

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Релаксация взаимодействующих открытых квантовых систем

В.Ю. Шишков, Е.С. Андрианов, А.А. Пухов, А.П. Виноградов, А.А. Лисянский

*Рассмотрен переход от описания динамики замкнутой квантовой системы, включающей в себя открытую квантовую систему и резервуар, к описанию динамики только открытой квантовой системы путём исключения степеней свободы резервуара за счёт усреднения по ним. Используется подход уравнения Линдблада для матрицы плотности. Дана общая схема вывода супероператора Линдблада, возникающего при усреднении уравнения фон Неймана для замкнутой квантовой системы по переменным резервуара. Общая схема иллюстрируется конкретными примерами излучения двухуровневого атома в свободное пространство и динамики перехода двухуровневого атома из чистого состояния в смешанное при взаимодействии с дефазирующим резервуаром. Особое внимание уделено случаю, когда открытая система состоит из нескольких подсистем, каждая из которых независимо взаимодействует с резервуаром. В случае не взаимодействующих подсистем матрица плотности является прямым произведением матриц плотности подсистем, а супероператор Линдблада — суммой супероператоров подсистем. Взаимодействие между подсистемами приводит не только к появлению соответствующего члена в гамильтониане общей системы, но и к неаддитивности супероператоров Линдблада. В современной литературе последнее обстоятельство часто игнорируется, что, как проиллюстрировано в заметке, может приводить к грубым ошибкам, например, к нарушению второго начала термодинамики.*

**Ключевые слова:** открытые квантовые системы, управляющее уравнение Линдблада, второе начало термодинамики

PACS numbers: 03.65.Yz, 05.30.-d

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.06.038359>

Содержание

1. Введение (544).
2. Вывод уравнения Линдблада (545).
3. Совместимость уравнения Линдблада с основными законами термодинамики (547).
4. Примеры применения уравнения Линдблада (548).
  - 4.1. Спонтанное излучение атома в свободном пространстве.
  - 4.2. Релаксация двухуровневого атома в дефазирующий резервуар.
5. Релаксация составных систем. Общее рассмотрение (550).
6. Ошибки, возникающие при использовании феноменологического подхода. Две связанные двухуровневые системы, взаимодействующие с дефазирующим резервуаром (551).

7. Создание положительной инверсной населённости двухуровневых систем когерентной накачкой (554).
  8. Заключение (557).
- Список литературы (558).

1. Введение

В последнее время особый интерес вызывают вопросы, связанные с явлением диссипации в микромире. Как хорошо известно, в квантовой механике физическим величинам соответствуют эрмитовы операторы, что предполагает отсутствие диссипативных процессов в замкнутых системах. Однако обычно имеют дело с открытыми системами, контактирующими с другими системами, в частности, с резервуаром. Для изучения отдельных явлений нет необходимости расширять рассматриваемую систему, включая в рассмотрение окружение, так, чтобы в итоге получилась замкнутая система. Зачастую нам не надо знать всей точной информации о расширенной системе, а можно ограничиться описанием лишь интересующей нас её части.

Точно так же для нахождения функции распределения частиц при броуновском движении не надо решать уравнения движения каждой частицы, достаточно решить уравнение Фоккера – Планка. В квантовой механике роль функции распределения играет матрица плотности, а вместо уравнения Фоккера – Планка решают уравнение Линдблада, полученное путём исключения переменных окружения. Иными словами, можно рассматривать только интересующую нас часть системы, а оставшуюся часть рассматривать как резервуар. В такой ситуации изучаемая система является открытой, и необ-

В.Ю. Шишков<sup>(1,2,3,\*)</sup>, Е.С. Андрианов<sup>(2,3,†)</sup>, А.А. Пухов<sup>(1,2,3,‡)</sup>, А.П. Виноградов<sup>(1,2,3,§)</sup>, А.А. Лисянский<sup>(4,5,◊)</sup>

<sup>(1)</sup> Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, ул. Ижорская 13, 125412 Москва, Российская Федерация

<sup>(2)</sup> Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова,

ул. Суцёвская 22, 127055 Москва, Российская Федерация

<sup>(3)</sup> Московский физико-технический институт (государственный университет),

Институтский пер. 9, 141700 Долгопрудный, Московская обл., Российская Федерация

<sup>(4)</sup> Department of Physics, Queens College of the City University of New York, Queens, New York 11367, USA

<sup>(5)</sup> The Graduate Center of the City University of New York, New York 10016, USA

E-mail: \*vladislavmipt@gmail.com, †andrianov.es@mipt.ru,

‡pukhov@mail.ru, §a-vinogr@yandex.ru, ◊lisyansky@qc.edu

Статья поступила 19 февраля 2018 г., после доработки 16 апреля 2018 г.

ходимо правильно описывать её неэрмитову динамику, обусловленную взаимодействием с резервуаром.

Первые попытки такого описания использовали тау-приближение Вайскопфа–Вигнера [1], кинетические уравнения [2] или уравнения Максвелла–Блоха [3]. Однако часто решения таких уравнений не имели физического смысла, например, получались отрицательные значения населённостей уровней [2]. Существенный прорыв произошёл после появления работ [4, 5]. Было показано, что оператор, ответственный за обмен энергией с резервуаром, должен иметь определённый вид супероператора Линдблада. При этом гарантировалось как сохранение следа матрицы плотности (т.е. полная вероятность), так и её положительная определённость.

Точный вывод операторов, описывающих взаимодействие системы с резервуаром, оказывается достаточно сложным. Поэтому часто [6–19] при выводе уравнения Линдблада используют различные приближения и феноменологические соображения. Ниже дан стандартный вывод уравнения Линдблада, использующий контролируемые приближения, и рассмотрены возможные ошибки при феноменологическом подходе. В частности, часто предполагают, что супероператоры Линдблада для взаимодействующих подсистем являются суммой супероператоров Линдблада для невзаимодействующих подсистем. В статье показано, что данный подход не гарантирует выполнение законов термодинамики, а средние значения операторов могут по порядку величины отличаться от правильных.

## 2. Вывод уравнения Линдблада

Рассмотрим квантовую динамику некоторой системы  $S$ . Если бы система  $S$  была замкнута, то её динамика описывалась бы уравнением Шрёдингера. Во многих ситуациях приходится иметь дело с системой, которая взаимодействует с некоторым окружением — резервуаром  $R$ . В этом случае, для того чтобы найти динамику системы из первых принципов, необходимо решить уравнение Шрёдингера для системы  $S$  и резервуара  $R$ , а затем произвести усреднение по переменным резервуара. Однако такой подход является практически нереализуемым, поскольку число степеней свободы резервуара, как правило, велико. В связи с этим возникает вопрос о том, возможно ли составить замкнутое уравнение, которое описывало бы динамику только системы  $S$ . Оказывается, что при некоторых предположениях о динамике системы, а именно в приближении Борна–Маркова [4, 5, 20], это сделать возможно. Выводу соответствующего уравнения посвящён данный раздел, в котором мы следуем работам Дэвиса [21, 22].

Итак, рассмотрим динамику системы  $S$ , которой соответствует гамильтониан  $\hat{H}_S$ . Пусть данная система взаимодействует с резервуаром  $R$ , имеющим гамильтониан  $\hat{H}_R$ . Взаимодействие между резервуаром и системой будем описывать гамильтонианом  $\hat{H}_{SR}$ . Система и резервуар образуют замкнутую систему и подчиняются уравнению Шрёдингера на общую волновую функцию  $|\psi\rangle$ . Так как нас интересует динамика открытой системы, то в дальнейшем нам будет удобно работать не с волновой функцией, а с матрицей плотности  $\hat{\rho}$ , которая для замкнутой системы связана с волновой функцией как  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$  [20, 23]. Дифференцируя это выражение по времени и используя уравнение Шрёдингера, получим

уравнение фон Неймана на матрицу плотности:

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}(t), \hat{H}_S + \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}]. \quad (1)$$

Будем считать, что гамильтониан взаимодействия  $\hat{H}_{SR}$  можно представить в виде  $\hat{H}_{SR} = \hbar\lambda\hat{S}\hat{R}$ , где  $\hat{S}$  и  $\hat{R}$  — операторы, зависящие от динамических переменных только системы и только резервуара. Ниже все операторы обезразмерены, а в выражении для  $\hat{H}_{SR}$  постоянная Планка выделена, чтобы константа связи  $\lambda$  имела размерность частоты.

Заметим, что в гамильтониане уравнения (1) содержатся собственные частоты системы  $\omega_S$  и резервуара  $\omega_R$ , а также константа взаимодействия  $\lambda$ , определяющие различные временные масштабы. Во многих физически важных случаях имеет место режим слабой связи, когда  $\omega_S \gg \lambda$ . В приближении слабой связи можно получить локальное по времени уравнение на матрицу плотности системы [20]. Для этого необходимо перейти к медленным амплитудам, произведя усреднение по временам  $\sim 1/\omega_S$ .

Для выделения в явном виде медленных амплитуд удобно перейти к представлению взаимодействия для матрицы плотности  $\hat{\rho}(t)$  и гамильтониана взаимодействия  $\hat{H}_{SR}(t)$ :

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= \exp\left(-\frac{i(\hat{H}_S + \hat{H}_R)t}{\hbar}\right) \hat{\rho}(t) \exp\left(\frac{i(\hat{H}_S + \hat{H}_R)t}{\hbar}\right), \\ \hat{H}_{SR} &= \exp\left(-\frac{i(\hat{H}_S + \hat{H}_R)t}{\hbar}\right) \hat{H}_{SR}(t) \exp\left(\frac{i(\hat{H}_S + \hat{H}_R)t}{\hbar}\right), \end{aligned}$$

При такой замене  $\hat{\rho}$  будет представлять собой "медленную" матрицу плотности. В представлении взаимодействия уравнение (1) примет вид

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}_{SR}(t)]. \quad (2)$$

Заметим, что при отсутствии взаимодействия, т.е. когда  $\lambda = 0$ , матрица плотности  $\hat{\rho}(t)$  со временем не меняется, что позволяет полагать, что характерное время изменения  $\hat{\rho}$  по порядку величины равно  $1/\lambda$ .

Процедура усреднения по времени,

$$\overline{\hat{F}(t_0)} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \hat{F}(t) dt,$$

для уравнения (2) при  $\Delta t \gg 1/\omega_S$  даёт

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} dt = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}_{SR}(t)] dt. \quad (3)$$

Так как операторы  $\hat{S}$  и  $\hat{R}$  коммутируют, то коммутируют и гамильтонианы  $\hat{H}_S$  и  $\hat{H}_R$ , и оператор взаимодействия  $\hat{H}_{SR} = \hbar\lambda\hat{S}\hat{R}$  в представлении взаимодействия можно переписать в виде

$$\hat{H}_{SR}(t) = \hbar\lambda\hat{S}(t)\hat{R}(t), \quad (4)$$

где

$$\hat{S}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}_S t}{\hbar}\right) \hat{S} \exp\left(-\frac{i\hat{H}_S t}{\hbar}\right),$$

$$\hat{\hat{R}}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}_R t}{\hbar}\right) \hat{R} \exp\left(-\frac{i\hat{H}_R t}{\hbar}\right).$$

Используя оператор эволюции [20, 23] для уравнения (2),

$$\hat{U}(t, t_0) = T \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{SR}(t') dt'\right\},$$

где  $T$  — оператор хронологического упорядочения, уравнение (3) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \frac{\hat{\hat{\rho}}(t_0 + \Delta t) - \hat{\hat{\rho}}(t_0)}{\Delta t} = \\ = \frac{1}{\Delta t} (\hat{U}(t_0 + \Delta t, t_0) \hat{\hat{\rho}}(t_0) \hat{U}^\dagger(t_0 + \Delta t, t_0) - \hat{\hat{\rho}}(t_0)). \end{aligned} \quad (5)$$

Разложение  $\hat{U}(t, t_0)$  по степеням константы взаимодействия  $\lambda$  с точностью до второго порядка имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) \approx 1 - i\lambda \int_{t_0}^t \hat{S}(t_1) \hat{\hat{R}}(t_1) dt_1 - \\ - \lambda^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} (\hat{S}(t_1) \hat{\hat{R}}(t_1)) (\hat{S}(t_2) \hat{\hat{R}}(t_2)) dt_2. \end{aligned} \quad (6)$$

Отметим важное обстоятельство. Критерием применимости развитой здесь теории возмущений является убывание каждой следующей поправки к оператору эволюции, т.е.  $U_0 = 1 \gg \lambda U_1 \gg \lambda^2 U_2 \gg \dots$ . Безразмерным параметром, который гарантирует малость каждой следующей поправки, является  $\lambda \Delta t$ , где  $\Delta t = t - t_0$  — время, на котором осуществляется разложение (6). Таким образом, для справедливости (6) должно выполняться условие  $\lambda \Delta t \ll 1$ .

