Avoimet kvanttisysteemit

LuK-tutkielma
Turun yliopisto
Fysiikka
2026
Meero Orte
Tarkastaja:
Jyrki Piilo

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

TURUN YLIOPISTO
Fysiikan ja tähtitieteen laitos

Orte, Meero Avoimet kvanttisysteemit

LuK-tutkielma, 19 s.
Fysiikka
Maaliskuu 2026

Tutkielmassa käsitellään avoimia kvanttisysteemejä ja niiden kehitystä, lisäksi tutkielman lopussa simuloidaan tiettyä kvanttisysteemiä. Avoimien kvanttisysteemeiden vuorovaikuttaessa ympäristön kanssa, kvanttisysteemi kokee dekoherenssia, menettäen informaatiota ympäristöönsä. Dekoherenssi on keskeinen osa avoimen kvanttisysteemin kehittymistä.

Avoimen kvanttisysteemin kehitystä ei voida kuvata unitaarioperaattoreilla, toisin kuin suljetulle systeemille. Kehitystä saadaan, kuitenkin mallinnettua masteryhtälöiden avulla. Kehitys voi olla Markovista, milloin kvanttisysteemi vain vuotaa informaatiota ympäristöönsä. On myös mahdollista, että ympäristö vuotaa informaatiota takaisin kvanttisysteemin, milloin kvanttisysteemin kehityksessä täytyy huomioida ympäristön muisti.

Todellisuudessa kaikki kvanttisysteemit ovat avoimia, sillä mitään systeemiä ei voida eristää täysin ympäristöstään. On myös hyvä huomata, että masteryhtälöt ovat approksimaatioita systeemin kehityksestä, jotka pohjautuvat yksinkertaistuksiin ja oletuksiin.

Asiasanat: Avoin kvanttisysteemi, dekoherenessi, puhdas dekoherenssi, Markovinen dynamiikka, ei-Markovinen dynamiikka, lomittuminen, masteryhtälö, Bosen-Einsteinin kondesaatti

Sisällys

Johdanto

Kvanttisysteemit jotka vuorovaikuttavat ympäristönsä kanssa eli avoimet kvanttisysteemit [1], ovat tärkeässä asemassa tutkittaessa todellisia kvanttisysteemeitä. Todellisuudessa kvanttisysteemit eivät ole ikinä täysin eristettyjä ympäristöstään, johtaen kvanttisysteemin kehitykseen, jonka ei odoteta kehittyvän Schrödingerin yhtälön mukaisesti [2].

Avoimen kvanttisysteemin aikakehitykseen liittyy dekoherenssi, joka on kvanttikoherenssin häviämistä ympäristöön. Dekoherenssi on puhtaasti kvanttimekaaninen ilmiö ja se on tärkeässä osassa kvanttisysteemin käytöksen muuntumista kvanttimekaanisesta klassiseen. Dekoherenssi on myös tärkeä ja oleellinen osa kvantti-informaatiota. Yleisesti avoimen kvanttisysteemin kehitys on irreversiibeliä ja systeemin dekoherenssia voidaan tutkia masteryhtälöiden avulla. [3] Kvanttisysteemi voi kehittyä Markovisesti, milloin kvanttisysteemi vuotaa ympäristöönsä informaatiota tai ei-Markovisesti, milloin ympäristö voi vuotaa informaatiota takaisin kvanttisysteemiin [4].

Tutkielmassa kerrotaan avoimista kvanttisysteemeistä ja niiden aikakehityksestä, lisäksi esitellään matemaattisia ja fysikaalisia konsepteja liittyen avoimiin kvanttisysteemeihin. Ensimmäisessä luvussa käydään läpi tarvittavaa avointen kvanttisysteemeiden kannalta oleellisia matemaattisia ja fysikaalisia peruskäsitteitä. Toisessa luvussa käsitellään ympäristön vuorovaikutuksen aiheuttamista seuraamuksista kvanttisysteemiin, kuten dekoherenssia, sekä miten systeemin kehitystä voidaan esittää. Kolmannessa luvussa puolestaan kerrotaan masteryhtälöistä, sekä esitetään simulaatio avoimesta kvanttisysteemistä.

1 Kvanttisysteemit ja tilat

1.1 Kvanttisysteemit

Kvanttisysteemeitä voidaan esittää Hilbertin avaruuden $\mathcal{H}$ avulla. Keskeisiä ominaisuuksia Hilbertin avaruudessa on, että vektoreiden lineaarikombinaatiot pysyvät Hilbertin avaruudessa ja avaruus sisältää vektoreiden sisätulon. Tila tai tilavektori $|\psi\rangle$ kuvaa kvanttisysteemin tiettyä tilaa. Koska tilavektorit kuvaavat kvanttisysteemin fysikaalisia tiloja, niiden täytyy olla normalisoituja eli

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \tag{1}$$

[5]

Tilavektorit sisältävät kaiken tiedetävän tiedon systeemistä [1]. Ne noudattavat superpositio periaatetta, milloin tilavektori eli puhdas tila voidaan esittää kannan superpositiona

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle \,, \tag{2}$$

yhtälössä c_n ovat tilan $|\psi\rangle$ kompleksisia komponenteja tilan kantavektorien $|\phi_n\rangle$ suhteen ja komponentteja c_n kutsutaan myös todennäköisyysamplitudeiksi. Kannat ovat yleensä ortonormaaleja eli ne ovat normalisoituja, sekä kohtisuorassa toisiaan vastaan

$$\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{mn}. \tag{3}$$

[5]

Kvanttisysteemin ja systeemin mitattavien suureiden kehityksen kuvaamiseen käytetään operaattoreita, eräät hyödylliset operaattorit ovat identiteetti operaattori, sekä Paulin operaattorit

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

[5]. Operaattoreiden avulla voidaan rakentaa, mikä tahansa kaksitasosysteemin (eli kubitin) tila [6], sekä ympäristön täysin mielivaltainen vaikutus kaksitasosysteemiin voidaan ilmaista Paulin operaattoreiden ja identiteettimatriisin avulla [1].

