{V}_n - \frac{1}{2}[\hat{V}_n^2, \rho_n\eta_n]_+ \right), \quad (23)$$

josta vielä ottamalla jälki yli η_n :n, saadaan ρ_n :n redusoitu dynamiikka (kaava (B.7))

$$\frac{\Delta\rho_n}{\Delta t} = -i[\hat{H}_S + \text{Tr}_n\{\hat{V}_n\eta_n\}, \rho_n] + \Delta t \text{Tr}_n \left\{ \hat{V}_n\rho_n\eta_n\hat{V}_n - \frac{1}{2}[\hat{V}_n^2, \rho_n\eta_n]_+ \right\}, \quad (24)$$

missä Tr_n on osittainen jälki yli n :nnen osaympäristön ja $\Delta\rho_n = (\mathcal{E} - \mathcal{I})[\rho_{n-1}]$, \mathcal{I} on identiteettikuvaus [2].

3.2 Lindblad-yhtälö kollisiomallissa

Voimme kirjoittaa yhtälön (24) tietyllä tapaa mielekkäämmin. Pienellä muutoksella nimittäin saamme yllä olevan diskreetin liikeyhtälön ns. *GKSL-muotoon* [5]. Kirjoittamalla osaympäristö η_n spektraalihajotelmana (C.2.1) ja määrittämällä *hyppyoperaattorit* (jump operators) $\hat{L}_{kk'}$, saadaan liikeyhtälö muotoon

$$\frac{\Delta\rho_n}{\Delta t} = -i \left[\hat{H}_S + \text{Tr}_n \{ \hat{V}_n \eta_n \}, \rho_n \right] + \sum_{k,k'} \left(\hat{L}_{kk'} \rho_n \hat{L}_{kk'}^\dagger - \frac{1}{2} [\hat{L}_{kk'}^\dagger \hat{L}_{kk'}, \rho_n]_+ \right), \quad (25)$$

missä operaattoreita $\hat{L}_{kk'} = \sqrt{p_k} {}_n \langle k' | \hat{V}_n | k \rangle_n \sqrt{\Delta t}$ kutsutaan kirjallisuudessa myös joskus *Lindblad operaattoreiksi*. Koska GKSL-muoto on niin tärkeä kollisiomallien osalta, on tämän viimeisimmänkin muunnoksen tekeminen esitetty tarkemmin liitteessä **A.3.2.** [2,8]

Muotoa (25) kutsutaan kirjallisuudessa *diskreetiksi Lindblad master-yhtälöksi* (discrete Lindblad master equation) [2]. Lindblad-muodon voidaan ajatella yleisemmin kuvaavan CPT-karttojen ohjaamaa dynamiikkaa. Siis jos dynamiikan määrää CPT-kartat (ja mm. että systeemi sekä osaympäristöt ovat korreloimattomia alkutilassa σ_0), niin dynamiikka voidaan useimmiten johtaa Lindblad-muotoon [2]. Käsittelemme myöhemmin tarkemmin Lindblad-yhtälöä, kun johdamme kollisiomallista sen jatkuvan version luvun 4 lopussa.

Mainittakoon tässä vaiheessa, että muodossa (25) on vielä ongelma jatkuvan ajan approksimaation suhteen. Vuorovaikutusoperaattori \hat{V} nimittäin oleellisesti riippuu käänteisesti aika-askeleen pituudesta $\hat{V} \propto \frac{1}{\sqrt{\Delta t}}$, kuten tulemme näkemään luvussa 4. Toisin sanoen, ensimmäinen termi muodossa (25) divergoituu ottaessamme raja-arvon $\Delta t \rightarrow 0$. Tämäkin ongelma kuitenkin saadaan ratkaistua tarkastellessamme termiä $\text{Tr}_n \{ \hat{V}_n \eta_n \}$ tarkemmin.

4 Kollisiomalli vs. perinteinen malli

Tässä luvussa käsittelemme jatkuvan ajan approksimaation, päätyen kollisiomallista perinteisempään jatkuvan ajan malliin ns. *vuorovaikutuskuvassa* [3]. Tätä varten tarkastelemme tuttua tapausta kvanttioptiikan puitteissa, missä systeemin S ja osaympäristöt η_i ovat kvantittuneita harmonisia oskillaattoreita (KHO) [5,10]. Tätä tarkastelua varten oleelliset tiedot KHO:ista esitetään luvussa 4.1. Pyrimme ymmärrykseen mallien eroista niiden algebrallisen rakenteen tarkastelun kautta, laskien läpi tarvittavat muunnokset KM:stä jatkuvaan malliin.

4.1 Kvantittunut harmoninen oskillaattori

Esittelen tässä luvussa kvantittuneen harmonisen oskillaattorin (KHO) niissä puitteissa, missä sitä tässä tutkielmassa tarvitaan; bosonisen kentän moodien kuvaamiseen. Tarkastellaan yksiulotteista harmonista oskillaattoria, jonka Hamiltonin operaattori on

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \quad (26)$$

missä m on massa, ω on oskillaatiotaajuus, sekä \hat{p} ja \hat{x} ovat tavalliset multiplikaatiiviset paikka- ja liikemääräoperaattorit. Määrittämällä hävittämis- ja luomisoperaattorit

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega}}\hat{p}, \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega}}\hat{p}, \quad (27)$$

voidaan KHO:n Hamiltonin operaattori kirjoittaa muodossa

$$\hat{H} = \omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right), \quad (28)$$

missä $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ on lukumääräoperaattori (huom. tässä yhä $\hbar = 1$). [4,12]