Теперь подставим разложение (6) в (5). Результат подстановки и сохранение членов первого,  $\hat{\hat{\rho}}_1$ , и второго,  $\hat{\hat{\rho}}_2$ , порядков малости по степеням  $\lambda \Delta t$  даёт:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} (\hat{U}(t_0 + \Delta t, t_0) \hat{\hat{\rho}}(t_0) \hat{U}^\dagger(t_0 + \Delta t, t_0) - \hat{\hat{\rho}}(t_0)) \approx \\ \approx \frac{1}{\Delta t} (\lambda \hat{\hat{\rho}}_1(t_0 + \Delta t) + \lambda^2 \hat{\hat{\rho}}_2(t_0 + \Delta t)). \end{aligned} \quad (7)$$

Далее предположим, что резервуар во все моменты времени находится в состоянии теплового равновесия, а его матрица плотности не меняется со временем:  $\hat{\rho}_R(0) = \hat{\rho}_R^{\text{th}} = \exp(-\hat{H}_R/T) / \text{tr} \exp(-\hat{H}_R/T)$ . Это первое ключевое приближение, которое используется для вывода управляющего уравнения. Такое приближение, в котором состояние резервуара предполагается постоянным во все моменты времени, называют борновским [20]. Физически это соответствует резервуару, настолько большому, что система не может изменить его состояния.

В этом приближении, если состояния системы и резервуара некоррелированы в начальный момент времени, то они остаются некоррелированными во все последующие моменты времени, т.е.  $\hat{\hat{\rho}}(t) = \hat{\rho}_S(t) \hat{\rho}_R^{\text{th}}$ . Тогда операторы  $\hat{\hat{\rho}}_1(t_0 + \Delta t)$  и  $\hat{\hat{\rho}}_2(t_0 + \Delta t)$  из (7) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \hat{\hat{\rho}}_1(t_0 + \Delta t) = i \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} dt_1 \hat{\rho}_S(t_0) \hat{S}(t_1) (\hat{\rho}_R^{\text{th}} \hat{\hat{R}}(t_1)) - \\ - i \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} dt_1 \hat{S}(t_1) \hat{\rho}_S(t_0) (\hat{\hat{R}}(t_1) \hat{\rho}_R^{\text{th}}), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \hat{\hat{\rho}}_2(t_0 + \Delta t) = \int_0^{t_0 + \Delta t} dt_1 (\hat{S}(t_1) \hat{\hat{R}}(t_1)) (\hat{\rho}_S(t_0) \hat{\rho}_R^{\text{th}}) \times \\ \times \int_0^{t_0 + \Delta t} dt_1 (\hat{S}(t_1) \hat{\hat{R}}(t_1)) - \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \int_{t_0}^{t_1} (\hat{S}(t_1) \hat{\hat{R}}(t_1)) \times \\ \times (\hat{S}(t_2) \hat{\hat{R}}(t_2)) dt_2 dt_1 (\hat{\rho}_S(t_0) \hat{\rho}_R^{\text{th}}) - (\hat{\rho}_S(t_0) \hat{\rho}_R^{\text{th}}) \times \\ \times \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \int_{t_0}^{t_1} (\hat{S}(t_2) \hat{\hat{R}}(t_2)) (\hat{S}(t_1) \hat{\hat{R}}(t_1)) dt_2 dt_1. \end{aligned} \quad (9)$$

Чтобы получить матрицу плотности только системы, необходимо взять след по переменным резервуара в выражениях (8) и (9),  $\hat{\hat{\rho}}_{(S)1,2}(t) = \text{tr}_R \hat{\hat{\rho}}_{1,2}(t)$ . В подынтегральном выражении (8) появятся средние типа  $\text{tr}_R(\hat{\rho}_R^{\text{th}} \hat{\hat{R}})$ . Для многих физически важных типов резервуаров, таких как резервуар электромагнитного поля свободного пространства, дефазирующие резервуары различной природы и т.д., выполняется условие  $\text{tr}_R(\hat{\rho}_R^{\text{th}} \hat{\hat{R}}(t_1)) = 0$ . Как видно из (8), если  $\text{tr}_R(\hat{\rho}_R^{\text{th}} \hat{\hat{R}}(t_1)) = 0$ , то и  $\text{tr}_R \hat{\hat{\rho}}_1(t_0 + \Delta t) = 0$ , и в (7) остаётся только слагаемое второго порядка по параметру  $\lambda$ , а именно  $\hat{\hat{\rho}}_2(t)$ .

Для вычисления временных интегралов в  $\hat{\hat{\rho}}_2(t)$  (см. (9)) воспользуемся тем, что для собственных состояний  $|k\rangle$  гамильтониана  $\hat{H}_S$  выполняется равенство  $\exp(i\hat{H}_S t)|k\rangle = \exp(i\omega_k t)|k\rangle$ . Это позволяет представить оператор  $\hat{S}(t)$  в виде

$$\hat{S}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}_S t}{\hbar}\right) \hat{S} \exp\left(-\frac{i\hat{H}_S t}{\hbar}\right) = \sum_{k'k''} \exp(i\Delta\omega_{k'k''} t) \hat{S}_{k'k''}, \quad (10)$$

где  $\hat{S}_{k'k''} = \langle k' | \hat{S} | k'' \rangle |k'\rangle \langle k''|$ ,  $\hat{S}_{k''k'} = \hat{S}_{k'k''}^\dagger$ , а суммирование проводится по разностям частот  $\Delta\omega_{k'k''} = \omega_{k'} - \omega_{k''}$ .

Отметим, что операторы  $\hat{S}_{k'k''}$  могут быть получены в явном виде, если известны собственные состояния гамильтониана системы  $\hat{H}_S$ . Если же собственные состояния неизвестны, то процедура Дэвиса, вообще говоря, не работает. Тогда необходимо использовать другие способы вычисления  $\hat{S}(t)$  и последующего усреднения.

В выражении (10) зависимость от времени входит только через экспоненциальные множители. Это позволяет легко произвести обещанное выше усреднение по малому времени  $\sim 1/\omega_S$ . Данный момент является ключевым в описываемой процедуре исключения переменных резервуара, поскольку позволяет получить для  $\hat{S}(t)$  явную зависимость от времени.

Действительно, после подстановки (10) в (9) остаются интегралы типа

$$\begin{aligned} \frac{\lambda^2}{\Delta t} \sum_{k'k''k'''k''''} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} dt_1 dt_2 \hat{S}_{k'k''} \hat{\rho}_S(t_0) \hat{S}_{k'''k''''} \times \\ \times \exp(i(\Delta\omega_{k'k''} t_1 + \Delta\omega_{k'''k''''} t_2)) \text{tr}_R (\hat{\hat{R}}(t_2) \hat{\hat{R}}(t_1) \hat{\rho}_R) = \\ = \sum_{k'k''k'''k''''} \hat{S}_{k'k''} \hat{\rho}_S(t_0) \hat{S}_{k'''k''''} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} dt_1 \exp(i(\Delta\omega_{k'k''} - \Delta\omega_{k''k''})t_1) \times \\ & \times \int_{t_0-t_1}^{t_0+\Delta t-t_1} d\tau \lambda^2 \exp(i\Delta\omega_{k''k''}\tau) F(\tau), \end{aligned} \quad (11)$$

где  $F(t_1 - t_2) = \text{tr}_R(\hat{R}(t_2)\hat{R}(t_1)\hat{\rho}_R)$ .

Для вычисления средних по времени значений нужно вспомнить, что интервал усреднения много больше всех характерных времён системы. Иными словами, в интегралах, входящих в выражение (11), пределы интегрирования можно положить равными бесконечности, т.е. рассмотреть предел  $\Delta t \gg 1/\omega_S$ . В результате получим:

$$\begin{aligned} & \int_{t_0-t_1}^{t_0+\Delta t-t_1} d\tau \lambda^2 \exp(i\Delta\omega_{k''k''}\tau) F(\tau) \approx \\ & \approx \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 \exp(i\Delta\omega_{k''k''}\tau) F(\tau) d\tau \equiv \lambda^2 G(\Delta\omega_{k''k''}), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} dt_1 \exp(i(\Delta\omega_{k'k''} - \Delta\omega_{k''k''})t_1) \approx \\ & \approx \frac{\Delta t}{\Delta t} \delta_{\Delta\omega_{k'k''}, \Delta\omega_{k''k''}} = \delta_{\Delta\omega_{k'k''}, \Delta\omega_{k''k''}}, \end{aligned} \quad (13)$$

где  $\delta_{\Delta\omega_{k'k''}, \Delta\omega_{k''k''}}$  — символ Кронекера.

Приближение типа (13) приводит к важному следствию. А именно, в сумме (11) остаются только слагаемые, в которых  $\Delta\omega_{k'k''} = \Delta\omega_{k''k''}$ . Для получения окончательного вида уравнения Линдблада осталось, используя (12) и (13), подставить (11) в (9), а затем в (7). Результат имеет вид

$$\begin{aligned} & \frac{\hat{\rho}(t_0 + \Delta t) - \hat{\rho}(t_0)}{\Delta t} = \\ & = \lambda^2 \sum_{\Delta\omega} G(\Delta\omega) \left( \left[ \hat{S}_{\Delta\omega}, \hat{\rho}_S(t_0) \hat{S}_{\Delta\omega}^\dagger \right] + \left[ \hat{S}_{\Delta\omega} \hat{\rho}_S(t_0), \hat{S}_{\Delta\omega}^\dagger \right] \right), \end{aligned} \quad (14)$$

где суммирование производится по всевозможным разностям частот  $\Delta\omega = \omega_{k'} - \omega_{k''}$ . Разностное уравнение (14) обычно заменяют дифференциальным [24], поскольку правая часть мала,  $\lambda^2 G(\Delta\omega) \Delta t \ll 1$ . В результате получаем уравнение Линдблада для матрицы плотности  $\hat{\rho}_S$  системы

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S(t) = \lambda^2 \sum_{\Delta\omega} G(\Delta\omega) \left( \left[ \hat{S}_{\Delta\omega}, \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{\Delta\omega}^\dagger \right] + \right. \\ & \left. + \left[ \hat{S}_{\Delta\omega} \hat{\rho}_S(t), \hat{S}_{\Delta\omega}^\dagger \right] \right) \equiv \hat{L}[\hat{\rho}_S(t)]. \end{aligned} \quad (15)$$

Правая часть (15) определяет супероператор Линдблада  $\hat{L}[\hat{\rho}_S(t)]$ . Можно показать, что для резервуара, находящегося в состоянии теплового равновесия, для функции  $G(\Delta\omega)$  выполняется соотношение Кубо–Мартина–Швингера [25, 26], а именно  $G(\Delta\omega)/G(-\Delta\omega) = \exp(\hbar\Delta\omega/T)$ , где  $T$  — температура резервуара.

Напомним, что процедура усреднения (12), (13) требует, чтобы время усреднения  $\Delta t$  было много больше характерной обратной частоты системы,  $\omega_S \Delta t \gg 1$ . Вместе с этим время усреднения  $\Delta t$  не должно быть достаточно большим, чтобы было справедливо разложение (6) оператора эволюции. Из (14) и (15) видно, что для этого необходимо выполнение условия  $\lambda^2 G(\Delta\omega) \Delta t \ll 1$ . Таким образом, критерием применимости процедуры Дэвиса исключения резервуара является условие  $G(\Delta\omega) \lambda^2 \ll \omega_S$ .

Переходя от представления взаимодействия к представлению Шрёдингера, т.е. совершая обратное преобразование,  $\hat{\rho}_S(t) = \exp(-i\hat{H}_S t/\hbar) \hat{\rho}_S(t) \exp(i\hat{H}_S t/\hbar)$ , получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}_S] + \hat{L}[\hat{\rho}_S(t)]. \quad (16)$$

### 3. Совместимость уравнения Линдблада с основными законами термодинамики

Ранее (см. например [27, 28]) было показано, что структура уравнения Линдблада (16) обеспечивает выполнение первого и второго, а при некоторых условиях, нулевого и третьего начал термодинамики.

Нулевое начало термодинамики утверждает, что система приходит в состояние теплового равновесия с резервуаром, т.е. температура системы сравнивается с температурой резервуара, и стационарное состояние системы описывается распределением Гиббса,  $\hat{\rho}_S^{\text{st}} = \exp(-\hat{H}_S/T)/\text{tr} \exp(-\hat{H}_S/T)$ . Для того чтобы оно было единственным, необходимо [27, 29], чтобы не существовало оператора  $\hat{I}(\hat{S})$ , который бы коммутировал одновременно и с гамильтонианом  $\hat{H}_S$ , и с оператором  $\hat{L}[\hat{\rho}_S(t)]$ . Если такой оператор существует, то его среднее значение, определяемое начальным состоянием, не меняется со временем и является интегралом движения.