Toinen tärkeä operaattorien luokka on unitaarioperaattorit, jotka säilyttävät kvanttitilojen normin, sekä kahden tilan välisen sisätulon. Unitaarioperaattorit toteuttavat ehdon

$$\boldsymbol{U}^{\dagger}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\dagger}, \tag{5}$$

jossa $\boldsymbol{U}$ on unitaarioperaattori ja $\boldsymbol{I}$ on identiteetti. [5] Unitaarioperaattoria voidaan käyttää kuvaamaan suljetun kvanttisysteemin unitaarista kehitystä, mutta avointa kvanttisysteemiä ei voida yleisesti kuvata unitaarisen aika kehityksen avulla. Kuitenkin, lähtökohtaisesti avoimen kvanttisysteemin ja sen ympäristön muodostaman systeemin, voidaan olettaa olevan suljettu, milloin systeemi kokonaisuudessaan kehittyy unitaarisesti. Unitaarioperaattori kuvaa alkutilasta lopputilaan tapahtuvaa muutosta

$$|\psi(t)\rangle = \boldsymbol{U}(t,\ t_0)\,|\psi(t_0)\rangle\,, \tag{6}$$

missä $|\psi(t_0)\rangle$ on systeemin alkutila, $|\psi(t)\rangle$ lopputila ja $\boldsymbol{U}(t,\ t_0)$ alkutilaan operoiva unitaarinen aika kehitys operaattori. [7]

Kvanttisysteemin ollessa informaation suhteen eristetty, systeemin kvanttitilan aika kehitystä voidaan kuvata tunnetun Schrödingerin yhtälön avulla. Yhtälö kertoo, miten Hamiltonin operaattori, mikä vastaa systeemin energiaa, määrää systeemin aika kehityksen. [5] Schrödingerin yhtälö on

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi(t)\right\rangle = \boldsymbol{H}\left|\psi(t)\right\rangle, \tag{7}$$

jossa $\boldsymbol{H}$ on Hamiltonin operaattori [8], sekä $\hbar$ on redusoitu Planckin vakio [5]. Kvanttisysteemin kehittyessä unitaarisesti, Schrödingerin yhtälö voidaan esittää unitaarisen aika kehitys operaattorin avulla, milloin yhtälö on muotoa

$$\boldsymbol{H}(t)\boldsymbol{U}(t,\ t_0) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{U}(t,\ t_0). \tag{8}$$

[7]

1.2 Lomittunut tila

Yhdistetyillä kvanttisysteemeillä tarkoitetaan systeemiä, joka koostuu kahdesta tai useammasta kvanttisysteemistä [5], kuten kahdesta eri hiukkasesta tai hiukkasesta ja sen ympäristöstä. Kahden kvanttisysteemin $S^{(1)}$ ja $S^{(2)}$ yhdistetty kvanttisysteemi $S = S^{(1)} + S^{(2)}$ saadaan, kvanttisysteemeiden Hilbertin avaruuksien tensoritulolla

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}, \tag{9}$$

jossa $\mathcal{H}^{(1)}$ on kvanttisysteemin $S^{(1)}$ Hilbertin avaruus, vastaavasti $\mathcal{H}^{(2)}$ on kvanttisysteemin $S^{(2)}$ Hilbertin avaruus ja $\mathcal{H}$ on kvanttisysteemeiden yhdistelmän Hilbertin avaruus [7]. Tilaa $|\psi\rangle \in \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$, joka voidaan kirjoittaa sen muodostavien kvanttisysteemien tilojen tensoritulona, kutsutaan tulotilaksi

$$|\psi\rangle = \left|\varphi^{(1)}\right\rangle \otimes \left|\varphi^{(2)}\right\rangle, \tag{10}$$

missä tulotila $|\psi\rangle$ on yhdistetyn kvanttisysteemin tila, $|\varphi^{(1)}\rangle$ on kvanttisysteemin $S^{(1)}$ tila ja $|\varphi^{(2)}\rangle$ on kvanttisysteemin $S^{(2)}$ tila [1].

Jos yhdistetyn kvanttisysteemin tilaa ei voida esittää sen muodostaneiden kvanttisysteemien, eli osasysteemien tilojen tensoritulona, niin tilaa sanotaan lomittuneeksi [7]. Jos yhdistetyllä kvanttisysteemillä on mitattavia ominaisuuksia, mitä ei saataisi johdettua sen osasysteemien mittauksien avulla, on osasysteemien välillä kvanttimekanista korrelaatiota, eli systeemit ovat silloin lomittuneet keskenään [1].

Kahden kubitin ollessa maksimaalisesti lomittuneet, niiden tilat korreloituvat täysin, eli kubitin tilan mittaus määrää täysin myös toisen kubitin tilan. Kyseisiä tiloja kutsutaan Bellin tiloiksi. [1] Bellin tilat ovat ortonormaaleita, sekä Bellin tilan voi muuttaa toiseksi Bellin tilaksi, operoimalla unitaarioperaattorilla vain toiseen kubittiin [5]. Bellin tilat ovat muota

$$|\Phi^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1 |0\rangle_2 \pm |1\rangle_1 |1\rangle_2), \tag{11}$$

$$|\psi^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1 |1\rangle_2 \pm |1\rangle_1 |0\rangle_2), \tag{12}$$

jossa $|i\rangle_1$ tarkoittaa ensimmäisen kubitin tilaa ja $|j\rangle_2$ tarkoittaa toisen kubitin tilaa ja $|i\rangle_1 |j\rangle_2 = |i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2$ [1].