KHO-systeemille voidaan muodostaa ortonormaali energiatilojen kanta, lukumäärätilojen kanta $\{|n\rangle\}$, jonka alkioit ovat lukumääräoperaattorin \hat{n} ominaistiloja

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle, n = 0, 1, 2, \dots \quad (29)$$

Lisäksi hävittämis- ja luomisoperaattoreille pätee

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (30)$$

missä on lisäksi erikseen määritelty $\hat{a}|0\rangle = 0$. Lukumäärätilat $|n\rangle$ ovat siis kvantittuneen harmonisen oskillaattorin energiatiloja, joita vastaavat energiatasot saadaan operoimalla (28) lukumäärätilaan: $\hat{H}|n\rangle = \omega(n+1/2)|n\rangle$. [4]

4.2 Jatkuva malli kollisiomallista

Olemme nyt valmiita siirtymään kollisiomallista perinteiseen jatkuvan vuorovaikutuksen malliin. Olkoon systeemi S , joka on vuorovaikutuksessa jatkuvan bosonikentän kanssa, jota kutsumme ympäristöksi E . Haluamme siis siirtyä taajuuksien ω määrämästä esityksestä kollisiomallipuitteissa jatkuvan aikasuureen t määräämään esitysmuotoon (eli siis jatkuvaan malliin).

Systeemi ja ympäristö ovat yhdistetyssä tilassa σ_n , missä n kuvaa aikakehityksen vaihetta (aika-askelta) kollisiomallissa. Yhdistetyn systeemin Hamiltonin operaattori on muotoa $\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{V}$, missä \hat{H}_S ja \hat{H}_E ovat systeemin ja ympäristön vapaat Hamiltonin operaattorit ja \hat{V} on molempiin operoiva vuorovaikutusoperaattori. \hat{H} voidaan kirjoittaa auki

$$\hat{H} = \frac{\omega_s}{2}\hat{\sigma}_z + \sum_{\lambda} \omega_{\lambda} \hat{B}_{\lambda}^{\dagger} \hat{B}_{\lambda} + \sum_{\lambda} \left(g_{\lambda} \hat{\sigma}_- \hat{B}_{\lambda}^{\dagger} + g_{\lambda}^* \hat{\sigma}_+ \hat{B}_{\lambda} \right), \quad (31)$$

missä ω_i ovat oskillaattoreiden taajuuksia, \hat{B}_{λ} ja $\hat{B}_{\lambda}^{\dagger}$ ympäristön kentän hävittämis- ja luomisoperaattorit, g_{λ} kytkentävoimakkuus sekä $\hat{\sigma}_z$ ja $\hat{\sigma}_{\pm}$ pauli-operaattoreita. Myöhemmin erityisen tärkeäksi koittuu vuorovaikutusermi \hat{V} ja kytkentävoimakkuus g_{λ} , jolla ratkaisemme aiemmin esitetyt raja-arvon $\Delta t \rightarrow 0$ aiheuttamat ongelmat.

Siirrytään nyt ns. vuorovaikutuskuvaan, eli siis esitysmuotoon, jossa aikakehitystä kuvataan sekä tilan, että operaattoreiden muutoksilla [8,9]. Muunnoksessa tuomme samalla esille jatkuvan ajan suureen t . Liitteessä **A.4** esitetyin vaihein saadaan

Hamiltonin operaattoriksi

$$\begin{aligned}\hat{H}(t) &= \frac{\omega_s}{2}\hat{\sigma}_z + \sum_{\lambda} \left(g_{\lambda}\hat{\sigma}_- \hat{B}_{\lambda}^{\dagger} e^{i\omega_{\lambda}t} + g_{\lambda}^* \hat{\sigma}_+ \hat{B}_{\lambda} e^{-i\omega_{\lambda}t} \right) \\ &= \frac{\omega_s}{2}\hat{\sigma}_z + \sqrt{\gamma} \left(\hat{\sigma}_- \hat{b}_{\lambda}^{\dagger}(t) + \hat{\sigma}_+ \hat{b}_{\lambda}(t) \right),\end{aligned}\quad (32)$$

missä viimeisessä vaiheessa määriteltiin operaattori $\hat{b}(t) = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \sum_{\lambda} g_{\lambda}^* e^{-i\omega_{\lambda}t} \hat{B}_{\lambda}$, jossa normalisointitermi $\gamma = \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2$ [2]. Tästä operaattorista $\hat{b}(t)$ haluaisimme siis jatkuvan mallin bosonisen kentän hävittämisooperaattorin (ja vastaavasti $\hat{b}^{\dagger}(t)$:stä luomisoperaattorin), ts. haluamme sen toteuttavan kommutaatiorelaation $[\hat{b}(t), \hat{b}^{\dagger}(s)] = \delta(t-s)$, missä $\delta(t-s)$ on deltafunktio. Tarkastellaan siis kommutaattoria

$$\begin{aligned}[\hat{b}(t), \hat{b}^{\dagger}(s)] &= \hat{b}(t)\hat{b}^{\dagger}(s) - \hat{b}^{\dagger}(s)\hat{b}(t) \\ &= \frac{1}{\gamma} \sum_{\lambda, \lambda'} g_{\lambda}^* g_{\lambda'} e^{-i\omega_{\lambda}t} e^{i\omega_{\lambda'}s} \left(\hat{B}_{\lambda} \hat{B}_{\lambda'}^{\dagger} - \hat{B}_{\lambda'}^{\dagger} \hat{B}_{\lambda} \right),\end{aligned}\quad (33)$$

missä määritelmään mukaan viimeinen sulkutermi on määritelmän mukaan $[\hat{B}_{\lambda}, \hat{B}_{\lambda'}^{\dagger}] = \delta_{\lambda\lambda'}$. Tämä sijoittamalla saadaan

$$= \frac{1}{\gamma} \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 e^{-i\omega_{\lambda}(t-s)}.\quad (34)$$