Существование оператора  $\hat{I}(\hat{S})$  приводит к тому, что всё пространство состояний системы разбивается на подпространства, состоящие из векторов, имеющих для интеграла движения  $\hat{I}(\hat{S})$  одинаковые собственные значения. Такие подпространства являются инвариантными в том смысле, что если система изначально находится в этом подпространстве, то в процессе эволюции она из него не выходит. В противном случае менялось бы среднее значение интеграла движения, которое по определению равно одному из собственных значений. В зависимости от начальных условий система с некоторой вероятностью попадает в одно из таких подпространств. Взаимодействие с резервуаром не может перевести систему из одного подпространства в другое. В каждом из этих подпространств есть свой набор собственных энергий системы. В процессе эволюции в каждом таком подпространстве устанавливается распределение Гиббса по состояниям, относящимся только к этому подпространству, со своей статистической суммой [29]. Конечное состояние есть сумма полученных гиббсовских состояний с исходными вероятностями.

Первое начало термодинамики есть закон сохранения энергии. В случае открытой системы поток тепла  $J$  между системой и резервуаром определяется как

$$\begin{aligned} J & = \frac{\delta Q}{\delta t} \equiv \frac{E(t + \delta t) - E(t)}{\delta t} = \frac{1}{\delta t} \int_t^{t+\delta t} \frac{d}{d\tau} \text{tr}_S(\hat{H}_S \hat{\rho}_S(\tau)) d\tau = \\ & = \frac{1}{\delta t} \text{tr}_S \left( \hat{H}_S \int_t^{t+\delta t} \frac{d}{d\tau} \hat{\rho}_S(\tau) d\tau \right). \end{aligned} \quad (17)$$

Подставляя из уравнения Линдблада (16) выражение для  $d\hat{\rho}_S(\tau)/d\tau$ , получаем

$$J = \text{tr}_S \left( \hat{H}_S \hat{L}[\hat{\rho}_S(t)] \right) \equiv \frac{d\langle \hat{H}_S \rangle}{dt}, \quad (18)$$

т.е. поток тепла равен изменению энергии системы.

Второе начало термодинамики записывается в виде [20, 29]

$$\frac{dS}{dt} - \frac{J}{T} \geq 0, \quad (19)$$

где  $S$  — энтропия фон Неймана,  $S = -\text{tr}(\hat{\rho}_S(t) \ln \hat{\rho}_S(t))$ , а  $J = \delta Q / \delta t$  — поток энергии между системой и резервуаром из (18). Можно строго доказать, что для введённых таким образом  $S$  и  $J$  условие (19) выполняется для конечномерных систем [27]. Таким образом, второе начало термодинамики является следствием уравнения Линдблада (16).

Третье начало термодинамики означает, что энтропия системы стремится к нулю, если температура резервуара стремится к нулю. Можно показать, что если у системы отсутствует интеграл движения и у резервуара имеется основное состояние, то из (16) следует выполнение третьего начала (более подробно см. [28]).

Таким образом, вид уравнения (16) обеспечивает выполнение первого, второго и, при некоторых условиях, нулевого и третьего начал термодинамики. Если же видоизменить (16), например, перейти к тау-приближению или использовать отличный от супероператора Линдблада диссипативный оператор, то начала термодинамики могут нарушаться. Иными словами, хотя подход уравнения Линдблада является приближённым, он корректно описывает термодинамику системы, и оценки, произведённые в рамках этого подхода, представляются наиболее надёжными.

## 4. Примеры применения уравнения Линдблада

### 4.1. Спонтанное излучение атома в свободном пространстве

В этом случае роль резервуара выполняет континуум мод электромагнитного поля свободного пространства. Отметим, что заселённость уровней можно получить из теории Вайскопфа–Вигнера [1]. Однако в этой теории используются чистые состояния атома, энтропия которых равна нулю. Иными словами, выполнение неравенства Клаузиуса можно проверить только в рамках уравнения Линдблада на матрицу плотности.

Рассмотрим атом как двухуровневую систему (ДУС). Гамильтониан ДУС с основным состоянием  $|g\rangle$  с нулевой энергией и возбуждённым состоянием  $|e\rangle$  с энергией  $\hbar\omega_0$  можно представить в виде

$$\hat{H}_S = \hbar\omega_0 \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma}, \quad (20)$$

где оператор  $\hat{\sigma}$  — понижающий оператор,  $\hat{\sigma}|e\rangle = |g\rangle$ , а оператор  $\hat{\sigma}^\dagger$  — повышающий,  $\hat{\sigma}^\dagger|g\rangle = |e\rangle$ . Квантованное электромагнитное поле описывается гамильтонианом

$$\hat{H}_R = \sum_{\alpha, \mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\alpha, \mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\alpha, \mathbf{k}}, \quad (21)$$

здесь  $\mathbf{k}$  — волновой вектор моды,  $\alpha$  — её поляризация. Дисперсия электромагнитного поля в свободном пространстве определяет зависимость частоты поля от его волнового вектора,  $\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|$ . Гамильтониан взаимодействия атома с полем свободного пространства в диполь-

ном приближении имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_{SR} &= -\hat{\mathbf{d}}\hat{\mathbf{E}} = \\ &= -\sum_{\alpha, \mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{V}} \mathbf{e}_{\alpha, \mathbf{k}} \mathbf{d}_{eg} (\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger) (\hat{a}_{\alpha, \mathbf{k}}^\dagger + \hat{a}_{\alpha, \mathbf{k}}) = \hbar\lambda \hat{S} \hat{R}, \end{aligned} \quad (22)$$

где  $\hat{S} = (\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger)$ ,  $\hat{R} = \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \sqrt{\omega_{\mathbf{k}}/\omega_0} \mathbf{e}_{\lambda, \mathbf{k}} \mathbf{n}_{eg} (\hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger + \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}})$  и  $\lambda = -\sqrt{2\pi\omega_0/\hbar V} |\mathbf{d}_{eg}|$ . Константа взаимодействия между двухуровневой системой и электромагнитным полем определяется дипольным моментом перехода  $\mathbf{d}_{eg}$ , единичным вектором в направлении поляризации электромагнитного поля  $\mathbf{e}_{\lambda, \mathbf{k}}$  и объёмом пространства  $V$ .

Разложение (10) оператора взаимодействия  $\hat{S} = \hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger$  в рассматриваемом случае примет вид

$$\begin{aligned} \hat{S}(t) &= \exp(i\omega_0 t) |e\rangle\langle g| + \exp(-i\omega_0 t) |g\rangle\langle e| = \\ &= \exp(i\omega_0 t) \hat{\sigma}^\dagger + \exp(-i\omega_0 t) \hat{\sigma}. \end{aligned} \quad (23)$$

Следуя процедуре Девиса, описанной выше, можно получить следующее уравнение Линдблада [20]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S(t) &= -i[\hat{H}_S, \hat{\rho}_S] + \gamma_{\text{diss}}(1 + N(\omega_0)) \times \\ &\times \left( \hat{\sigma} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} \hat{\rho}_S(t) - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} \right) + \\ &+ \gamma_{\text{diss}} N(\omega_0) \left( \hat{\sigma}^\dagger \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma} - \frac{1}{2} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^\dagger \hat{\rho}_S(t) - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma} \hat{\sigma}^\dagger \right), \end{aligned} \quad (24)$$

где  $\gamma_{\text{diss}} = 4\omega_0^3 |\mathbf{d}_{eg}|^2 / 3\hbar c^3$  и  $N(\omega) = (\exp(\hbar\omega/kT) - 1)^{-1}$ .

Особенно просто данное уравнение выглядит в базисе собственных состояний гамильтониана (20). Совершая разложение по такому базису,  $\hat{\rho} = \rho_{ee}|e\rangle\langle e| + \rho_{eg}|e\rangle\langle g| + \rho_{ge}|g\rangle\langle e| + \rho_{gg}|g\rangle\langle g|$ , и подставляя его в (24), получаем для диагональных элементов матрицы плотности:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{ee} &= -\gamma_{\text{diss}}(N(\omega_0) + 1)\rho_{ee} + \gamma_{\text{diss}}N(\omega_0)\rho_{gg}, \\ \dot{\rho}_{gg} &= -\gamma_{\text{diss}}N(\omega_0)\rho_{gg} + \gamma_{\text{diss}}(N(\omega_0) + 1)\rho_{ee}. \end{aligned} \quad (25)$$

Величины  $\gamma_{\text{diss}}$  и  $\gamma_{\text{diss}}N(\omega_0)$  являются аналогами коэффициентов Эйнштейна, относящихся к спонтанному и индуцированному переходам соответственно. Видно, что в релаксацию вносят вклад как спонтанные, так и индуцированные процессы, в то время как в накачку — только индуцированные. Таким образом, слагаемое в (24), пропорциональное  $G(\omega) = \gamma_{\text{diss}}(N(\omega) + 1)$ , описывает релаксацию энергии в резервуар за счёт как спонтанных, так и индуцированных процессов, а  $G(\omega) = \gamma_{\text{diss}}N(\omega)$  описывает накачку системы резервуаром только за счёт индуцированных процессов.

Для диагональных элементов мы получили, по существу, кинетические уравнения, которые сохраняют полную вероятность,  $\rho_{ee} + \rho_{gg} = \text{const}$ , т.е. след матрицы плотности сохраняется во все моменты времени. Недиагональные элементы эволюционируют следующим образом:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{eg} &= -\frac{\gamma_{\text{diss}}(2N(\omega_0) + 1)\rho_{eg}}{2}, \\ \dot{\rho}_{ge} &= -\frac{\gamma_{\text{diss}}(2N(\omega_0) + 1)\rho_{ge}}{2}, \end{aligned} \quad (26)$$

т.е. экспоненциально затухают. Прямым вычислением проверяется, что положительная определённая матрица плотности,  $\rho_{ee}\rho_{gg} - |\rho_{eg}|^2 \geq 0$ , выполняется для любого момента времени и для любой положительно определённой начальной матрицы плотности.

Отметим, что иногда скорость релаксации энергии (диагональных элементов) называют скоростью продольной релаксации, а скорость затухания дипольного момента (недиагональных элементов) — скоростью поперечной релаксации. Для рассматриваемого резервуара скорость продольной релаксации равна  $\gamma_{\text{diss}}$ , а скорость поперечной релаксации  $\gamma_{\text{diss}}(2N(\omega_0) + 1)/2$ .

Проиллюстрируем выполнение начал термодинамики. У системы не существует интеграла движения, т.е. оператора, который коммутирует одновременно с гамильтонианом  $\hat{H}$  и оператором взаимодействия системы с резервуаром  $\hat{S}$ . Поэтому должно выполняться нулевое начало. Действительно, стационарным решением системы (25), (26) является распределение Гиббса:

$$\rho_{ee} = \frac{N(\omega_0)}{2N(\omega_0) + 1}, \quad \rho_{gg} = \frac{N(\omega_0) + 1}{2N(\omega_0) + 1}, \quad (27)$$

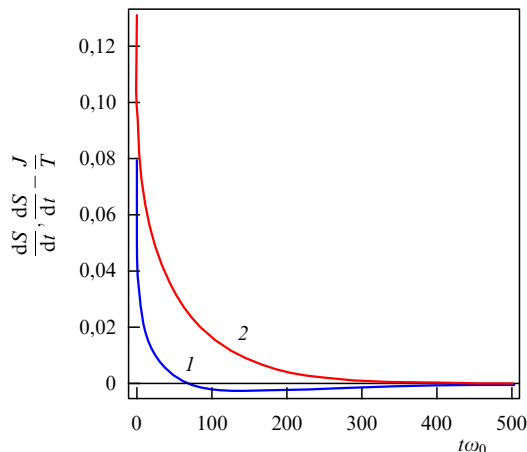
$$\frac{\rho_{ee}}{\rho_{gg}} = \frac{N(\omega_0)}{N(\omega_0) + 1} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{kT}\right),$$

т.е. выполняется нулевое начало термодинамики.

На рисунке 1 изображена зависимость от времени производной энтропии  $dS/dt$  и разности производной энтропии и потока тепла  $dS/dt - J/T$ . Видно, что разность  $dS/dt - J/T$  всегда больше нуля, т.е. выполняется второе начало термодинамики. Отметим, что сама величина  $dS/dt$  может менять знак. Например, если система релаксирует из чистого состояния  $|e\rangle\langle e|$ , то  $dS/dt > 0$  при переходе в смешанное состояние  $(|e\rangle\langle e| + |g\rangle\langle g|)/2$ , энтропия которого максимальна. Затем  $dS/dt$  становится отрицательной, поскольку система переходит из состояния  $(|e\rangle\langle e| + |g\rangle\langle g|)/2$  с максимальной энтропией в равновесное состояние (27).

В пределе нулевой температуры  $N(\omega_0) \rightarrow 0$  и  $\rho_{ee} \rightarrow 0$ ,  $\rho_{gg} \rightarrow 1$ , т.е. система переходит в основное состояние  $|g\rangle\langle g|$ . Для чистого состояния  $|g\rangle\langle g|$  энтропия равна нулю. Таким образом, третье начало также выполняется.