1.3 Sekoitettu tila

Kvanttisysteemejä voidaan esittää kvanttitilastollisten joukkojen/ensemblejen (quantum statistical ensemble) eli suuren määrän samankaltaisten joukkojen avulla, missä jokaista joukkoa $\mathcal{E}_\alpha$ kuvaa puhdas tila ψ_α. Kvanttitilastollisten joukkojen kokonaisuus saadaan yhdistämällä kyseiset joukot, liittäen jokaiseen joukkoon kerroin w_α. Kerroin kuvaa kyseisen joukon suhdetta systeemin kokonaisuusuudessa olevien joukkojen määrään, eli $w_\alpha = \mathcal{E}_\alpha / \sum_\alpha \mathcal{E}_\alpha$. Tämä kvanttitilastollisten joukkojen systeemi tai sekoitettu tila voidaan täysin esittää statistisen operaattorin tai tiheysmatriisin avulla

$$\boldsymbol{\rho} = \sum_\alpha w_\alpha |\psi_\alpha\rangle \langle\psi_\alpha| , \tag{13}$$

jossa w_α on kvanttisysteemin todennäköisyys olla tilassa $|\psi_\alpha\rangle$, millon $\sum_\alpha w_\alpha = 1$ täytyy toteutua. [7]

Sekoitettu tila on täysin eri asia, kuin tilan superpositio. Superpositiolla on määritelty tilavektori, kuin taas sekoitettu tila täytyy esittää tiheysmatriisin avulla, sekä tiheysmatriisi ei päde yksikäsitteisesti vain yhdelle sekoitetulle tilalle. [5] Lisäksi olennainen ero superposition ja sekoitetun tilan välillä on, että superpositiossa olevan tilan $|\psi\rangle$ komponentit $|\psi_n\rangle$ ovat samanaikaisesti läsnä tilassa. Toisin, kuin sekoitetussa tilassa kvanttisysteemi on jossain systeemin tietyssä komponentissa $|\psi_n\rangle$, mikä ilmaistaan todennäköisyyksien w_α avulla [1].

Tiheysmatriisin täytyy säilyttää jälki, sekä sen pitää olla itseadjungoitu ja positiivinen

$$\boldsymbol{\rho}^\dagger = \boldsymbol{\rho}, \quad \boldsymbol{\rho} \geq 0, \quad \mathrm{tr}\boldsymbol{\rho} = 1. \tag{14}$$

[7] Voimme myös tutkia, kuinka "sekoitettu" tila on tiheysmatriisin avulla, tätä suuretta kutsutaan tiheysmatriisin puhtaudeksi

$$\varsigma \equiv \mathrm{tr}(\boldsymbol{\rho}^2). \tag{15}$$

Puhtaan tilan tiheysmatriisi on muotoa $\boldsymbol{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, mistä seuraa $\boldsymbol{\rho}^2 = \boldsymbol{\rho}$ ja $\varsigma = 1$ [1]. Tiheysmatriisin tilojen muodostaessa ortonormaalit kannat systeemin Hilbertin avaruuden kanssa, maksimaalisesti sekoitetun tilan N-ulotteisen kvanttisysteemin tiheysmatriisi on

$$\boldsymbol{\rho} = \frac{1}{N}\sum_{\alpha} |\psi_\alpha\rangle \langle\psi_\alpha|\,, \tag{16}$$

jossa N on systeemin dimensiot ja tiheysmatriisi saa puhtauden pienimmän mahdollisen arvon $\varsigma = 1/N$. [3]

2 Dekoherenssi

2.1 Ympäristö

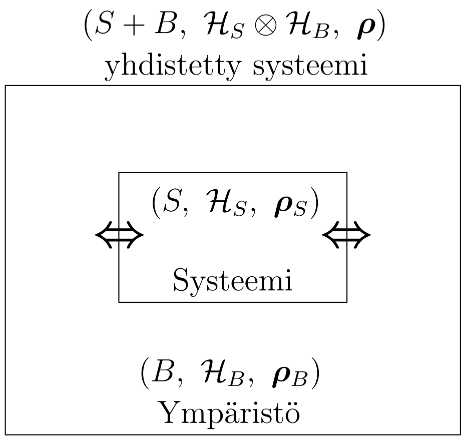
Realistiset kvanttisysteemit eivät ole ikinä täysin eristettyjä sen ympäristöstä, johtaen kvanttisysteemin ja ympäristön väliseen vuorovaikutukseen. Kvanttisysteemin ympäristön vuorovaikuttaessa kvanttisysteemiin se aiheuttaa yleisesti kvanttisysteemin ja sen ympäristön irreversiibelin lomittumisen. Kvanttisysteemin lomittuminen ympäristön kanssa vaikuttaa systeemiin tehtyihin tulevaisuuden mittauksien tuloksiin, tätä vaikutusta kutsumme dekoherenssiksi. Dekoherenssi on puhtaasti kvanttimekaaninen ilmiö, sekä keskeinen osa kvanttisysteemin muutosta kvanttimekaanisesta klassiseen käyttäytymiseen. [3]

Dekoherenssi on kvanttikoherenssin häviämistä, johtuen ympäristön ”tarkkailusta” kvanttisysteemin tiettyjä suureita kohtaan [9]. Ympäristön aiheuttama kvanttikoherenssin häviäminen eli dekoherenssi näkyy kvanttisysteemin tiheysmatriisin ei-diagonaalialkioiden ”vaimenemisena” [2].