Jos nyt määritellään funktio

$$\mathcal{J}(\omega') = \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 \delta(\omega' - \omega_{\lambda}),\quad (35)$$

niin voidaan (34) kirjoittaa muodossa

$$[\hat{b}(t), \hat{b}^{\dagger}(s)] = \frac{1}{\gamma} \int d\omega' \mathcal{J}(\omega') e^{-i\omega'(t-s)},\quad (35)$$

hyödyntäen Diracin deltafunktion määritelmää [4]. Tässä vaiheessa täytyy tehdä oletus funktiosta \mathcal{J} . Jos oletetaan tarkastelun kohdistuvan systeemiin, jossa taaajuuden ω moodit ovat tiheät ω' arvojoukossa, niin $\mathcal{J}(\omega')$ on vakio. Riittää, että tämä oletus on voimassa tarkasteltavalla välillä, milloin oletus ei ole liian rajoittava. Oletuksen alla saadaan $\mathcal{J} = \frac{1}{2\pi} \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 = \gamma/2\pi$, jolloin voidaan kirjoittaa

$$[\hat{b}(t), \hat{b}^{\dagger}(s)] = \frac{1}{2\pi} \int d\omega' e^{-i\omega'(t-s)} = \delta(t-s),\quad (36)$$

missä taas hyödynnettiin deltafunktion määritelmää. Tämä on juurikin hävittämisen ja luomisoperaattoreiden kanoninen kommutaatiorelaatio jatkuvan bosonisen kentän tapauksessa, mikä haluttiinkin.

Huomataan, että bosonisen kentän operaattorit saadaan diskreettinä Fouriermuunnoksena kollisiomallin operaattoreista

$$\hat{b}(t) = \sum_{\lambda} \frac{g_{\lambda}^*}{\sqrt{\gamma}} e^{-i\omega_{\lambda}t} \hat{B}_{\lambda}, \quad (37)$$

mikä käy intuitiivisesti järkeen: Fourier muunnoksella saadaan diskreetistä spektristä jatkuva. Sama tarkastelu voidaan myös tehdä, missä summat ovat integraaleja ja tehdään integraalimuotoinen Fourier muunnos [10].

Muunnoksen jatkuvaan malliin voi tehdä muillakin menetelmin, joita on esitelty esimerkiksi viitteessä [2]. Samassa teoksessa on esitetty myös muunnos toiseen suuntaan; kollisiomalli johdetaan jatkuvasta mallista (teoksessa luku *Collision models from conventional models*).

4.3 KytKentävoimakkuus

Olemme nyt nähneet, kuinka kollisiomallista päästään vuorovaikutuskuvaan jatkuvan ajan parametrisoiman bosonisen kentän kanssa. Tämä antaa meille tukea jatkuvan ajan approksimaation tekemiseen Lindblad-yhtälön (25) tapauksessa. Palataan raja-arvon $\Delta t \rightarrow 0$ ongelmaan luvussa 3.2.

Lindblad-yhtälön divergoitumisen ongelmaksi vaadimme kytKentävoimakkuuden riippuvan ajasta. Jotta dynamiikka olisi hyvin määritelty, niin vaadimme lisäksi $|g_{\lambda}|^2 \Delta t = \gamma$, kun $\Delta t \rightarrow 0, g \rightarrow \infty$. Toisin sanoen ehto

$$\gamma = \Delta t |g_{\lambda}|^2 \quad (38)$$

takaa sen, että ns. *dissipaattoritermi* (eli hyppyoperaattoreista riippuva termi) yhtälössä (25) konvergoituu rajalla $\Delta t \rightarrow 0$ (siis relaation $g_{\lambda} \propto 1/\sqrt{\Delta t}$ ansiosta). [2]

4.4 Jatkuva Lindblad-muoto

Saimme luvussa 3 johdettua diskreetin Lindblad-MY:n, sekä pohjustimme jatkuvan ajan approksimaatiota muunnoksella luvussa 4. Voimme nyt siis johtaa jatkuvan Lindblad-MY:n muodosta

$$\frac{\Delta\rho_n}{\Delta t} = -i \left[\hat{H}_S + \text{Tr}_n\{\hat{V}_n\eta_n\}, \rho_{n-1} \right] + \sum_{k,k'} \left(\hat{L}_{kk'} \rho_{n-1} \hat{L}_{kk'}^\dagger - \frac{1}{2} [\hat{L}_{kk'}^\dagger \hat{L}_{kk'}, \rho_{n-1}]_+ \right). \quad (\text{Re: 25})$$

Termi $\text{Tr}_n\{\hat{V}_n\eta_n\}$ vielä divergoituu rajalla $\Delta t \rightarrow 0$, joten joudumme tekemään lisäapproksimaation. Vaaditaan siis, että $\text{Tr}_n\{\hat{V}_n\eta_n\} = 0$ [11]. Tämän voi saavuttaa vaihtoehtoisesti asettamalla rajoitteen joko koko systeemin alkutilanteelle tai \hat{V} :lle. Raja-arvon määrittämiseksi voidaan tehdä myös erilaisia oletuksia dynamiikasta. Näitä pohditaan tarkemmin luvussa (4.5).