Отметим, что для оптических переходов при комнатной температуре уравнение Линдблада (24) может быть



**Рис 1.** Зависимость производной энтропии  $dS/dt$  (синяя линия 1) и разности  $dS/dt - J/T$  (красная линия 2) от времени;  $kT/\hbar\omega_0 = 0,2$ ,  $\gamma_{\text{diss}}/\omega_0 = 0,01$ .

упрощено. Так как энергия оптического кванта много больше комнатной температуры, то можно считать, что температура резервуара равна нулю. Как следствие,  $N(\omega_0) = 0$  и имеют место только спонтанные процессы, отвечающие за релаксацию. Уравнение Линдблада (24) упрощается до

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S(t) = -i[\hat{H}_S, \hat{\rho}_S] + \gamma_{\text{diss}} \left( \hat{\sigma} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} \hat{\rho}_S(t) - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} \right). \quad (28)$$

Таким образом, даже в отсутствие квантов возбуждения в резервуаре релаксация возбуждённой системы (в данном случае двухуровневого атома) всё равно происходит. Это связано с наличием нулевых колебаний энергии резервуара, даже когда он находится при нулевой температуре. Также отметим, что в оптическом диапазоне для рассматриваемого резервуара скорости поперечной и продольной релаксаций относятся как один к двум.

#### 4.2. Релаксация двухуровневого атома в дефазированном резервуаре

В разделе 4.1 был рассмотрен пример гамильтониана взаимодействия с резервуаром (22), когда происходит релаксация энергии системы. Однако в некоторых системах, например в коллоидных квантовых точках, молекулах красителя, сверхпроводящих кубитах, могут иметь место процессы, которые приводят только к сбою фазы системы, но не меняют её энергию. Такие процессы называют дефазировкой, или декогеренцией. В качестве примера можно привести ударное уширение линии излучения газов, упругое рассеяние фононов в твёрдом теле [30]. Скорость дефазировки может на несколько порядков превосходить скорость диссипации энергии [31–34]. Ниже приведён простейший пример резервуара, который приводит к сбою фазы системы, но не меняет её энергию.

Рассмотрим резервуар из гармонических осцилляторов с гамильтонианом

$$\hat{H}_R = \hbar \sum_k \omega_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (29)$$

Положим, что гамильтониан двухуровневой системы имеет вид (20), а взаимодействие ДУС с таким резервуаром описывается гамильтонианом

$$\hat{H}_{SR} = \hbar \sum_k \gamma_k \hat{\sigma}_z (\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k) = \hbar \lambda \hat{S} \hat{R}, \quad (30)$$

где  $\hat{\sigma}_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|$ ,  $\hat{S} = \hat{\sigma}_z$ ,  $\hat{R} = \sum_k (\gamma_k/\lambda) (\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k)$  [30]. Гамильтониан (30) описывает процесс поглощения и испускания кванта возбуждения резервуара таким образом, что энергия системы не меняется. Иными словами, он описывает процесс упругого рассеяния возбуждения резервуара на системе.

Выражение (10) в рассматриваемом случае примет вид

$$\hat{S}(t) = \exp(i\hat{H}_S t) \hat{S} \exp(-i\hat{H}_S t) = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|. \quad (31)$$

Далее необходимо подставить (31) в (9) и для вычисления интегралов применить второе ключевое приближение, а именно, равенства (12) и (13). Совершая прямые вы-

числения, получаем уравнение Линдблада вида (16):

$$\frac{\partial \hat{\rho}_S(t)}{\partial t} = -i[\hat{H}_S, \hat{\rho}_S] + \gamma_{\text{deph}} \left( \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z - \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_z \right) = -i[\hat{H}_S, \hat{\rho}_S] + \gamma_{\text{deph}} (\hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z - \hat{\rho}_S(t)), \quad (32)$$

где  $\gamma_{\text{deph}} = \lim_{\omega \rightarrow 0} G(\omega) = G(0)$ . Отметим, что в данном примере константа релаксации  $\gamma_{\text{deph}}$  (скорость дефазировки) пропорциональна числу квантов в резервуаре на нулевой частоте. Причиной этого является то, что оператор взаимодействия системы с резервуаром,  $\hat{H}_{\text{SR}} = \hbar \sum_k \gamma_k \hat{\sigma}_z (\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k)$ , описывает процессы без изменения энергии системы, т.е.  $[\hat{H}_{\text{SR}}, \hat{H}_S] = 0$ . Следовательно, средняя энергия системы не меняется. Математическим отражением этого факта является то, что оператор взаимодействия системы и резервуара  $\hat{S} = \hat{\sigma}_z$  диагонален в базисе собственных состояний  $\hat{H}_S$  (см. соотношение (31)). Для вычисления предела  $\omega \rightarrow 0$  в равенстве  $\gamma_{\text{deph}} = \lim_{\omega \rightarrow 0} G(\omega)$  нужно использовать низкочастотные свойства резервуара (конкретные примеры см. в [30, 35]). Отметим, что для подавляющего большинства оптических систем имеет место существенное превышение скорости дефазировки над скоростью релаксации энергии (в реальных системах это отношение может достигать пяти порядков).

Отметим важные свойства уравнения (32). Если записать (32) в базисе собственных состояний гамильтониана  $\hat{H}_S$ , то прямым вычислением легко получить:

$$\frac{d}{dt} \rho_{ee} = \frac{d}{dt} \rho_{gg} = 0, \quad (33)$$

т.е. связи между диагональными элементами матрицы плотности не будет. Это и означает, что энергия системы остаётся постоянной,

$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle = \rho_{ee} - \rho_{gg} = \text{const} = \langle \hat{\sigma}_z(0) \rangle. \quad (34)$$

Для недиагональных элементов матрицы плотности получаем

$$\frac{d}{dt} \rho_{eg} = -\gamma_{\text{deph}} \rho_{eg}. \quad (35)$$

Это значит, что дипольный момент ДУС,  $\hat{\mathbf{d}} = \mathbf{d}_{eg}(\hat{\sigma}^\dagger + \hat{\sigma}) \sim \text{Re} \langle \hat{\sigma} \rangle$ , затухает экспоненциально,

$$\langle \hat{\sigma} \rangle = \rho_{eg} = \langle \hat{\sigma}(0) \rangle \exp(-\gamma_{\text{deph}} t). \quad (36)$$

Стационарной матрицей плотности будет

$$\hat{\rho}_S^{\text{st}} = \begin{pmatrix} \rho_{ee}(0) & 0 \\ 0 & \rho_{gg}(0) \end{pmatrix}. \quad (37)$$

Таким образом, дефазирющий резервуар приводит к стремлению усреднённого дипольного момента ДУС к нулю (см. (36)), однако средний квадрат дипольного момента и энергия (34) не меняются. Поэтому такой процесс называют процессом дефазировки.

Отметим, что рассматриваемый дефазирющий резервуар обеспечивает лишь поперечную релаксацию, т.е. релаксацию дипольного момента, но не описывает продольную релаксацию (релаксацию энергии). Естественно, что в реальных системах присутствуют сразу оба вида релаксации, поэтому рассмотрение только одного дефа-

зирующего резервуара всегда является приближением. Как было показано выше, взаимодействие с резервуаром, которое приводит к диссипации энергии, в оптическом диапазоне даёт соотношение между временами продольной и поперечной релаксации, равное двум. Так как в реальной системе это отношение может достигать  $10^5$ , то в рамках двухуровневого приближения необходимо использовать как резервуар, описывающий релаксацию энергии, так и дефазирющий резервуар.

Обсудим выполнение начал термодинамики. У системы есть единственный интеграл движения — сам гамильтониан системы  $\hat{H}_S$ . Как отмечено выше, в этом случае у системы существуют инвариантные подпространства. В каждом инвариантном подпространстве значение интеграла движения  $\langle \hat{H}_S \rangle$  одно и то же. В рассматриваемой ситуации имеются два подпространства размерности один, которые состоят из собственных векторов  $|e\rangle$  и  $|g\rangle$  соответственно. Говорить в этом случае о распределении по энергиям в одном подпространстве бессмысленно. Стационарное состояние системы зависит только от начального состояния и не зависит от температуры резервуара (см. (37)), т.е. нулевое начало термодинамики не выполняется.

Первое начало выполняется, однако интересно отметить, что в данном примере поток тепла в резервуар  $J = 0$ , и второе начало термодинамики сводится к тому, что  $dS/dt > 0$ . Используя выражения (33) и (35), неравенство  $dS/dt > 0$  можно доказать прямым вычислением. Таким образом, данный резервуар не меняет энергию системы, а приводит только к росту её энтропии.

## 5. Релаксация составных систем. Общее рассмотрение

До сих пор в качестве системы рассматривался один двухуровневый атом. Однако в реальных задачах приходится иметь дело с более сложными системами, состоящими из нескольких подсистем, например, систем взаимодействующих атомов, логических цепочек кубитов, запутанных фотонов и др. Такие системы будем называть составными. Приведённая выше процедура Дэвиса для описания диссипации является общей. Однако при её применении к составным системам возникают значительные трудности. Они связаны с тем, что если в примерах, рассмотренных в предыдущих разделах, собственные частоты и собственные состояния гамильтониана системы  $\hat{H}_S$ , по которым проводится разложение оператора  $\hat{S}$ , были известны, то в общем случае для гамильтониана составной системы,

$$\hat{H}_S = \hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)} + \hat{V}_{12}, \quad (38)$$

где  $\hat{V}_{12}$  — взаимодействие между первой и второй подсистемами, такие состояния, как правило, точно не известны. Чтобы избежать этой трудности, часто разложение проводится по собственным состояниям невзаимодействующих подсистем. Если подсистемы не взаимодействуют, т.е.  $\hat{V}_{12} = 0$ , то такой подход срабатывает.

Действительно, с точки зрения строгой теории необходимо провести процедуру исключения переменных резервуаров для всей системы. В силу того что подсистемы не взаимодействуют, матрица плотности целой системы факторизуется,  $\hat{\rho}_S(t) = \hat{\rho}_S^{(1)}(t) \hat{\rho}_S^{(2)}(t)$ , если в начальный момент времени  $\rho_S(0) = \rho_S^{(1)}(0) \rho_S^{(2)}(0)$ . Формально общее

уравнение Линдблада можно получить, используя процедуру Дэвиса, если в качестве базиса взять базис собственных состояний  $|k^{(1)}\rangle|k^{(2)}\rangle$  с собственными частотами  $\omega_k^{(1)} + \omega_k^{(2)}$ . Ключевое предположение (10) остаётся справедливым, поскольку выполняется равенство

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i(\hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)})t}{\hbar}\right)|k^{(1)}\rangle|k^{(2)}\rangle = \\ = \exp\left(-i(\omega_k^{(1)} + \omega_k^{(2)})t\right)|k^{(1)}\rangle|k^{(2)}\rangle, \end{aligned}$$

и мы приходим к следующим выражениям:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)}, \hat{\rho}_S(t)] + \\ + \hat{L}^{(1)}[\hat{\rho}_S(t)] + \hat{L}^{(2)}[\hat{\rho}_S(t)], \end{aligned} \quad (39)$$

где

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S^{(1)}, \hat{\rho}_S^{(1)}(t)] + \hat{L}^{(1)}[\hat{\rho}_S^{(1)}(t)], \\ \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S^{(2)}, \hat{\rho}_S^{(2)}(t)] + \hat{L}^{(2)}[\hat{\rho}_S^{(2)}(t)]. \end{aligned} \quad (40)$$

Здесь  $\hat{H}_S^{(1)}$  и  $\hat{H}_S^{(2)}$  — гамильтонианы с собственными частотами  $\omega_k^{(1)}$ ,  $\omega_k^{(2)}$  и состояниями  $|k^{(1)}\rangle$ ,  $|k^{(2)}\rangle$ . Каждая из этих систем взаимодействует со своим резервуаром, так что уравнения Линдблада имеют вид (40), где  $\hat{\rho}_S^{(1)}$  и  $\hat{\rho}_S^{(2)}$  — матрицы плотности первой и второй системы соответственно. В справедливости (39) можно убедиться прямым дифференцированием  $\hat{\rho}_S(t) = \hat{\rho}_S^{(1)}(t)\hat{\rho}_S^{(2)}(t)$  по времени:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S(t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S^{(1)}(t)\right)\hat{\rho}_S^{(2)} + \hat{\rho}_S^{(1)}(t)\left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S^{(2)}(t)\right) = \\ = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S^{(1)}, \hat{\rho}_S^{(1)}(t)]\hat{\rho}_S^{(2)} + \hat{L}^{(1)}[\hat{\rho}_S^{(1)}(t)]\hat{\rho}_S^{(2)}(t) - \\ - \frac{i}{\hbar} \hat{\rho}_S^{(1)}(t)[\hat{H}_S^{(2)}, \hat{\rho}_S^{(2)}(t)] + \hat{\rho}_S^{(1)}(t)\hat{L}^{(2)}[\hat{\rho}_S^{(2)}(t)], \end{aligned}$$

где последнее выражение тождественно равно правой части (39), так как любые операторы первой и второй подсистем коммутируют. Таким образом, как указывалось выше, для невзаимодействующих систем супероператоры Линдблада аддитивны.