Kvanttisysteemin kehitystä sen ympäristön ”tarkkaillessa” sitä, voidaan ajatella ympäristön tekemänä jatkuvana mittauksena kvanttisysteemin tiettyjen suureiden suhteen [10]. Tämä vuorovaikutus johtaa, siihen että pelkän kvanttisysteemin kehitystä ei voida kuvata unitaarisesti, sillä se ei ole suljettu kvanttisysteemi. Yleisesti voidaan silti olettaa ympäristön ja kvanttisysteemin muodostaman yhdistetyn systeemin olevan suljettu, milloin yhdistetty systeemi kehittyy unitaarisesti. Tyypillisesti tutkittava tilanne on esitetty kuvassa 2.1, missä osasysteemiä S kutsutaan usein redusoiduksi systeemiksi. [7]

2.2 Dynaaminen kartta

Kvanttisysteemin ja ympäristön lomittuminen tyypillisesti poissulkee kvanttisysteemin esittämisen puhtaiden tilojen avulla, mutta redusoitu tiheysmatriisi antaa tavan



Kuva 1. Kuvassa on esitys systeemin ja ympäristön yhdistetty systeemistä, jossa ympäristö on kvanttisysteemin kanssa vuorovaikutuksessa. yhdistetty systeemin Hilbertin avaruus $\mathcal{H}$ saadaan osasysteemien S ja B Hilbertin avaruuksien $\mathcal{H}_S$ ja $\mathcal{H}_B$ tensoritulon avulla. [7]

tuottaa statistisia tuloksia kvanttisysteemistä [1]. Eli puhtaassa tilassa olevan yhdistetyn systeemin osasysteemien redusoidut tiheysmatriisit ovat sekoitettuja tiloja [9].

Redusoidut tiheysmatriisit ovat oleellisia avointen kvanttisysteemien esittämisen suhteen. Kvanttisysteemin redusoitu tiheysmatriisi

$$\boldsymbol{\rho}_S = \mathrm{tr}_B(\boldsymbol{\rho}), \tag{17}$$

jossa kvanttisysteemin tiheysmatriisi on $\boldsymbol{\rho}_S$ saadaan ottamalla osittainen jälki tr_B ympäristön vapausasteiden yli yhdistetyn systeemin tiheysmatriisista $\boldsymbol{\rho}$. Koska yhdistetty systeemi kehittyy unitaarisesti voimme esittää osasysteemin redusoidun tiheysmatriisin yhdistetyn systeemin unitaarioperaattorien avulla

$$\boldsymbol{\rho}_S(t) = \mathrm{tr}_B\{\boldsymbol{U}(t,\ t_0)\boldsymbol{\rho}(t_0)\boldsymbol{U}^\dagger(t,\ t_0)\}. \tag{18}$$

Systeemin ja ympäristön lomittumisaikojen ollessa lyhyitä, on mahdollista esittää redusoidun systeemin kehitystä toisella tavalla. Yhdistetty systeemin osasysteemit eivät ole lomittuneita ajan hetkellä $t_0 = 0$, yhdistetty systeemi voidaan esittää osasysteemien tulotilan avulla $\boldsymbol{\rho}(0) = \boldsymbol{\rho}_S(0) \otimes \boldsymbol{\rho}_B$. Voidaan osasysteemin S kehitys hetkestä $t_0 = 0$ johonkin ajanhetkeen t esittää muodossa

$$\boldsymbol{\Lambda}(t)\boldsymbol{\rho}_S(0) \equiv \mathrm{tr}_B\{\boldsymbol{U}(t,\ t_0)[\boldsymbol{\rho}_S(0) \otimes \boldsymbol{\rho}_B]\boldsymbol{U}^\dagger(t,\ 0)\} = \boldsymbol{\rho}_S(t), \tag{19}$$

jossa $\boldsymbol{\Lambda}$ on dynaaminen kartta [7], joka kuvaa avoimen kvanttisysteemin irreversiibeliä kehitystä [11].

Dynaaminen kartta on täyspositiivinen, konveksisesti lineaarinen ja se säilyttää jäljen. Dynaamisen kartan konveksi lineaarisuus tarkoittaa, että voimme kuvata tiheysmatriisien kombinaation $\boldsymbol{\rho} = \lambda\boldsymbol{\rho}_1 + (1-\lambda)\boldsymbol{\rho}_2$ kehitystä dynaamisen kartan avulla $\boldsymbol{\Lambda}(t)\boldsymbol{\rho} = \lambda\boldsymbol{\Lambda}(t)\boldsymbol{\rho}_1 + (1-\lambda)\boldsymbol{\Lambda}(t)\boldsymbol{\rho}_2$, missä ensemblet $\boldsymbol{\rho}_1$ ja $\boldsymbol{\rho}_2$ kehittyivät toisistaan riippumattomasti, sekä $0 < \lambda < 1$. Jäljen säilyvyydellä puolestaan tarkoitetaan, että $\mathrm{tr}\{\boldsymbol{\Lambda}(t)\boldsymbol{\rho}\} = 1$. Täyspositiivisuudella tarkoitetaan, että kaikkien laajennuksien $\boldsymbol{\Lambda} \otimes \mathrm{id}_n$, jotka kuuluvat yhdistettyyn systeemiin $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_n$ täytyy olla positiivisia kaikilla n arvoilla. Positiivisuudella tarkoittaen kartan kuvaavan positiivisemidefiniitit tiheysmatriisit toisiksi positiivisemidefiniitti matriisiksi. [3]