Diskreetti Lindblad-MY on nyt siis muotoa

$$\frac{\Delta\rho_n}{\Delta t} = -i \left[\hat{H}_S, \rho_{n-1} \right] + \sum_{k,k'} \left(\hat{L}_{kk'} \rho_{n-1} \hat{L}_{kk'}^\dagger - \frac{1}{2} [\hat{L}_{kk'}^\dagger \hat{L}_{kk'}, \rho_{n-1}]_+ \right), \quad (39)$$

josta voidaan huoletta ottaa raja-arvo $\Delta t \rightarrow 0$, milloin saadaan

$$\frac{d\rho_S}{dt} = -i \left[\hat{H}_S, \rho_S \right] + \sum_{k,k'} \left(\hat{L}_{kk'} \rho_S \hat{L}_{kk'}^\dagger - \frac{1}{2} [\hat{L}_{kk'}^\dagger \hat{L}_{kk'}, \rho_S]_+ \right), \quad (40)$$

joka on juurikin tunnettu Lindblad-MY jatkuvassa vuorovaikutuksessa [2,4,8,11]. On merkittävää huomata, että (40) seuraa kollisioimallista jatkuvan ajan approksimaationa ilman muita vahvoja approksimaatioita, joita tarvitaan tavallisesti useita yhtälön johtamiseksi [11]. Lindblad-MY:n johtamista kollisioimallista ja mikroskooppisesta mallista vertaillaan tarkemmin viitteessä [3].

Vaikka jatkuva malli saatiin johdettua kollisioimallista (määritellyssä viitekehyyksessä), niin on huomattava että mallit toimivat oleellisesti eri tavoin. (Markovisessa) KM:ssa systeemi S vuorovaikuttaa ympäristön E kanssa paloittain ajassa. Jatkuvassa mallissa taas S vuorovaikuttaa koko ympäristön E kanssa samaan aikaan. KM:n

suurin vahvuus onkin vuorovaikutuksen partitiominen, joka keventää laskennallista taakkaa merkittävästi. On siis käytännön tutkimuksen puolesta merkittävä tulos yhdistää nämä kaksi mallia.

4.5 Raja-arvon määrittelystä

Viime luvussa täytyi tehdä rajoittava oletus systeemin dynamiikasta joko alkuehtoihin tai vuorovaikutukseen, jotta derivaatta olisi hyvin määritelty. Näin saatiin tulokseksi avoin Lindblad-muotoinen dynamiikka. On myös mahdollista päätyä eri muotoiseen avoimeen dynamiikkaan tarkastelemalla erilaista rajaa.

Voidaan myös esimerkiksi tarkastella dynamiikkaa, jossa kytkentävoimakkuus on aikavakio $g_\lambda = \Gamma$. Tällöin muodossa (25) ensimmäinen kommutaattoritermi tulee dominoivaksi ja summalauseke approksimoidaan nolllaksi. Aikakehitys rajalla $\Delta t \rightarrow 0$ on tällöin Liouville-von Neumann (tai lyhyemmin von Neumann) -muotoa

$$\frac{d\rho_S}{dt} = -i \left[\hat{H}_S + \text{Tr}_n \{ \hat{V}_n \eta_n \}, \rho_S \right], \quad (41)$$

Vaikka von Neumann-muoto kuvaa useimmiten suljetun systeemin dynamiikkaa, niin yhtälössä (41) jälkitermi voi riippua aika-askeleesta n (joko \hat{V} :n tai η :n kautta), jolloin siis kokonais-Hamiltonin operaattori riippuu olennaisesti ajasta. Ajasta riippuva Hamiltonin operaattori johtaa ajasta riippuvaan energiaan, eli avoimen systeemin kuvaukseen. [4]

Molemmissa esitetyissä raja-arvon lähestymistavoissa täytyi olettaa osan dynamiikan kuvauksesta jäävän merkityksettömäksi ($= 0$). Olennaisesti yhtälön (25) termit kehittyvät eri aikaskaaloilla: $\sqrt{\Delta t}$ ja Δt . Oletukset termien kontribuutiosta dynamiikkaan perustuu lopulta vuorovaikutuksen toimimiseen eri tavoin näillä aikaskaaloilla.

5 Yhteenveto

Tutkielmassa esitettiin kvanttikollisiomallien lähtökohdat ja mallin matemaattista rakennetta. Lukijaa johdateltiin aiheeseen avoimien systeemien esityksillä kvanttimekaniikassa, sekä yksinkertaisella Markovisella kollisiomallilla. Ymmärryksen tueksi esiteltiin vaaditulla tarkkuudella matemaattiset esitiedot ja laskut läpinäkyvästi. Yksinkertainen kollisiomalli perustana johdettiin muunnos laajalti tunnetumpaan jatkuvan ajan kuvaamaan dynamiikkaan ja vuorovaikutukseen, käyttäen kvanttiopitiikasta tuttua viitekehystä: ympäristönä toimivaa bosonista kenttää kuvattuna kvantittunein harmonisin oskillaattorein. Lopuksi tarkasteltiin raja-arvon $\Delta t \rightarrow 0$ määrittänyttä muunnoksessa jatkuvaan malliin.