Казалось бы, если при включении взаимодействия между подсистемами каждая из подсистем продолжает взаимодействовать только со своим резервуаром, свойства которого не менялись при включении взаимодействия, то подход Дэвиса должен оставить супероператор Линдблада, касающийся этой подсистемы, без изменения. Общий супероператор Линдблада остаётся таким же, как в случае невзаимодействующих подсистем, а именно их суммой. В результате уравнение Линдблада сводится к следующему виду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)} + \hat{V}_{12}, \hat{\rho}_S(t)] + \\ + \hat{L}^{(1)}[\hat{\rho}_S(t)] + \hat{L}^{(2)}[\hat{\rho}_S(t)], \end{aligned} \quad (41)$$

т.е. взаимодействие систем учитывается только в эрмитовой части (41). Такой подход часто используется в

литературе и называется локальным, или феноменологическим [6–19, 28].

Однако если рассмотреть более подробно вывод супероператора Линдблада на основе процедуры Дэвиса, то ключевой момент вывода (10),

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i(\hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)} + \hat{V})t}{\hbar}\right)|k^{(1)}\rangle|k^{(2)}\rangle = \\ = \exp\left(-i(\omega_k^{(1)} + \omega_k^{(2)})t\right)|k^{(1)}\rangle|k^{(2)}\rangle, \end{aligned}$$

уже не выполняется и получить (41) не удаётся.

Корректное уравнение Линдблада должно иметь вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)} + \hat{V}_{12}, \hat{\rho}_S(t)] + \hat{L}_V[\hat{\rho}_S(t)], \quad (42)$$

где  $\hat{L}_V[\hat{\rho}_S(t)]$  описывает релаксацию всей системы и не является суммой операторов  $\hat{L}^{(1)}[\hat{\rho}_S(t)]$  и  $\hat{L}^{(2)}[\hat{\rho}_S(t)]$ . Для получения выражения (42) надо следовать процедуре Дэвиса, используя собственные частоты и собственные состояния составной системы.

Отметим, что, хотя уравнение (41) сохраняет норму и положительную определённую матрицу плотности, оно в общем случае некорректно. Единственным обоснованием использования (41) вместо (42) может являться предположение о том, что разница между решениями (41) и (42) будет мала при малом  $\hat{V}_{12}$ . Однако в данном случае интуиция, основанная на теории возмущений, даёт неверный ответ. Как будет показано далее, стационарные решения (41) и (42) могут существенно (по порядку величины) отличаться даже при  $\hat{V}_{12} \rightarrow 0$ . Особенно ярко это проявляется при взаимодействии с дефазирующим резервуаром.

## 6. Ошибки, возникающие при использовании феноменологического подхода.

### Две связанные двухуровневые системы, взаимодействующие с дефазирующим резервуаром

В качестве примера, иллюстрирующего некорректность феноменологического подхода, рассмотрим процесс дефазировки двух взаимодействующих ДУС. Для начала рассмотрим систему двух невзаимодействующих ДУС с гамильтонианом

$$\hat{H}_S = \hbar\omega_1\hat{\sigma}_1^\dagger\hat{\sigma}_1 + \hbar\omega_2\hat{\sigma}_2^\dagger\hat{\sigma}_2 = \hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)}. \quad (43)$$

Собственными состояниями невзаимодействующих ДУС являются всевозможные комбинации собственных состояний первой и второй системы,  $|e_1e_2\rangle$ ,  $|g_1e_2\rangle$ ,  $|g_1g_2\rangle$ . Пусть каждая ДУС взаимодействует со своим дефазирующим резервуаром, так что гамильтониан взаимодействия имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_{SR} = \hbar \sum_k \gamma_k^{(1)} \hat{\sigma}_z^{(1)} (\hat{a}_k^{(1)\dagger} + \hat{a}_k^{(1)}) + \\ + \hbar \sum_k \gamma_k^{(2)} \hat{\sigma}_z^{(2)} (\hat{a}_k^{(2)\dagger} + \hat{a}_k^{(2)}) = \hbar\lambda_1 \hat{S}_1 \hat{R}_1 + \hbar\lambda_2 \hat{S}_2 \hat{R}_2, \end{aligned} \quad (44)$$

$$\hat{S}_{1,2} = \hat{\sigma}_z^{(1,2)}, \quad \hat{R}_{1,2} = \sum_k \frac{\gamma_k^{(1,2)}}{\lambda_{1,2}} (\hat{a}_k^{(1,2)\dagger} + \hat{a}_k^{(1,2)}). \quad (45)$$

Операторы  $\hat{S}_1$ ,  $\hat{S}_2$ , входящие в гамильтониан взаимодействия систем с резервуаром, раскладываются по соб-



ственными состояниями системы (43) как

$$\begin{aligned}\hat{S}_1 &= \hat{\sigma}_z^{(1)} = \\ &= |e_1 e_2\rangle\langle e_1 e_2| + |e_1 g_2\rangle\langle e_1 g_2| - |g_1 e_2\rangle\langle g_1 e_2| - |g_1 g_2\rangle\langle g_1 g_2|, \\ \hat{S}_2 &= \hat{\sigma}_z^{(2)} = \\ &= |e_1 e_2\rangle\langle e_1 e_2| - |e_1 g_2\rangle\langle e_1 g_2| + |g_1 e_2\rangle\langle g_1 e_2| - |g_1 g_2\rangle\langle g_1 g_2|\end{aligned}\quad (46)$$

и являются диагональными в базисе собственных векторов гамильтониана  $\hat{H}_S$ . Согласно (39), уравнение Линдблада для двух невзаимодействующих ДУС имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial \hat{\rho}_S(t)}{\partial t} &= -i[\hat{H}_S, \hat{\rho}_S] + \gamma_{\text{deph}}^{(1)} (\hat{\sigma}_z^{(1)} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z^{(1)} - \hat{\rho}_S(t)) + \\ &+ \gamma_{\text{deph}}^{(2)} (\hat{\sigma}_z^{(2)} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z^{(2)} - \hat{\rho}_S(t)) = \\ &= -i[\hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)}, \hat{\rho}_S] + \hat{L}_1[\hat{\rho}_S(t)] + \hat{L}_2[\hat{\rho}_S(t)].\end{aligned}\quad (48)$$

Здесь  $\hat{\rho}_S = \hat{\rho}_S^{(1)} \hat{\rho}_S^{(2)}$ . Это соответствует тому, что каждая из ДУС диссипирует независимо друг от друга. Как и в случае одной ДУС, недиагональные элементы каждой из ДУС затухают экспоненциально (см. (36)):

$$\langle \hat{\sigma}_{1,2} \rangle = \langle \hat{\sigma}_{1,2}(0) \rangle \exp(-\gamma_{\text{deph}}^{(1,2)} t), \quad (49)$$

а инверсия населённости и энергия каждой ДУС сохраняются (см. (34)):

$$\langle \hat{\sigma}_z^{(1,2)} \rangle = \text{const} = \langle \hat{\sigma}_z^{(1,2)}(0) \rangle. \quad (50)$$

Поскольку гамильтониан системы является интегралом движения,  $[\hat{H}_S, \hat{H}_S + \hat{H}_{SR} + \hat{H}_R] = [\hat{H}_S, \hat{H}_{SR}] = 0$ , то, как и в случае одной ДУС с дефазирующим резервуаром, существуют инвариантные подпространства, каждое из которых имеет размерность один и состоит из собственных векторов  $|e_1 e_2\rangle$ ,  $|e_1 g_2\rangle$ ,  $|g_1 e_2\rangle$ ,  $|g_1 g_2\rangle$ . Вероятность заселённости каждого собственного уровня не меняется со временем. Нулевое начало, как и в случае одной ДУС, не выполняется.

Теперь предположим, что между двухуровневыми системами есть взаимодействие, такое, что гамильтониан системы имеет вид

$$\begin{aligned}\hat{H}_S &= \hbar\omega_1 \hat{\sigma}_1^\dagger \hat{\sigma}_1 + \hbar\omega_2 \hat{\sigma}_2^\dagger \hat{\sigma}_2 + \hbar\Omega_R (\hat{\sigma}_1^\dagger \hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_2^\dagger \hat{\sigma}_1) = \\ &= \hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)} + \hat{V}_{12}.\end{aligned}\quad (51)$$

По-прежнему будем предполагать, что каждая ДУС взаимодействует со своим дефазирующим резервуаром, и гамильтониан взаимодействия имеет вид (44).

Как уже отмечалось, феноменологический (или локальный) подход состоит в том, чтобы записать уравнение Линдблада в виде

$$\begin{aligned}\frac{\partial \hat{\rho}_S(t)}{\partial t} &= -i[\hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)} + \hat{V}_{12}, \hat{\rho}_S(t)] + \\ &+ \hat{L}_1[\hat{\rho}_S(t)] + \hat{L}_2[\hat{\rho}_S(t)].\end{aligned}\quad (52)$$

Формально можно показать, что существует единственный интеграл движения уравнения (52), а именно  $\hat{I} = \hat{\sigma}_z^{(1)} + \hat{\sigma}_z^{(2)}$ , для которого  $d\langle \hat{I}_S \rangle / dt = \text{tr}(\hat{I}_S \hat{\rho}_S) = 0$ . Этот оператор имеет следующие собственные состояния: состояния  $|e_1 g_2\rangle$  и  $|g_1 e_2\rangle$ , имеющие собственное значение

0, состояние  $|e_1 e_2\rangle$ , имеющее собственное значение 2, и состояние  $|g_1 g_2\rangle$ , имеющее собственное значение  $-2$ . Как отмечено в разделе 3, фазовое пространство системы должно разбиться на инвариантные подпространства, каждое из которых имеет в качестве базисных векторов собственные состояния с одинаковыми собственными значениями. В данном примере таких подпространств будет три: два — размерности один с базисными векторами  $|e_1 e_2\rangle$  и  $|g_1 g_2\rangle$  соответственно и одно — размерности два с базисными векторами  $|e_1 g_2\rangle$  и  $|g_1 e_2\rangle$ . Действительно, в матричном виде (52) выглядит как

$$\begin{aligned}\dot{\rho}^{(e_1 e_2, e_1 e_2)} &= 0, \quad \dot{\rho}^{(g_1 g_2, g_1 g_2)} = 0, \\ \dot{\rho}^{(e_1 g_2, e_1 g_2)} + \dot{\rho}^{(g_1 e_2, g_1 e_2)} &= 0, \\ \dot{\rho}^{(e_1 g_2, e_1 g_2)} - \dot{\rho}^{(g_1 e_2, g_1 e_2)} &= -2i\Omega_R (\rho^{(e_1 g_2, g_1 e_2)} - \rho^{(g_1 e_2, e_1 g_2)}), \\ \dot{\rho}^{(e_1 g_2, g_1 e_2)} &= (-i(\omega_2 - \omega_1) - \gamma_{\text{deph}}^{(1)} - \gamma_{\text{deph}}^{(2)}) \rho^{(e_1 g_2, g_1 e_2)} - \\ &- i\Omega_R (\rho^{(e_1 g_2, e_1 g_2)} - \rho^{(g_1 e_2, g_1 e_2)}), \\ \dot{\rho}^{(g_1 e_2, e_1 g_2)} &= (i(\omega_2 - \omega_1) - \gamma_{\text{deph}}^{(1)} - \gamma_{\text{deph}}^{(2)}) \rho^{(g_1 e_2, e_1 g_2)} + \\ &+ i\Omega_R (\rho^{(e_1 g_2, e_1 g_2)} - \rho^{(g_1 e_2, g_1 e_2)}),\end{aligned}\quad (53)$$

откуда видно, что уравнение (52) разбивается на подсистемы, соответствующие инвариантным подпространствам. В этих подпространствах должно установиться распределение Гиббса по возможным энергетическим состояниям. Однако непосредственной подстановкой в феноменологическое уравнение (52) можно убедиться, что для начального состояния  $\hat{\rho}_S(0) = |e_1 g_2\rangle\langle e_1 g_2|$ , принадлежащего подпространству с базисными векторами  $|e_1 g_2\rangle$  и  $|g_1 e_2\rangle$ , состояние

$$\hat{\rho}_{\text{st}}^{\text{incor}} = \frac{|e_1 g_2\rangle\langle e_1 g_2| + |g_1 e_2\rangle\langle g_1 e_2|}{2} \quad (54)$$

является стационарным решением. Очевидно, что выражение (54) не является распределением Гиббса с температурой резервуара, а значит, феноменологический подход (52) противоречит нулевому началу термодинамики, которое должно выполняться в данном подпространстве.