Dynaaminen kartta voidaan esittää muodossa

$$\boldsymbol{\Lambda}(t) = e^{\mathcal{L}t}, \tag{20}$$

jossa superoperaattori $\mathcal{L}$ on lineaarinen kartta, jonka sanotaan generoivan puoliryhmän. Superoperaattori on operaattori, joka operoi toisiin operaattoreihin tuottaen uuden operaattorin. Tämä yhtälö johtaa avoimen kvanttisysteemin redusoidun matriisin ensimmäisen asteen differentiaaliyhtälöön [7]

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{\rho}_S(t) = \mathcal{L}\boldsymbol{\rho}_S(t), \tag{21}$$

jota kutsutaan markoviseksi masteryhtälöksi [12]. Avoimen kvanttisysteemin kehityksen esittäminen onnistuu kahdella eri tavalla kuvan 2.2 mukaisesti [7].

$$
\begin{tikzcd}
\boldsymbol{\rho}(0) = \boldsymbol{\rho}_S(0) \otimes \boldsymbol{\rho}_B \arrow[r, "\text{unitaarinen kehitys}"] \arrow[d, "\mathrm{tr}_B"'] & \boldsymbol{\rho}(t) = \boldsymbol{U}(t,\ 0)[\boldsymbol{\rho}_S(0) \otimes \boldsymbol{\rho}_B](t_0)\boldsymbol{U}^\dagger(t,\ 0) \arrow[d, "\mathrm{tr}_B"] \\
\boldsymbol{\rho}_S(0) \arrow[r, "\text{dynaaminen kartta}"] & \boldsymbol{\rho}_S(t) = \boldsymbol{\Lambda}(t)\boldsymbol{\rho}_S(0)
\end{tikzcd}
$$

Kuva 2. Kaavio, miten avoimen kvanttisysteemin kehitystä voidaan esittää kahdella eri tavalla. [7]

3 Masteryhtälö

3.1 Kvanttidynaaminen puoliryhmä

Aikaisemmin esitetty dynaaminen kartta esitti avoimen kvanttisysteemin kehitystä tiettyyn ajan hetkeen, mutta annettaessa ajan muuttua vapaasti saadaan yhdestä parametrista t riippuva perhe dynaamisia karttoja, joilla $\{\boldsymbol{\Lambda}(t)|t \geq 0\}$ ja $\boldsymbol{\Lambda}(0)$ on identiteetti kartta. Kyseinen dynaamisten karttojen perhe esittää avoimen kvanttisysteemin kehitystä kaikilla ajan hetkillä. [7] Markovin approksimaatiossa oletetaan avoimen kvanttisysteemin relaksaatio ajan τ_r olevan paljon suurempi, kuin koherenssi ajan τ_c, eli $\tau_c \ll \tau_r$, milloin voidaan pitää ympäristöä "muistittomana". Relaksaatio aika τ_r kuvaa tyypillistä aikaväliä, jolla ympäristö vaikuttaa kvanttisysteemin kehitykseen. Koherenssi aika τ_c kuvaa tyypillistä aikaväliä, jolla ympäristön ja systeemin vuorovaikutuksesta syntyneet korrelaatiot häviävät ympäristöstä. Muistittomuudella tarkoitetaan, ettei ympäristö säilytä tietoa sen vuorovaikutuksesta systeemin kanssa. [3]

Koska realistisen kvanttisysteemin Markovinen dynamiikka on approksimaatio sen kehityksestä, joka perustuu systeemille tehtyihin yksinkertaistuksiin. On siis yleistä, että realistisen kvanttisysteemin kehitys poikkeaa Markovisesta kehityksestä, milloin kehitys on ei-Markovista. Olennaista tälle ei-Markoviselle dynamiikalle on, että ympäristö vuotaa informaatiota takaisin kvanttisysteemiin. [4]

Avoimen kvanttisysteemin kehityksen ollessa Markovista, sen käytös noudattaa puoliryhmä ominaisuutta (engl. semigroup property)

$$\boldsymbol{\Lambda}(t)\boldsymbol{\Lambda}(t') = \boldsymbol{\Lambda}(t+t'), \tag{22}$$

[7] milloin sanotaan dynaamisten karttojen perheen $\{\boldsymbol{\Lambda}(t)|t \geq 0\}$ muodostavan kvanttidynaamisen puoliryhmän [3]. Eli kvanttidynaaminen puoliryhmä on jatkuva, yhdestä parametrista t riippuva perhe dynaamisia karttoja, jotka toteuttavat puoliryhmä ehdon [7].