Kollisiomallit ovat laaja aihe avoimien systeemien tutkimuksessa. Alkuehtoja voidaan muokata monien dynamiikkojen kuvaamiseksi, esimerkiksi osasysteemien korrelaatiovaatimuksia löysentämällä tai osaympäristöjen erilaisuuden sallimalla [2]. Hyvin nopeasti alkuehtoja muokkaamalla päädytään kuvaamaan ei-Markovista dynamiikkaa, milloin jokaisesta kollisiosta jää muistijälki systeemiin. Tällöin systeemin alkutilan tunteminen ei riitä kuvaamaan dynamiikkaa, vaan täytyy olla tieto systeemistä kaikkina aikaisempina ajanhetkinä $n\Delta t$. Voidaan myös tarkastella ns. stokastisia kollisiomalleja, joissa vuorovaikutuksen aika Δt ei ole kiinteä, vaan voi vaihdella satunnaisesti tai jollain määrättyllä tavalla. [2]

Kollisiomalleilla on useitakin sovelluksia. Tässäkin tutkielmassa esillä oleva kvanttiopitiikan viitekehys tarjoaa usein asetelman, jossa kollisiomalli kuvaa fysikaalista sellaisenaan (ilman jatkuvan ajan approksimaatiota). Jo edellä mainitut ei-Markoviset systeemit ovat suuri tutkimuksen kohde niiden soveltuvuuden vuoksi. Kyseinen dynamiikka on kuitenkin hyvin monimutkaista. Kollisiomalleja onkin käytetty paljon ei-Markovisen dynamiikan tutkimiseen niiden tarjoaman laskennallisen edun vuoksi. Kvanttikollisiomalleja on myös sovellettu mm. kvanttitermodynamiikkaan, heikkoihin mittauksiin (weak measurements) sekä kvanttilentoratoihin (quantum trajectory

ries). [1,2,3,10]

Liite

A.1 Tensoritulo

Tensoritulo \otimes on tulo-operaatio vektoriavaruuksille (tässä notaatio esiteltynä vektoreille Hilbertin avaruuksissa, jotka ovat eräänlaisia vektoriavaruuksia). Tällaisen tensorituloavaruuden $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ alkioit $|a\rangle \otimes |b\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ noudattavat seuraavia sääntöjä operaation \otimes suhteen:

$$\begin{aligned} c(|a\rangle \otimes |b\rangle) &= (c|a\rangle) \otimes |b\rangle = |a\rangle \otimes (c|b\rangle) \\ (|a_1\rangle + |a_2\rangle) \otimes |b\rangle &= |a_1\rangle \otimes |b\rangle + |a_2\rangle \otimes |b\rangle \\ |a\rangle \otimes (|b_1\rangle + |b_2\rangle) &= |a\rangle \otimes |b_1\rangle + |a\rangle \otimes |b_2\rangle, \end{aligned} \tag{A.1}$$

missä $|a\rangle \in \mathcal{H}_A, |b\rangle \in \mathcal{H}_B, c \in \mathbb{C}$. Tensorituloavaruuden dimensio on sen osavaruuksien (alisysteemien) dimensioiden tulo $\dim(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B) = \dim \mathcal{H}_A \cdot \dim \mathcal{H}_B$, ja se sisältää vain (tensori-)tulovektoreita tai niiden lineaarikombinaatioita. Lisäksi määrittelemme sisätulon (tensori-)tuloavaruudessa distributoimaan seuraavasti. [4]

$$(\langle a_1| \otimes \langle b_1|)(|a_2\rangle \otimes |b_2\rangle) = \langle a_1 | a_2\rangle \otimes \langle b_1 | b_2\rangle. \tag{A.2}$$

On myös tärkeä käsitellä kuinka operaattorit operoi tällaiseen tuloavaruuteen $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Operaattorit tuloavaruuteen kirjoitetaan usein myös tensoritulon avulla $\hat{A} \otimes \hat{B}$, missä \hat{A} operoi \mathcal{H}_A :han ja \hat{B} \mathcal{H}_B :hen $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$:ssa. Jos operaattori operoi vain yhteen alisysteemiin, niin muita alisysteemejä vastaavat osat operaattoreiden tensoritulossa ovat identiteettioperaattoreja. Tämä myös kirjoitetaan joskus lyhyemmin

$$\hat{A}_A \equiv \hat{A} \otimes \mathbb{1}, \tag{A.3}$$

missä $\mathbb{1}$ on identiteettioperaattori. Joskus kirjallisuudessa ei merkitä mitenkään mihin avaruuteen operaattori operoi, jos se on kontekstista selvää. [4,6]

A.2 Jälki ja osittainen jälki

Jälki on lineaarinen operaatio, määritelty matriisille A sen diagonaalikomponenttien summana [4,7]

$$\text{Tr}\{A\} = \sum_i A_{ii}. \quad (\text{B.1})$$

Lineaarisen operaattorin matriisiesitykselle operaattorin jälki määritellään samoin. Yleisemmin kuitenkin operaattoreille voidaan määrittää jälki seuraavasti:

$$\text{Tr}\{\hat{A}\} = \sum_i \langle i | \hat{A} | i \rangle, \quad (\text{B.2})$$

missä \hat{A} on operaattori ja $\{|i\rangle\}$ on jokin ortonormaali kanta; nähdään että tämä on yhteensopiva diagonaalikomponenttien summausmääritelmän kanssa. Vaikka edellä annetussa määritelmässä on käytetty kantaa $\{|i\rangle\}$, niin jälki itse on riippumaton kannasta; käytetty (ortonormaali) kanta on mielivaltainen. [4,6]