Помимо этого, несмотря на формальное выполнение первого начала термодинамики, нарушается и второе. Действительно, так как получаемое из феноменологического подхода стационарное решение (54) некорректно, то поток энергии из системы в резервуар тоже будет рассчитываться некорректно. В частности, при  $\omega_1 < \omega_2$  уравнение (52) предсказывает существование вечного двигателя второго рода: когда изначально возбуждена только низкочастотная ДУС, взаимодействие с резервуаром приводит к возбуждению высокочастотной ДУС (рис. 2а) вне зависимости от соотношения частот переходов и температуры резервуара.

Неравенство Клаузиуса,  $dS/dt - \sum_i J_i/T_i \geq 0$ , нарушается во все моменты времени (рис. 2б). Стоит отметить, что энтропия системы увеличивается,  $dS/dt > 0$  (рис. 2а). Однако это увеличение энтропии сопровождается "выкачиванием" энергии из резервуара,  $\sum_i J_i/T_i \geq 0$ , при этом величина  $dS/dt - \sum_i J_i/T_i$  оказывается отрицательной. Таким образом, феноменологический подход предсказывает нарушение второго начала термодинамики.

Формальной причиной нарушения законов термодинамики является то, что супероператорам Линдблада

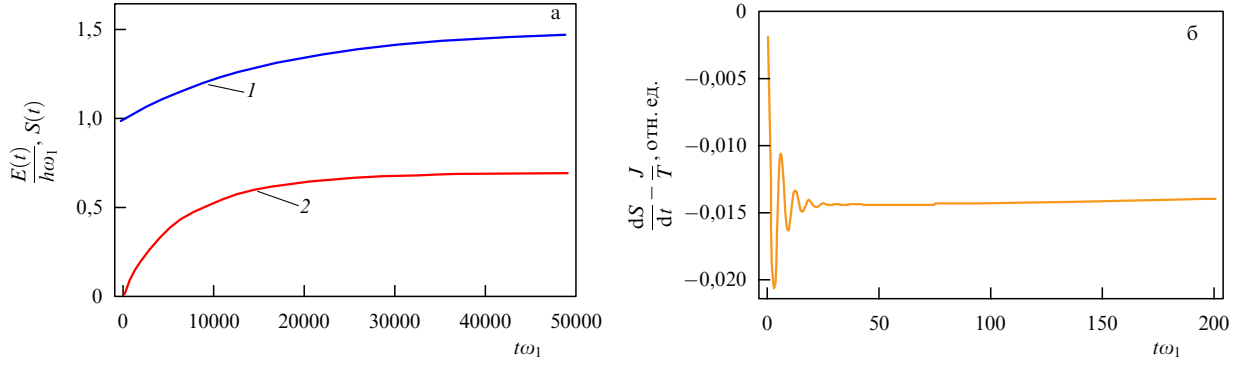


Рис. 2. (а) Зависимость энергии (синяя линия 1) и энтропии (красная линия 2) системы от времени. (б) Зависимость величины  $dS/dt - \sum_i J_i/T_i$  от времени (оранжевая линия).

$\hat{L}_1 + \hat{L}_2$  не соответствует никакой истинный гамильтониан взаимодействия системы с резервуаром  $\hat{H}_{SR}$ .

Покажем теперь, что уравнение Линдблада, полученное на основе корректного применения процедуры Дэвиса, приводит к выполнению всех законов термодинамики.

Для вывода корректного уравнения Линдблада разложим оператор взаимодействия по собственным состояниям системы. Последние для гамильтониана (51) могут быть вычислены точно и имеют вид

$$|\psi_1\rangle = |e_1, e_2\rangle, \quad |\psi_2\rangle = |g_1, g_2\rangle, \quad (55)$$

$$|\psi_3\rangle = \sqrt{\frac{W - \Delta\omega}{2W}} |e_1, g_2\rangle + \sqrt{\frac{W + \Delta\omega}{2W}} |g_1, e_2\rangle, \quad (56)$$

$$|\psi_4\rangle = \sqrt{\frac{W + \Delta\omega}{2W}} |e_1, g_2\rangle - \sqrt{\frac{W - \Delta\omega}{2W}} |g_1, e_2\rangle \quad (57)$$

с собственными энергиями

$$E_1 = \omega_1 + \omega_2, \quad E_2 = 0, \quad E_{3,4} = \frac{\omega_1 + \omega_2 \pm W}{2}, \quad (58)$$

где мы ввели обозначения  $W = \sqrt{\Delta\omega^2 + 4\Omega_R^2}$ ,  $\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1$ .

Производя разложения операторов  $\hat{S}_1$  и  $\hat{S}_2$  по собственным состояниям (55)–(57) и подставляя полученные выражения в уравнение Линдблада (16), получаем

$$\frac{\partial \hat{\rho}_S(t)}{\partial t} = -i[\hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)} + \hat{V}_{12}, \hat{\rho}_S(t)] + \hat{L}_V[\hat{\rho}_S(t)], \quad (59)$$

где коллективный супероператор Линдблада имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{L}_V[\hat{\rho}_S(t)] = & \gamma_{\text{deph}}^{(1)} \left( \hat{S}_{1d} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{1d}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{S}_{1d}^\dagger \hat{S}_{1d} \hat{\rho}_S(t) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{1d}^\dagger \hat{S}_{1d} \right) + \gamma_{\text{deph}}^{(2)} \left( \hat{S}_{2d} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{2d}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{S}_{2d}^\dagger \hat{S}_{2d} \hat{\rho}_S(t) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{2d}^\dagger \hat{S}_{2d} \right) + \gamma_{\text{deph}}^{(1)} (1 + N(W)) \left( \hat{S}_{1nd} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{1nd}^\dagger - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \hat{S}_{1nd}^\dagger \hat{S}_{1nd} \hat{\rho}_S(t) - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{1nd}^\dagger \hat{S}_{1nd} \right) + \gamma_{\text{deph}}^{(1)} N(W) \times \\ & \times \left( \hat{S}_{1nd}^\dagger \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{1nd} - \frac{1}{2} \hat{S}_{1nd} \hat{S}_{1nd}^\dagger \hat{\rho}_S(t) - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{1nd} \hat{S}_{1nd}^\dagger \right) + \\ & + \gamma_{\text{deph}}^{(2)} (1 + N(W)) \left( \hat{S}_{2nd} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{2nd}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{S}_{2nd}^\dagger \hat{S}_{2nd} \hat{\rho}_S(t) - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left. - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{2nd}^\dagger \hat{S}_{2nd} \right) + \gamma_{\text{deph}}^{(2)} N(W) \left( \hat{S}_{2nd}^\dagger \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{2nd} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \hat{S}_{2nd} \hat{S}_{2nd}^\dagger \hat{\rho}_S(t) - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{2nd} \hat{S}_{2nd}^\dagger \right). \quad (60) \end{aligned}$$

Здесь операторы  $\hat{S}_{1d}$ ,  $\hat{S}_{2d}$ ,  $\hat{S}_{1nd}$  и  $\hat{S}_{2nd}$  в базисе собственных состояний (55)–(57) имеют вид

$$\hat{S}_{1d} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| - |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \frac{\Delta\omega}{W} |\psi_3\rangle\langle\psi_3| - \frac{\Delta\omega}{W} |\psi_4\rangle\langle\psi_4|, \quad (61)$$

$$\hat{S}_{2d} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| - |\psi_2\rangle\langle\psi_2| - \frac{\Delta\omega}{W} |\psi_3\rangle\langle\psi_3| + \frac{\Delta\omega}{W} |\psi_4\rangle\langle\psi_4|, \quad (62)$$

$$\hat{S}_{1nd} = -\frac{W^2 - \Delta\omega^2}{W^2} |\psi_4\rangle\langle\psi_3|, \quad (63)$$

$$\hat{S}_{2nd} = \frac{W^2 - \Delta\omega^2}{W^2} |\psi_4\rangle\langle\psi_3|. \quad (64)$$

Отметим, что (60) нельзя представить в виде суммы диссипативных операторов, действующих только на первую и вторую ДУС. Таким образом, при взаимодействии подсистем диссипативные операторы не аддитивны.

Исследуем выполнение начал термодинамики для корректного уравнения Линдблада (59), а также сравним его решение с решением феноменологического уравнения Линдблада (52).

Так же как и для феноменологического уравнения (52), у корректного уравнения Линдблада (59) есть интеграл движения  $\hat{I} = \hat{\sigma}_z^{(1)} + \hat{\sigma}_z^{(2)}$ , который коммутирует как с гамильтонианом системы (51), так и с гамильтонианом взаимодействия системы с резервуаром (44). Согласно нулевому началу термодинамики, стационарным решением должно быть распределение Гиббса в инвариантных подпространствах, определяемых интегралом движения. Из уравнения (59) следует, что если в качестве начального состояния взять состояние  $\hat{\rho}_S(0) = |e_1 g_2\rangle\langle e_1 g_2|$ , лежащее в инвариантном подпространстве с базисом  $|e_1 g_2\rangle$  и  $|g_1 e_2\rangle$ , то стационарным решением уравнения (59) будет состояние

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{st}^{\text{cor}} = & \left( |\psi_4\rangle\langle\psi_4| + \exp\left(-\frac{E_3 - E_4}{kT}\right) |\psi_3\rangle\langle\psi_3| \right) \times \\ & \times \left[ \exp\left(-\frac{E_3 - E_4}{kT}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad (65) \end{aligned}$$

являющееся распределением Гиббса по собственным состояниям  $|\psi_4\rangle$  и  $|\psi_3\rangle$ , принадлежащим инвариантному

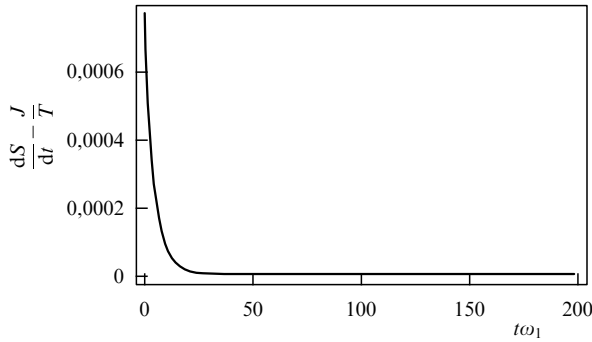


Рис. 3. Зависимость величины  $dS/dt - \sum_i J_i/T_i$  от времени;  $\omega_2/\omega_1 = 2$ ,  $g/\omega_1 = 0,02$ ,  $\gamma_{\text{deph}}^{(1,2)}/\omega_1 = 0,05$ ,  $kT_1/\hbar\omega_1 = 0,01$ ,  $T_2 = T_1$ .

подпространству с базисными векторами  $|e_1g_2\rangle$  и  $|g_1e_2\rangle$ , что качественно отличается от предсказаний феноменологической теории.

Теперь исследуем вопрос о выполнении второго начала термодинамики, а именно неравенства (19). На рисунке 3 представлена величина  $dS/dt - \sum_i J_i/T_i$  в зависимости от времени для уравнения Линдблада (59). Видно, что для уравнения (59) неравенство (19) всегда выполняется. Таким образом, правильная запись уравнения Линдблада гарантирует выполнение второго начала термодинамики (19).

Имея дело с вечным двигателем второго рода, мало осознавать, что его нельзя сделать. Гораздо интереснее понять, где происходит логическая ошибка при его построении. Возвратимся к нашему примеру взаимодействия двух ДУС с дефазирующим резервуаром. Причину логической ошибки можно понять из следующих простых соображений. Для гамильтониана двух ДУС без взаимодействия,  $\hat{H}_S^{(1)} + \hat{H}_S^{(2)}$ , собственными состояниями являются состояния первой и второй системы,  $|e_1e_2\rangle$ ,  $|e_1g_2\rangle$ ,  $|g_1e_2\rangle$ ,  $|g_1g_2\rangle$ . При взаимодействии с дефазирующими резервуарами переход между состояниями  $|e_1g_2\rangle$  и  $|g_1e_2\rangle$  оказывается запрещённым, поскольку матричный элемент  $\langle e_1g_2|\hat{H}_{SR}|g_1e_2\rangle$  равен нулю. При включении взаимодействия между ДУС  $\hat{V}$  собственными состояниями будут линейные комбинации состояний  $|e_1g_2\rangle$  и  $|g_1e_2\rangle$ , а именно состояния  $|\psi_3\rangle$  и  $|\psi_4\rangle$ , задаваемые уравнениями (56), (57). Переход между состояниями  $|\psi_3\rangle$  и  $|\psi_4\rangle$  становится возможным, поскольку матричный элемент  $\langle \psi_3|\hat{H}_{SR}|\psi_4\rangle$  не будет равен нулю. Более того, он будет отличен от нуля при сколь угодно малом взаимодействии  $\hat{V}$ . Таким образом, включение взаимодействия  $\hat{V}$  между ДУС приводит к тому, что снимается запрет на переход между состояниями, который без взаимодействия был запрещён, т.е. появляется дополнительный канал диссипации. Ясно, что в этом случае стационарное значение матрицы плотности может сильно меняться. Приведённый пример демонстрирует, что матричные элементы стационарной матрицы плотности, полученные из решения корректного и феноменологического уравнений Линдблада, могут существенно различаться.