3.2 Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad masteryhtälö

Masteryhtälöillä voidaan approksimoida avoimen kvanttisysteemin dekoherenssi prosessia. Yleisesti masteryhtälöt pohjautuvat tiettyihin oletuksiin systeemistä ja sen kehityksestä. Kun oletetaan systeemin toimivan Markovisesti eli muistittomasti, voidaan käyttää jo aikaisemmin esitettyä Markovista masteryhtälöä (21). [3] Yhtälöstä saadaan johdettua Lindbladin (Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad) masteryhtälö, joka on muotoa

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{\rho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[\boldsymbol{H}'_S, \boldsymbol{\rho}_S(t)\right] + \sum_\mu \gamma_\mu \left[\boldsymbol{L}_\mu \boldsymbol{\rho}_S(t) \boldsymbol{L}^\dagger_\mu - \frac{1}{2}\{\boldsymbol{L}^\dagger_\mu \boldsymbol{L}_\mu, \boldsymbol{\rho}_S(t)\}\right], \tag{23}$$

[1] jossa termejä $\boldsymbol{L}_\mu$ kutsutaan Lindbladin operaattoreiksi. Valittaessa Lindbladin operaattorit yksiköttömiksi, dekoherenssin nopeutta kuvaavat vakiot γ_μ ovat aina ajan käänteisessä yksikössä ja $\gamma_\mu \geq 0$ [3]. Tiheysmatriisi $\boldsymbol{\rho}_S$ edustaa kvanttisysteemin S tilaa [13]. Ensimmäisessä termissä $[\boldsymbol{H}'_S, \boldsymbol{\rho}_S(t)]$ on kommutaattori ja jälkimmäisessä $\{\boldsymbol{L}^\dagger_\mu \boldsymbol{L}_\mu, \boldsymbol{\rho}_S\}$ on antikommutaattori. Ensimmäinen termi kuvaa kvanttisysteemin unitaarista kehitystä siihen liittyvän Hamiltonin operaattorin $\boldsymbol{H}'_S$ avulla,

sekä redusoitu Plankin vakio $\hbar$ voidaan halutessa valita saavan arvon 1 .[7] Jälkimäinen termi eli dissipatiivinen osa kuvaa systeemin epäunitaarista kehitystä, eli dekoherenssia sekä mahdollista energian häviämistä kvanttisysteemissä [3]. Lindbladin operaattorit, eivät välttämättä kuvaa fysikaalisesti mitattavia suureita, mutta operaattoreiden kuvatessa niitä, operaattorit ovat hermiittisiä eli $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}^\dagger$. [1]

Kokonaisen systeemin Hamiltonin operaattori koostuu kolmesta osasta

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}_S + \boldsymbol{H}_B + \boldsymbol{H}_I. \tag{24}$$

Yhtälössä $\boldsymbol{H}_S$ kuvaa kvanttisysteemin Hamiltonin operaattoria, $\boldsymbol{H}_B$ ympäristön ja $\boldsymbol{H}_I$ kuvaa ympäristön ja kvanttisysteemin vuorovaikutuksen Hamiltonin operaattoria. Lindbladin masteryhtälössä yleisesti Hamiltonin operaattoria $\boldsymbol{H}_S'$ ei voida samaistaa $\boldsymbol{H}_S$ kanssa, koska Hamiltonin operaattori $\boldsymbol{H}_S'$ voi sisältää useampia termejä, johtuen ympäristön vuorovaikutuksesta kvanttisysteemiin. Hamiltonin operaattoria $\boldsymbol{H}_S'$ kutsutaan ”Lamb shift” Hamiltonin operaattoriksi, joka johtaa energia tasojen uudelleen normalisointiin, johtuen ympäristön ja kvanttisysteemin vuorovaikutuksesta. [7]

3.3 Puhdas dekoherenssi

Puhtaasta dekoherenssista (engl. dephasing) puhutaan, kun avoin kvanttisysteemi kokee dekoherenssia ilman dissipaatiota, eli systeemi ei menetä energiaa. Puhtaan dekoherenssin tapahtuessa avoimen kvanttisysteemin tiheysmatriisissa ei-diagonaalialkiot vaimenevat muuttamatta diagonaalialkiota eli tilojen todennäköisyyksiä. [3] Puhtaan dekoherenssin masteryhtälö on muotoa

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{\rho}_S(t) = -i[\boldsymbol{H}_S, \boldsymbol{\rho}_S(t)] + \gamma \left[\sigma_z \boldsymbol{\rho}_S(t)\sigma_z^\dagger - \frac{1}{2}\{\sigma_z^\dagger \sigma_z, \boldsymbol{\rho}_S(t)\}\right], \tag{25}$$

jossa Lindbladin operaattoriksi on valittu $\boldsymbol{L} = \sigma_z$ ja γ kuvaa dekoherenssin nopeutta [1]. Operaattori σ_z on unitaarinen [5], sekä hermiittinen eli $\sigma_z = \sigma_z^\dagger$ [3].

Kyseisellä masteryhtälöllä voidaan esimerkiksi kuvata kubitin kehitystä ympäristön tarkkaillessa sitä. Yhtälössä Lindbladin operaattori σ_z kuvaa ympäristön tarkkailusta syntyvää dekoherenessia. [1]

3.4 Bosen-Einsteinin kondensaatti ja atomi nollassa asteessa

Bosonit eli hiukkaset, joiden spin on kokonaisluku voivat muodostaa Bosen-Einsteinin kondensaatin (engl. Bose-Einstein condensate). Tätä kutsutaan lyhenteellä BEC, jossa suurin osa bosoneista tiivistyy alimpaan tilaansa. [14] Ajatellaan systeemin koostuvan BEC ympäristöstä ja epäpuhtaus atomista (engl. impurity atom), joka on vangittu syvään kaksois-potentiaalikuopaan. Atomin kubitin tilat kuvaavat atomia oikeassa $|R\rangle$ ja vasemmassa $|L\rangle$ potentiaalikuopassa. Kaksois-potentiaalikuopan syvyys estää kuoppien välillä hyppimisen, [15] lisäksi kaksois-potenettiaalikuopat ovat symmetriset [16]. BEC ollessa nollassa asteessa voidaan kubitin dynamiikkaa kuvata vuorovaikutuskuvassa puhtaan dekoherenssin masteryhtälöllä, joka on muotoa