Kuten yllä mainittiin, jälki on lineaarinen:

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{A + B\} &= \text{Tr}\{A\} + \text{Tr}\{B\} \\ \text{Tr}\{cA\} &= c\text{Tr}\{A\}, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

missä A ja B ovat matriiseja tai lineaarisia operaattoreita ja c vakio. Jälki noudattaa lisäksi syklistä ominaisuutta:

$$\text{Tr}\{ABC\} = \text{Tr}\{CAB\} = \text{Tr}\{BCA\} \neq \text{Tr}\{ACB\}, \quad (\text{B.4})$$

missä C on myös operaattori. Jokainen matriisi on similaarinen yläkolmiomatriisin kanssa, jonka diagonaalilla on sen ominaisarvot, toisin sanoen on ns. similaarimuunnos näiden kahden matriisin välillä $A = PTP^{-1}$. Jäljen syklisen ominaisuuden avulla saadaan $\text{Tr}\{A\} = \text{Tr}\{PTP^{-1}\} = \text{Tr}\{P^{-1}PT\} = \text{Tr}\{T\}$, toisin sanoen siis mielivaltaisen matriisin A jälki on sen ominaisarvojen summa

$$\text{Tr}\{A\} = \sum_i \lambda_i, \quad (\text{B.5})$$

missä λ_i ovat A :n ominaisarvot. Tämä ominaisuus pätee myös (lineaarisille) operaattoreille, mikä saadaan valitsemalla ortonormaaliksi kannaksi jäljen määritelmässä (B.2) operaattorin ominaiskanta. [4,7]

A.2.1 Osittainen jälki

Yhdistetylle systeemille voidaan soveltaa jäljen määritelmää (B.2). Jos kuitenkin ollaan kiinnostuneita osasysteemin ρ_i redusoidusta dynamiikasta (toisin sanoen mitä kiinnostaa vain esimerkiksi, kuinka ρ_a kehittyy, eikä ollenkaan ρ_b), niin käytetään *osittaista jälkeä*.

Osittainen jälki operaattorina toimii pitkälti samoin, kuin jälki (B.2). Tässä tapauksessa summaus tapahtuukin vain yhden yhdistetyn systeemin osasysteemin yli. Kun $\sigma = \rho_a \otimes \rho_b$, niin osittainen jälki Tr_b voidaan laskea

$$\text{Tr}_b\{\sigma\} = \sum_i (\langle i|_b) \sigma (|i\rangle_b) = \sum_i (\mathbb{1} \otimes \langle i|_b) \sigma (\mathbb{1} \otimes |i\rangle_b). \quad (\text{B.6})$$

Osittainen jälki on määritelty tarkemmin esimerkiksi viitteissä [8,9]. Lisäksi osasysteemin a tila ρ_a määritellään osittaisen jäljen avulla yhdistetystä tilasta:

$$\rho_a := \text{Tr}_b\{\sigma\}, \quad (\text{B.7})$$

kun $\sigma = \rho_a \otimes \rho_b$. Osittaista jälkeä voi konseptuaalisesti verrata todennäköisyyslaskennasta tuttuun reunatodennäköisyysfunktion laskemiseen yhteistodennäköisyysfunktioista: $p_X = \sum_y p_{X,Y}(x, y)$. [2,4,6]

A.3 Aikakehitys

A.3.1 Diskreetti tilan muutos

Laskemme tässä yhtälön (21) illustratiivisena esimerkkinä laskuista tässä tutkielmassa. Tehdään samat oletukset kuin luvussa 3.1, eli siis jätämme termit $\mathcal{O}(\Delta t)^3$,

$$\begin{aligned}
& \text{sekä } \mathcal{O}(\Delta t)^2 \text{ jotka eivät riipu toisessa asteessa } \hat{V}_n \text{:stä pois [2]. } \Delta\sigma_n = \hat{U}_n\sigma_n\hat{U}_n^\dagger - \sigma_n \\
& = \left(\mathbb{1} - i(\hat{H}_0 + \hat{V}_n)\Delta t - \frac{1}{2}\hat{V}_n^2\Delta t^2 \right) \sigma_n \left(\mathbb{1} + i(\hat{H}_0 + \hat{V}_n)\Delta t - \frac{1}{2}\hat{V}_n^2\Delta t^2 \right) - \sigma_n \\
& = \left(\mathbb{1} - i(\hat{H}_0 + \hat{V}_n)\Delta t - \frac{1}{2}\hat{V}_n^2\Delta t^2 \right) \left(\sigma_n + i\sigma_n\hat{H}_0 + i\sigma_n\hat{V}_n\Delta t - \frac{1}{2}\sigma_n\hat{V}_n^2\Delta t^2 \right) - \sigma_n \\
& = \sigma_n + i\sigma_n\hat{H}_0\Delta t + i\sigma_n\hat{V}_n\Delta t - \frac{1}{2}\sigma_n\hat{V}_n^2\Delta t^2 - i\hat{H}_0\sigma_n\Delta t + \hat{H}_0\sigma_n\hat{H}_0\Delta t^2 + \hat{H}_0\sigma_n\hat{V}_n\Delta t^2 \\
& \quad - i\hat{V}_n\sigma_n\Delta t + \hat{V}_n\sigma_n\hat{H}_0\Delta t^2 + \hat{V}_n\sigma_n\hat{V}_n\Delta t^2 - \frac{1}{2}\hat{V}_n^2\sigma_n\Delta t^2 - \sigma_n + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (\text{C.1.1})
\end{aligned}$$