## 7. Создание положительной инверсной населённости двухуровневых систем когерентной накачкой

В качестве примера, иллюстрирующего невозможность описать некоторые явления в рамках феноменологиче-

ского подхода, рассмотрим динамику ДУС, взаимодействующей с классической монохроматической электромагнитной волной.

Общепринято, что когерентной накачкой нельзя создать стационарную положительную инверсную населённость ДУС [36, 37]. Этот результат получен в феноменологическом приближении, когда при положительной температуре резервуара энергия либо переходит из системы в резервуар, если резервуар диссипативный, либо вообще не переходит, если резервуар дефазирующий, так как в этом случае скорости прямого и обратного переходов одинаковы. Из соотношений Кубо–Мартина–Швингера (см. обсуждение после (15)) следует, что в первом случае стационарное состояние соответствует распределению Гиббса, и инверсия населённости ДУС отрицательна, во втором случае инверсия вообще не меняется. Для одной системы и резервуара корректное описание не даёт принципиально новых результатов. Но если в систему добавляется, например, внешнее поле, зависящее от времени, то соотношение Кубо–Мартина–Швингера для исходных уровней энергии нарушается, так как собственные состояния нового гамильтониана не обладают фиксированной энергией. Последнее обстоятельство можно учесть только в рамках корректного подхода. В этом случае для дефазирующего резервуара равенство скоростей прямого и обратного переходов для исходных уровней может смениться в любую сторону, в частности привести к стационарному состоянию с положительной инверсной населённостью,  $\langle \hat{\sigma}_z \rangle_{\text{st}} > 0$  [28]. При этом вся работа над ДУС, необходимая для создания положительной инверсной населённости, будет совершаться внешним полем.

Впервые решение задачи о стационарном состоянии ДУС во внешнем монохроматическом поле было получено при помощи феноменологических оптических уравнений Блоха [30, 36, 38]

$$\frac{d\langle \hat{\sigma} \rangle}{dt} = -i\omega_0 \langle \hat{\sigma} \rangle - \frac{i}{2} \Omega \exp(-i\omega t) \langle \hat{\sigma}_z \rangle - \gamma_{\perp} \langle \hat{\sigma} \rangle, \quad (66)$$

$$\frac{d\langle \hat{\sigma}^{\dagger} \rangle}{dt} = i\omega_0 \langle \hat{\sigma}^{\dagger} \rangle + \frac{i}{2} \Omega \exp(i\omega t) \langle \hat{\sigma}_z \rangle - \gamma_{\perp} \langle \hat{\sigma}^{\dagger} \rangle, \quad (67)$$

$$\frac{d\langle \hat{\sigma}_z \rangle}{dt} = i\Omega (\langle \hat{\sigma}^{\dagger} \rangle \exp(-i\omega t) - \langle \hat{\sigma} \rangle \exp(i\omega t)) - \gamma_{\parallel} (\langle \hat{\sigma}_z \rangle + 1), \quad (68)$$

где  $\langle \rangle$  есть среднее значение операторов,  $\omega$  — частота падающей монохроматической волны,  $\Omega = -\mathbf{E}\mathbf{d}/\hbar$  — частота Раби, которая определяет взаимодействие ДУС с внешним электрическим полем  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{d}$  — матричный элемент дипольного перехода ДУС [24, 30, 38],  $\gamma_{\parallel}$  — скорость продольной релаксации ДУС,  $\gamma_{\perp}$  — скорость поперечной релаксации ДУС, феноменологически введённые для описания процессов релаксации.

Из оптических уравнений Блоха (66)–(68), в частности, следует, что населённость уровней ДУС стремится к отрицательному стационарному значению  $\langle \hat{\sigma}_z \rangle_{\text{st}}$  на больших временах, даже в случае резонансного совпадения частот [30, 38]:

$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle_{\text{st}} = -\frac{1}{1 + \Omega^2 \gamma_{\parallel} \gamma_{\perp} / (\gamma_{\perp}^2 + (\omega_0 - \omega)^2)} < 0. \quad (69)$$

Таким образом, оптические уравнения Блоха предсказывают принципиальную невозможность получения ста-

ционарной инверсной населённости ДУС  $\langle \hat{\sigma}_z \rangle_{st} > 0$  когерентной накачкой.

Известно, что более последовательным является применение уравнения Линдблада, но подавляющее число работ и монографий по квантовой оптике [20, 30, 39] основывается на феноменологическом подходе, т.е. при исключении фотонного (22) и фононного (30) резервуаров используются собственные состояния изолированной ДУС с гамильтонианом  $\hat{H}_{S0} = \hbar\omega_0\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma}$ . Полученные супероператоры Линдблада для фотонного и фононного резервуаров имеют вид (24) и (32) соответственно. Наличие же внешней монохроматической волны учитывается только добавлением дополнительного члена  $\hbar\Omega(\hat{\sigma}^\dagger \exp(-i\omega t) + \hat{\sigma} \exp(i\omega t))$  в гамильтониан  $\hat{H}_{S0}$ , который описывает дипольное взаимодействие ДУС с внешним полем в приближении вращающейся волны. В итоге получается гамильтониан системы [30, 38]

$$\hat{H}_S(t) = \hbar\omega_0\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma} + \hbar\Omega(\hat{\sigma}^\dagger \exp(-i\omega t) + \hat{\sigma} \exp(i\omega t)) \quad (70)$$

и феноменологическое уравнение Линдблада

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}_S(t)}{\partial t} = & -i[\hat{H}_S(t), \hat{\rho}_S(t)] + \gamma_{\text{diss}}(N(\omega_0) + 1) \times \\ & \times \left( \hat{\sigma} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} - \frac{1}{2} \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} \hat{\rho}_S(t) \right) + \\ & + \gamma_{\text{diss}} N(\omega_0) \left( \hat{\sigma}^\dagger \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma} - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma} \hat{\sigma}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^\dagger \hat{\rho}_S(t) \right) + \\ & + \frac{\gamma_{\text{deph}}}{2} (\hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} - \hat{\rho}_S(t)), \end{aligned} \quad (71)$$

где  $\gamma_{\text{diss}}$  и  $\gamma_{\text{deph}}$  — скорости диссипации и дефазировки соответственно, введённые в разделах 3 и 4. Уравнение Линдблада (71) также предсказывает, что с помощью классической монохроматической электромагнитной волны в ДУС нельзя создать стационарную инверсную населённость больше нуля [20].

Заметим, что ДУС — это удачная идеализированная модель атома. Согласно существующим представлениям для получения положительной инверсной населённости ДУС нужна некогерентная накачка. Однако создать положительную инверсию населённости рабочего уровня можно, например, в трёхуровневой системе и когерентной накачкой с частотой, отличной от частоты рабочего перехода. При переходе от трёхуровневой системы к ДУС гамильтониан ДУС не будет содержать члена взаимодействия с когерентным полем, а в уравнение Линдблада добавляется член [30]

$$\hat{L}_{\text{pump}}(\hat{\rho}_S) = \gamma_{\text{pump}} \left( \hat{\sigma}^\dagger \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma} - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma} \hat{\sigma}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^\dagger \hat{\rho}_S(t) \right), \quad (72)$$

который описывает переход ДУС в возбуждённое состояние со скоростью  $\gamma_{\text{pump}}$ , именуемой скоростью некогерентной накачки ДУС. Аналогичный результат получается, если рассмотреть взаимодействие ДУС с резервуаром, имеющим отрицательную температуру. При достаточно большой скорости накачки,  $\gamma_{\text{pump}} > \gamma_{\text{diss}}$ , супероператор Линдблада  $\hat{L}_{\text{pump}}(\hat{\rho}_S)$  (72) может привести к положительной инверсной населённости ДУС. Отметим, что при этом предполагается обязательное физическое отличие накачиваемой системы от ДУС [2, 40].

Рассмотрим уравнение Линдблада, полученное по алгоритму Дэвиса, изложенному в разделе 2 [41]. В от-

личие от феноменологического подхода (71), в корректном уравнении Линдблада автоматически появляется член вида (72).

Так как, в отличие от случаев, рассмотренных в разделах 3 и 4, гамильтониан системы (70) зависит от времени, то, чтобы найти корректное уравнение Линдблада на матрицу плотности ДУС, сделаем унитарное преобразование  $\hat{U}_{\text{ex}}(t) = \exp(-i\omega\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma}t)$  гамильтониана системы (70), гамильтонианов резервуаров (21) и (29) и гамильтонианов взаимодействия системы с резервуарами (22) и (30) [41]:

$$\begin{aligned} \hat{H}'_S = & \hat{U}_{\text{ex}}^\dagger(t) \hat{H}_S(t) \hat{U}_{\text{ex}}(t) - i\hat{U}_{\text{ex}}^\dagger(t) \frac{\partial \hat{U}_{\text{ex}}(t)}{\partial t} = \\ = & \hbar(\omega_0 - \omega)\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma} + \hbar\Omega(\hat{\sigma}^\dagger + \hat{\sigma}), \end{aligned} \quad (73)$$

$$\hat{H}'_R = \hat{U}_{\text{ex}}^\dagger(t) \hat{H}_R \hat{U}_{\text{ex}}(t) = \sum_v \hbar v \hat{a}_{1,v}^\dagger \hat{a}_{1,v} + \sum_v \hbar v \hat{a}_{2,v}^\dagger \hat{a}_{2,v}, \quad (74)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}'_{\text{SR}} = & \hat{U}_{\text{ex}}^\dagger(t) \hat{H}_{\text{SR}} \hat{U}_{\text{ex}}(t) = \\ = & \hbar \sum_v w_{1v} (\hat{\sigma}^\dagger \exp(i\omega t) + \hat{\sigma} \exp(-i\omega t)) (\hat{a}_{1,v}^\dagger + \hat{a}_{1,v}) + \\ & + \hbar \sum_v w_{2v} \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} (\hat{a}_{2,v}^\dagger + \hat{a}_{2,v}). \end{aligned} \quad (75)$$

После такого преобразования гамильтониан системы (70) перестаёт зависеть от времени, его собственные состояния и собственные частоты имеют вид

$$|\psi_+\rangle = \sqrt{1-\alpha^2}|e\rangle + \alpha|g\rangle, \quad (76)$$

$$\lambda_+ = \frac{\omega_0 - \omega}{2} + \sqrt{\frac{(\omega_0 - \omega)^2}{4} + \Omega^2},$$

$$|\psi_-\rangle = -\alpha|e\rangle + \sqrt{1-\alpha^2}|g\rangle, \quad (77)$$

$$\lambda_- = \frac{\omega_0 - \omega}{2} - \sqrt{\frac{(\omega_0 - \omega)^2}{4} + \Omega^2}.$$

Параметр  $\alpha$  зависит от частоты Раби  $\Omega$ , частоты перехода ДУС  $\omega_0$  и частоты падающего поля  $\omega$  следующим образом:

$$\alpha = \frac{2\Omega}{\sqrt{4\Omega^2 + (\omega_0 - \omega + \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + 4\Omega^2})^2}}. \quad (78)$$

При этом из (76), (77) следует, что  $\lambda_+ > \lambda_-$  всегда, когда ДУС находится под воздействием классической монохроматической электромагнитной волны. Ниже они будут использоваться для вывода супероператоров Линдблада.

Отметим, что гамильтониан взаимодействия системы с резервуаром  $\hat{H}'_{\text{SR}}(t)$  начинает явно зависеть от времени. Однако это не создаёт дополнительных трудностей при использовании алгоритма Дэвиса.

Собственные состояния  $|\psi_\pm\rangle$  гамильтониана  $\hat{H}'_S$  (73) являются квантовой суперпозицией основного  $|g\rangle$  и возбуждённого  $|e\rangle$  состояния невзаимодействующей ДУС (20). Кроме того, имеет место перестройка основного состояния гамильтониана  $\hat{H}'_S$  (73) в зависимости от частоты  $\omega$  падающей электромагнитной волны. Как видно из (76)–(78), при частотах падающего поля, меньших частоты перехода ДУС,  $\omega < \omega_0$  ( $\alpha < 0,5$ ), основной вклад в основное состояние  $|\psi_-\rangle$  вносит состояние  $|g\rangle$ , тогда как

в обратной ситуации, когда  $\omega > \omega_0$  ( $\alpha > 0,5$ ), главный вклад в основное состояние  $|\psi_-\rangle$  вносит состояние  $|e\rangle$ .