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{\rho}_S(t) = \gamma \left[\sigma_z \boldsymbol{\rho}_S(t)\sigma_z^\dagger - \frac{1}{2}\{\sigma_z^\dagger \sigma_z, \boldsymbol{\rho}_S(t)\}\right], \tag{26}$$

jossa $\sigma_z = |R\rangle\langle R| - |L\rangle\langle L|$ [17]. Masteryhtälössä dekoherenssi nopeus $\gamma(t)$ on muotoa

$$\gamma(t) = \frac{d}{dt}\Gamma(t), \tag{27}$$

jossa $\Gamma(t)$ on puolestaan

$$\Gamma(t) \sim \int d\omega J(\omega)\frac{1-\cos(\omega t)}{\omega} \tag{28}$$

[15]. Yhtälössä spektraalitheys $J(\omega) = \sum_k |g_k|^2\delta(\omega - \omega_k)$ kertoo, kuinka voimakkaasti ympäristö vaikuttaa kvanttisysteemiin eri taajuuksilla ω_k, lisäksi g_k kutsutaan vuorovaikutus vakioksi. Pienillä taajuuksilla spektraalitiheys $J(\omega) \propto \omega^s$ ja s arvo määrää, onko spektraalitiheys aliohminen $s < 1$, ohminen $s = 1$ vai yliohminen

$s > 1$. [17] Pienillä taajuuksilla aproksimoidaan spektraalitiheyden olevan muotoa $J(\omega) = \omega^s \exp\left[-\omega^2/\omega_C^2\right]$. [15] spektraalitiheyden funktiossa ω_C on rajataajuus, joka kuvaa milloin spektraalitiheyden muutos saa arvon nolla [3]. Ohminen tai aliohminen spektraalitiheys vuotaa ainoastaan ympäristöön informaatiota, mutta yliohmisen tapauksessa informaatiota voi vuotaa takaisin kubittiin ja dynamiikka muuttuu ei-Markoviseksi kun $s > 2$ [15].

Tehdään simulaatio tilanteesta Pythonin avulla kirjastoa QuTiP käyttäen. Asetetaan simulaatiossa rajataajuuden arvoksi $\omega_C = 1$, sekä spektraalitiheyden olevan ohmista ja muotoa $J(\omega) = \omega \ \exp\left[-\omega^2/\omega_C^2\right]$. Simulaatiossa $\Gamma(t) = \int_0^\infty d\omega J(\omega) \frac{1-\cos(\omega t)}{\omega}$ ja kubitin tiheysmatriisi on

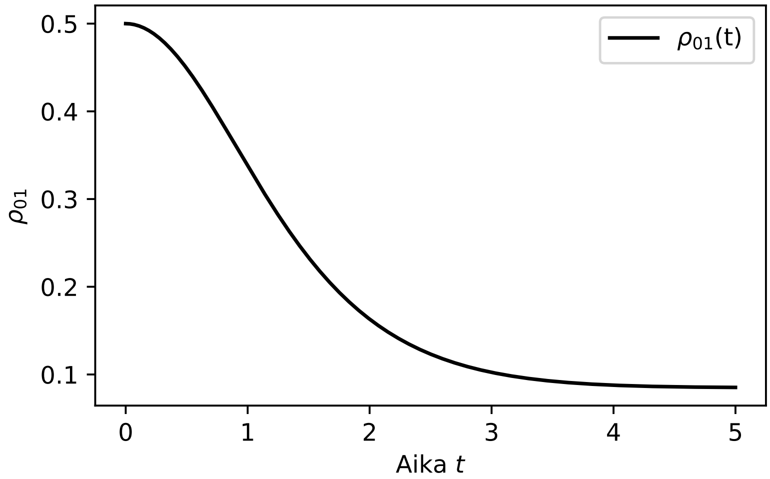
$$\boldsymbol{\rho}_S(0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \tag{29}$$

Tarkastellaan simulaation avulla ei-diagonaalialkion ρ_{01} arvon häviämistä, kuten 3 nähdään arvo laskee $\gamma(t)$ mukaisesti. Voidaan lisäksi näyttää, mitä saadaan masteryhtälön (26) alkioiden arvoiksi ratkaisemalla differentiaaliyhtälön jokaista alkiota kohti. Differentiaaliyhtälön avulla selvitetyt alkiot ovat muotoa

$$\rho_{01}(t) = \rho_{01}(0) \exp\left[-2\int_0^t \gamma(t')dt'\right], \tag{30}$$

$$\rho_{11}(t) = \rho_{11}(0). \tag{31}$$

Huomataan, etteivät diagonaalialkiot muutu alkutilastaan kubitin kehittyessä, ainoastaan ei-diagonaalialkiot muuttuvat ajasta riippuvan dekoherenssin nopeuden mukaisesti. Diagonaalialkiot eivät muuttuneet kehityksen aikana, eli kubitti ei vaihtanut energiaa ympäristönsä kanssa, milloin systeemiin vaikutti puhdas dekoherenssi. [18]



Kuva 3. Kuvassa nähdään, miten kvanttikoherenssi katoaa atomista BEC ympäristön vuorovaikutuksesta siihen. Kvanttikoherenssin häviäminen näkyy eidiagonaalialkioden häviämisenä. Simulaatio tehtiin puhtaan dekoherenssin masteryhtälön avulla, Pythonin QuPiT kirjastoa käyttäen.