mistä voidaan nyt poistaa termit edellä mainitun approksimaation mukaan ja uudelleen järjestellä jäljelle jäävät termit Δt riippuvuuden mukaan:

$$\begin{aligned}
& -i \left(-\sigma_n\hat{H}_0 - \sigma_n\hat{V}_n + \hat{H}_0\sigma_n + \hat{V}_n\sigma_n \right) \Delta t + \left(\hat{V}_n\sigma_n\hat{V}_n - \frac{1}{2}(\hat{V}_n^2\sigma_n + \sigma_n\hat{V}_n^2) \right) \Delta t^2 \\
& = -i[\hat{H}_0 + \hat{V}_n, \sigma_n]\Delta t + (\hat{V}_n\sigma_n\hat{V}_n - \frac{1}{2}[\hat{V}_n^2, \sigma_n]_+) \Delta t^2, \quad (\text{C.1.2})
\end{aligned}$$

mikä on juurikin luvun 3.1 tulos (21).

A.3.2 Diskreetti Lindblad-muoto

Laskemme nyt muunnoksen liikeyhtälöstä (24) diskreettiin Lindblad-muotoon (25) tarkemmin. Osaympäristö η_n voidaan kirjoittaa spektraalihajotelmana (4)

$$\eta_n = \sum_k p_k |k\rangle_n \langle k|, \quad (\text{C.2.1})$$

missä $\sum_k p_k = 1$. Käsiteltävä muunnos koskee vain yhtälön (24) Δt riippuvaista termiä, joten kohdistamme tarkastelumme vain siihen. Sijoitetaan (C.2.1) tarkasteltavaan termiin, jolloin osittainen jälki muuttuu summaksi yli kantavektoreiden $|k'\rangle$ spektraalihajotelman ja jäljen määritelmien ansiosta (4), (B.2). Huomaa, että

vektorit $|k\rangle_n$ kommutoivat systeemin ρ kanssa:

$$\begin{aligned}
& \Delta t \operatorname{Tr}_n \left\{ \hat{V}_n \rho_n \eta_n \hat{V}_n - \frac{1}{2} \left[\hat{V}_n^2, \rho_n \eta_n \right]_+ \right\} \\
&= \Delta t \sum_{k'} \langle k' | \left(\hat{V}_n \rho_n \left(\sum_k p_k |k\rangle_n \langle k| \right) \hat{V}_n - \frac{1}{2} \left[\hat{V}_n^2, \rho_n \left(\sum_k p_k |k\rangle_n \langle k| \right) \right]_+ \right) |k'\rangle \\
&= \Delta t \sum_{k,k'} \left(p_k \langle k' | \hat{V}_n |k\rangle \rho_n \langle k | \hat{V}_n |k'\rangle - \frac{1}{2} \langle k' | \left[\hat{V}_n^2, \rho_n \left(\sum_k p_k |k\rangle_n \langle k| \right) \right]_+ |k'\rangle \right), \tag{C.2.2}
\end{aligned}$$

missä jätimme alaindeksit n kantavektoreista $\{|k\rangle_n\}$. Nyt ensimmäisestä termistä summan sisällä saadaan

$$\begin{aligned}
& \sum_{k,k'} \left(\Delta t p_k \langle k' | \hat{V}_n |k\rangle \rho_n \langle k | \hat{V}_n |k'\rangle \right) \\
&= \sqrt{p_k} \langle k' | \hat{V}_n |k\rangle \sqrt{\Delta t} \rho_n \sqrt{p_k} \langle k | \hat{V}_n |k'\rangle \sqrt{\Delta t} =: \sum_{k,k'} \hat{L}_{kk'} \rho_n \hat{L}_{kk'}^\dagger, \tag{C.2.3}
\end{aligned}$$

missä määrittelimme hyppyoperaattorit $\hat{L}_{kk'} = \sqrt{p_k} \langle k' | \hat{V}_n |k\rangle \sqrt{\Delta t}$, kuten luvussa 3.2. Nyt jäljellä on enää antikommutaattoritermi summan sisällä yhtälössä (C.2.2).

Avataan antikommutaattori, jolloin kyseisestä termistä tulee

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} \Delta t \sum_{k,k'} \langle k' | \left(p_k \hat{V}_n^2 \rho_n |k\rangle \langle k| + p_k \rho_n |k\rangle \langle k| \hat{V}_n^2 \right) |k'\rangle \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{k,k'} \left(p_k \langle k' | \hat{V}_n |k\rangle \langle k | \hat{V}_n |k'\rangle \Delta t \rho_n + \rho_n p_k \langle k' | \hat{V}_n |k\rangle \langle k | \hat{V}_n |k'\rangle \Delta t \right) \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{k,k'} \left(\sqrt{p_k} \langle k' | \hat{V}_n |k\rangle \sqrt{\Delta t} \sqrt{p_k} \langle k | \hat{V}_n |k'\rangle \sqrt{\Delta t} \rho_n \right. \\
&\quad \left. + \rho_n \sqrt{p_k} \langle k' | \hat{V}_n |k\rangle \sqrt{\Delta t} \sqrt{p_k} \langle k | \hat{V}_n |k'\rangle \sqrt{\Delta t} \right).d \tag{C.2.4}
\end{aligned}$$

Indeksit k ja k' ovat mielivaltaisia nimityksiä summausindekseille yli saman joukon, jolloin ne voidaan nimetä uudelleen (vaihtaa päittäin) $k \rightarrow k'$, $k' \rightarrow k$, milloin saadaan

$$= -\frac{1}{2} \sum_{k,k'} \left(\hat{L}_{kk'}^\dagger \hat{L}_{kk'} \rho_n + \rho_n \hat{L}_{kk'}^\dagger \hat{L}_{kk'} \right) = \sum_{k,k'} -\frac{1}{2} \left[\hat{L}_{kk'}^\dagger \hat{L}_{kk'}, \rho_n \right]_+. \tag{C.2.5}$$

Yhdistämällä nyt (C.2.3) ja (C.2.5), saadaan diskreetti Lindblad-muoto (25).

A.4 Vuorovaikutuskuva

Käydään tässä liitteessä läpi yhdistetyn systeemin Hamiltonin operaattorin (31) luvussa 4.2 muunnos vuorovaikutuskuvaan siirryttäessä. Vuorovaikutuskuvassa tiheysoperaattori kehittyy ajassa vuorovaikutusoperaattorin kanssa ja operaattorit kehittyvät systeemin ja ympäristön Hamiltonin operaattoreiden kanssa [11]. Yleisin aikakehityksen esitys kvanttimekaniikassa on ns. *Schrödingerin kuva*, jossa aikakehitys tapahtuu tiheysoperaattorissa / tilavektorissa [14]. Tilaesitysten ja operaattoreiden relaatiot Schrödingerin ja vuorovaikutuskuvan välillä ovat muotoa

$$\begin{aligned} |\psi_t^I\rangle &= e^{i\hat{H}_E t} |\psi_t\rangle, \\ \hat{H}_I(t) &= e^{i\hat{H}_E t} \hat{H} e^{-i\hat{H}_E t}, \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

missä indeksi I viittaa nyt vuorovaikutuskuvaan [15]. Johdetaan kokonais-Hamiltonin operaattorin esitys vuorovaikutuskuvassa lähtien Schrödingerin yhtälöstä

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle &= -i\hat{H} |\psi_t\rangle \\ \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t^I\rangle &= i\hat{H}_E |\psi_t^I\rangle + e^{i\hat{H}_E t} (-i\hat{H}) \mathbb{1} |\psi_t\rangle \\ &= i\hat{H}_E |\psi_t^I\rangle + [e^{i\hat{H}_E t} (-i\hat{H}) e^{-i\hat{H}_E t}] [e^{i\hat{H}_E t} |\psi_t\rangle], \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

jonka jälkimmäinen hakasulkulausekkeista on (D.1) mukaan $|\psi_t^I\rangle$. Ensimmäisestä hakasulkulausekkeesta saadaan

$$\begin{aligned} e^{i\hat{H}_E t} (-i\hat{H}) e^{-i\hat{H}_E t} &= -i e^{i\hat{H}_E t} (\hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_I) e^{-i\hat{H}_E t} \\ &= -i\hat{H}_S - i\hat{H}_E - i\hat{H}_I(t), \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

missä viimeisessä vaiheessa hyödynnettiin alempaa kaavaa (D.1) sekä operaattoreiden kommutointia. Sijoittamalla tämä takaisin yhtälöön (D.2), saadaan

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t^I\rangle &= i(\hat{H}_E - \hat{H}_S - \hat{H}_E - \hat{H}_I) |\psi_t^I\rangle \\ &= -i(\hat{H}_S + \hat{H}_I) |\psi_t^I\rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

Käyttämällä yhtälöitä (D.1) ja todeten, että $\hat{H}_I = \hat{V}$ tutkielman tarkastelussa, saadaan ajasta riippuva Hamiltonin operaattori (32) luvussa 4.2.

Viitteet

- [1] T. Brun, A simple model of quantum trajectories, 2001
- [2] F. Ciccarello, S. Lorenzo, V. Giovanetti, G Massimo Palma, Quantum Collision Models - Open system dynamics from repeated interactions, 2022
- [3] S. Cusumano, Quantum Collision Models: A Beginner Guide, 2022
- [4] B. Schumacher, M. Westmoreland, Quantum Processes Systems, and Information, 2010
- [5] F. Ciccarello, Collision models in quantum optics, 2018
- [6] R. LaRose, QuIC Seminar: Quantum States and Partial Trace, 2018
- [7] R. A. Horn, C. R. Johnson, Matrix Analysis, 1994
- [8] H. P. Breuer, F. Petruccione, The Theory of Open Quantum Systems, 2002
- [9] P. Lahti, J. Kiukas, Kvanttimekaniikka II, 2014
- [10] D. Cilluffo et al., Collisional picture of quantum optics with giant emitters, 2020
- [11] D. Manzano, A short introduction to the Lindblad master equation, 2020
- [12] P. Kok, A First Introduction to Quantum Physics, 2018
- [13] P. Busch, P. Lahti, Operational Quantum Mechanics, 1995
- [14] A. Galindo, P. Pascual, Quantum Mechanics I, 1990
- [15] A. Galindo, P. Pascual, Quantum Mechanics II, 1991