4 Yhteenveto

Avoimet kvanttisysteemit ovat kvanttisysteemejä, jotka ovat vuorovaikutuksessa ympäristönsä kanssa, johtaen avoimen kvanttisysteemin ja ympäristön lomittumiseen. Kvanttisysteemiä ei voida ikinä täysin eristää ympäristöstään, milloin kvanttisysteemin ja ympäristön vuorovaikutuksesta kvanttisysteemi kokee dekoherenssia. Puhtaan dekoherenessin tapauksessa kvanttisysteemi ei menetä energiaa vaan pelkästään informaatiota.

Vuorovaikutuksen takia avoimen kvanttisysteemin kehitys ei ole unitaarista, milloin systeemin kehitystä täytyy kuvata dynaamisten karttojen tai niistä johdettujen masteryhtälöiden avulla. Yleinen aikariippumaton Lindbladin masteryhtälö kuvaa kvanttisysteemin irreversiibeliä kvanttiominaisuuksien häviämistä. Masteryhtälöt ovat approksimaatiota kvanttisysteemin kehittymisestä ja eri tilanteisiin valitaan eri masteryhtälöt.

Kvanttisysteemi voi kehittyä Markovisesti tai ei-Markovisesti, jossa informaatiota vuotaa takaisin systeemiin. Ei-Markovista kehityksessä täytyy huomioida ympäristön muisti ominaisuus, joka Markovisessa kehityksessä voitiin jättä huomioimatta. Kvanttisysteemin Markovinen kehitys voi muuttua kesken kehityksen ei-Markoviseksi, joka oli mahdollista kubitin ja BEC ympäristön kehityksessä.

Avoimien kvanttisysteemien tutkimuksesta voi hyötyö kvanttikemian, kvantti-informaation tai suprajohteiden alat. Avoimien kvanttisysteemien tutkiminen on tärkeää, sillä se auttaa ymmärtämään, miten avoimet kvanttisysteemit käyttäytyvät ja menettävät kvanttiominaisuuksiaan.

Tekoälyn käyttö tutkielmassa

Olen käyttänyt tutkielmassa tekoälyohjelmia Gemini 3 ja DeepSeek V3.2, Latexin kuvien koodien virheiden korjauksessa, sekä Pythonilla tehdyn simulaation koodissa olleiden virheiden korjauksessa.

Viitteet

[1] M. Schlosshauer, *Decoherence and the Quantum-To-Classical Transition*, *Frontiers Collection* (Springer Berlin HeidelbergBerlin, Heidelberg, 2007).

[2] W. H. Zurek, Physics Today **44**, 36 (1991) doi:10.1063/1.881293.

[3] M. Schlosshauer, Physics Reports **831**, 1 (2019) doi:10.1016/j.physrep.2019.10.001.

[4] H.-P. Breuer, E.-M. Laine ja J. Piilo, Physical Review Letters **103**, 210401 (2009) doi:10.1103/PhysRevLett.103.210401.

[5] B. Schumacher ja M. Westmoreland, *Quantum Processes Systems, and Information* (Cambridge University PressCambridge, 2010).

[6] H. Carmichael, *An Open Systems Approach to Quantum Optics: Lectures Presented at the Université Libre de Bruxelles, October 28 to November 4 1991*, No. v.18 in *Lecture Notes in Physics Monographs*, 1st ed ed. (Springer Berlin / HeidelbergBerlin, Heidelberg, 1993).

[7] H.-P. Breuer ja F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, 1 ed. (Oxford University PressOxford, 2007).

[8] E. Schrödinger, Physical Review **28**, 1049 (1926) doi:10.1103/PhysRev.28.1049.

[9] W. H. Zurek, Reviews of Modern Physics **75**, 715 (2003) doi:10.1103/RevModPhys.75.715.

[10] W. H. Zurek, Physical Review D **26**, 1862 (1982) doi:10.1103/PhysRevD.26.1862.

[11] R. Alicki, *Quantum Dynamical Semigroups and Applications*, No. v.717 in *Lecture Notes in Physics Ser*, 2nd ed ed. (Springer Berlin / HeidelbergBerlin, Heidelberg, 2007).

[12] G. Lindblad, Communications in Mathematical Physics **48**, 119 (1976) doi:10.1007/BF01608499.

[13] V. Gorini, A. Kossakowski ja E. C. G. Sudarshan, Journal of Mathematical Physics **17**, 821 (1976) doi:10.1063/1.522979.

[14] J. Kasprzak, M. Richard, S. Kundermann, A. Baas, P. Jeambrun, J. M. J. Keeling, F. M. Marchetti, M. H. Szymańska, R. André, J. L. Staehli, V. Savona, P. B. Littlewood, B. Deveaud ja L. S. Dang, Nature **443**, 409 (2006) doi:10.1038/nature05131.

[15] P. Haikka, S. McEndoo, G. d. Chiara, M. Palma ja S. Maniscalco, Physical Review A **84**, 031602 (2011) doi:10.1103/PhysRevA.84.031602.

[16] M. A. Cirone, G. D. Chiara, G. M. Palma ja A. Recati, New Journal of Physics **11**, 103055 (2009) doi:10.1088/1367-2630/11/10/103055.

[17] H.-P. Breuer, E.-M. Laine, J. Piilo ja B. Vacchini, Reviews of Modern Physics **88**, 021002 (2016) doi:10.1103/RevModPhys.88.021002.

[18] N. Lambert, E. Giguère, P. Menczel, B. Li, P. Hopf, G. Suárez, M. Gali, J. Lishman, R. Gadhvi, R. Agarwal, A. Galicia, N. Shammah, P. Nation, J. R. Johansson, S. Ahmed, S. Cross, A. Pitchford ja F. Nori, QuTiP 5: The Quantum Toolbox in Python, 2025, arXiv:2412.04705 [quant-ph].