Использование собственных состояний (76), (77) приводит к уравнению Линдблада, которое будет содержать шесть супероператоров Линдблада, связанных со взаимодействием ДУС с *фотонным* резервуаром, вместо двух, получаемых при феноменологическом подходе (см. (71)), и три супероператора Линдблада, связанных со взаимодействием ДУС с *фононным* резервуаром, вместо одного, получаемого при феноменологическом подходе (см. (71)) [41].

Явное выражение для новых супероператоров Линдблада довольно громоздкое [41], мы не будем приводить его здесь целиком. Вместо этого отметим, что динамика релаксации ДУС, связанная с новыми супероператорами Линдблада, возникающими в результате взаимодействия с *фотонным* резервуаром, практически не отличается от динамики, предсказанной феноменологическим уравнением Линдблада (71).

Динамика релаксации ДУС, связанная с новыми супероператорами Линдблада, возникающими при взаимодействии с *фононным* резервуаром, в некоторых случаях существенно отличается от той, что предсказывается феноменологическим подходом (71). Связано это прежде всего с тем, что при наличии внешней классической монохроматической волны оператор ДУС  $\hat{\sigma}_z$  взаимодействует с фононным резервуаром (см. (30)) перестаёт коммутировать с гамильтонианом ДУС (70):

$$[\hat{H}_S, \hat{\sigma}_z] \neq 0. \quad (79)$$

Это означает, что фононный резервуар не сохраняет энергию ДУС и может способствовать как притоку энергии в ДУС, так и оттоку энергии из неё. Наличие процессов оттока и притока энергии благодаря взаимодействию ДУС с фононным резервуаром является главным отличием феноменологического подхода от подхода на основе процедуры Дэвиса. Указанным процессам соответствуют супероператоры Линдблада

$$\begin{aligned} \hat{L}(\hat{\rho}'_S) = & \gamma_{\text{deph}} \frac{G(\Delta\lambda)}{G(0)} \left( \hat{S}\hat{\rho}'_S\hat{S}^\dagger - \frac{1}{2}\hat{S}^\dagger\hat{S}\hat{\rho}'_S - \frac{1}{2}\hat{\rho}'_S\hat{S}^\dagger\hat{S} \right) + \\ & + \gamma_{\text{deph}} \frac{G(-\Delta\lambda)}{G(0)} \left( \hat{S}^\dagger\hat{\rho}'_S\hat{S} - \frac{1}{2}\hat{S}\hat{S}^\dagger\hat{\rho}'_S - \frac{1}{2}\hat{\rho}'_S\hat{S}\hat{S}^\dagger \right), \quad (80) \end{aligned}$$

где  $\Delta\lambda = \lambda_+ - \lambda_-$ , оператор  $\hat{S}$  имеет вид

$$\hat{S} = |\psi_-\rangle\langle\psi_-| \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} |\psi_+\rangle\langle\psi_+|, \quad (81)$$

а штрих у матрицы плотности ДУС означает, что она преобразована согласно унитарному преобразованию  $\hat{U}_{\text{ex}}(t) = \exp(-i\omega\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma}t)$ , аналогично (73)–(75).

Супероператор Линдблада (80) содержит два слагаемых: одно отвечает оттоку энергии из ДУС, а второе — притоку энергии в ДУС. Относительные скорости этих процессов определяются температурными множителями  $G(\pm\Delta\lambda)$ . При температурах  $kT \geq \hbar\Delta\lambda$  скорости оттока энергии из ДУС и притока энергии в ДУС, возникающей благодаря взаимодействию с фононным резервуаром, практически уравниваются. Поэтому отсутствует существенное отличие между предсказаниями феноменологического уравнения Линдблада (71) и корректного уравнения Линдблада.

Существенные отличия в динамике, таким образом, могут наблюдаться при низких температурах,  $kT < \hbar\Delta\lambda$ . Рассмотрим случай  $kT \ll \hbar\Delta\lambda$ , тогда от двух слагаемых в

правой части (80) остаётся только первое, поскольку  $\Delta\lambda = \lambda_+ - \lambda_- = [(\omega_0 - \omega)^2 + 4Q^2]^{1/2} > 0$ . Таким образом, супероператор Линдблада (80) принимает вид

$$\hat{L}(\hat{\rho}'_S) = \gamma_{\text{deph}} \frac{G(\Delta\lambda)}{G(0)} \left( \hat{S}\hat{\rho}'_S\hat{S}^\dagger - \frac{1}{2}\hat{S}^\dagger\hat{S}\hat{\rho}'_S - \frac{1}{2}\hat{\rho}'_S\hat{S}^\dagger\hat{S} \right). \quad (82)$$

Для наглядности рассмотрим случай слабой монохроматической электромагнитной волны, когда частота Раби существенно меньше, чем отстройка частоты внешнего поля от частоты перехода ДУС,  $|\Omega| \ll |\omega_0 - \omega|$ . В этом случае оператор  $\hat{S}$  супероператора Линдблада (82) существенно зависит от того, какая из частот —  $\omega_0$  или  $\omega$  — больше. Из выражений (76)–(78) и (81) получаем в лидирующем порядке по  $\Omega/|\omega_0 - \omega|$ :

$$\hat{S} \approx \begin{cases} -\frac{\Omega}{|\omega_0 - \omega|} \hat{\sigma}, & \omega < \omega_0, \\ \frac{\Omega}{|\omega_0 - \omega|} \hat{\sigma}^\dagger, & \omega > \omega_0. \end{cases} \quad (83)$$

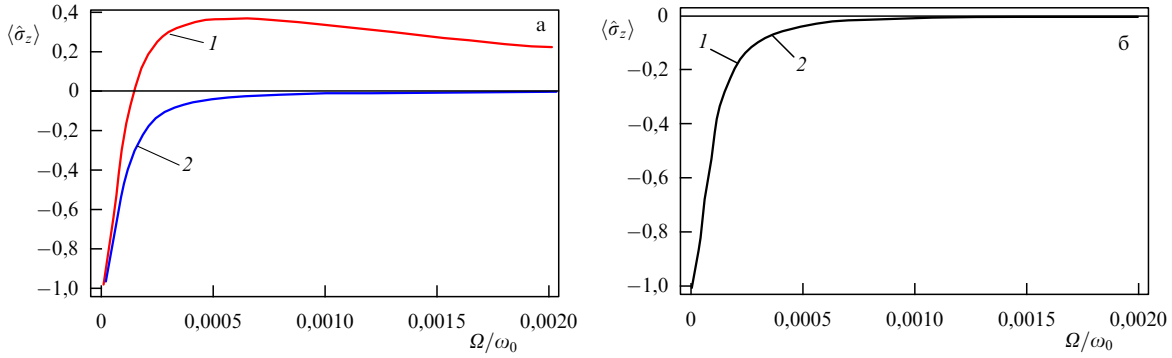
Такое поведение оператора  $\hat{S}$  согласуется с отмеченной ранее перестройкой собственных состояний гамильтониана  $\hat{H}'_S$ . Действительно, при  $\omega > \omega_0$  основное состояние  $|\psi_-\rangle \approx |e\rangle$ , а  $|\psi_+\rangle \approx |g\rangle$ , таким образом, из (81) следует  $\hat{S} \propto |e\rangle\langle g| = \hat{\sigma}^\dagger$ , что согласуется с (83). Используя (82), получаем, что при малой слабой амплитуде внешнего поля,  $|\Omega| \ll |\omega_0 - \omega|$ , положительной расстройке,  $\omega > \omega_0$ , и низких температурах,  $kT \ll \hbar\Delta\lambda$ , супероператор Линдблада (82) принимает вид

$$\hat{L}(\hat{\rho}'_S) = \frac{\Omega\gamma_{\text{deph}}}{|\omega_0 - \omega|} \left( \hat{\sigma}^\dagger\hat{\rho}'_S\hat{\sigma} - \frac{1}{2}\hat{\sigma}\hat{\sigma}^\dagger\hat{\rho}'_S - \frac{1}{2}\hat{\rho}'_S\hat{\sigma}\hat{\sigma}^\dagger \right). \quad (84)$$

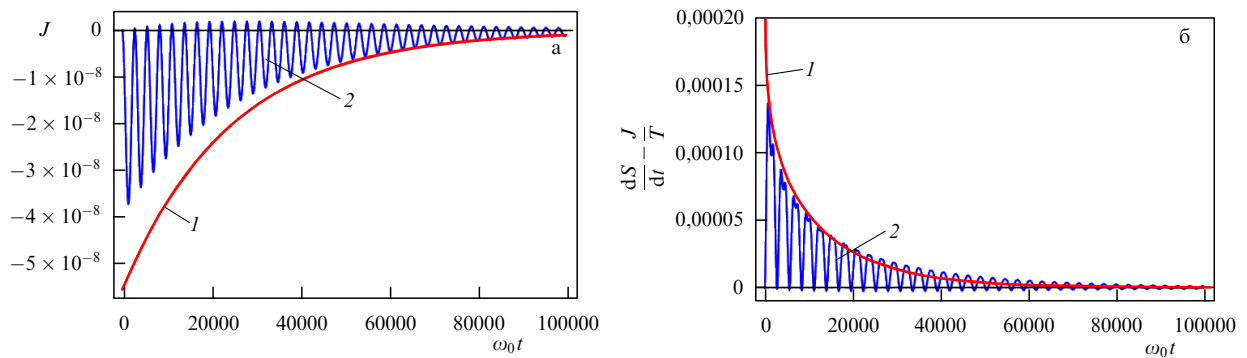
Полученный супероператор Линдблада (84) по виду соответствует супероператору Линдблада некогерентной накачки (72). Таким образом, при определённых параметрах системы фононный резервуар, взаимодействующий с ДУС при наличии внешней классической монохроматической электромагнитной волны, может приводить к некогерентной накачке ДУС.

Численное моделирование корректного уравнения Линдблада на матрицу плотности показывает, что некогерентная накачка, возникающая из-за фононного резервуара при действии на ДУС классического монохроматического поля, в некоторых случаях приводит к инверсной населённости ДУС больше нуля даже при наличии фотонного резервуара [40]. На рисунке 4 представлена зависимость среднего значения инверсной населённости  $\langle\hat{\sigma}_z\rangle$  от частоты Раби. При высокой температуре,  $kT \gg \hbar\Delta\lambda$ , нет существенного отличия между инверсной населённостью, полученной из корректного и феноменологического уравнений Линдблада (рис. 4б). При достаточно низких температурах,  $kT \ll \hbar\Delta\lambda$ , эти два подхода дают существенно разные результаты: корректное уравнение Линдблада предсказывает возможность получения инверсной населённости в ДУС (рис. 4а).

Рассмотрим вопрос о потоках энергии и о выполнении второго начала термодинамики. Феноменологическое уравнение Линдблада может приводить к тому, что в некоторые моменты времени энергия передаётся от резервуаров к системе (положительные значения  $J$  на рис. 5а). Такое поведение системы вступает в противоречие со вторым началом термодинамики: величина  $dS/dt - J/T$  становится отрицательной. Корректное уравнение Линдблада даёт монотонную зависимость



**Рис. 4.** Зависимость инверсной населённости  $\langle \hat{\sigma}_z \rangle$  от константы взаимодействия  $\Omega$  между ДУС и лазерным излучением для  $|\omega - \omega_0| = 10^{-3}\omega_0$ ,  $\gamma_{\text{diss}}/\omega_0 = 10^{-6}$ ,  $\gamma_{\text{deph}}/\omega_0 = 10^{-4}$ , (а)  $T = 10^{-3}\omega_0$ , (б)  $T = 10^{-1}\omega_0$ . Красная линия 1 — результат решения корректного уравнения Линдблада на матрицу плотности, синяя линия 2 — результат решения феноменологического уравнения Линдблада. На рисунке б линии 1 и 2 практически совпадают.



**Рис. 5.** Зависимость потока энергии  $J$  между резервуаром и системой (а) и величины  $dS/dt - J/T$  (б) от времени. В нулевой момент времени ДУС находится в основном состоянии,  $\Omega/\omega_0 = 10^{-3}$ ,  $|\omega - \omega_0| = 10^{-3}\omega_0$ ,  $\gamma_{\text{diss}}/\omega_0 = 10^{-6}$ ,  $\gamma_{\text{deph}}/\omega_0 = 10^{-4}$ ,  $T = 10^{-3}\omega_0$ . Красная линия 1 — результат решения корректного уравнения Линдблада на матрицу плотности, синяя линия 2 — результат решения феноменологического уравнения Линдблада.

потока энергии между системой и резервуаром от времени (рис. 5а). При выбранных параметрах основной вклад в поток энергии вносит фононный резервуар. Передаваемой энергии от внешней классической монохроматической электромагнитной волны хватает и на то, чтобы отдать энергию резервуару (рис. 5а), и на то, чтобы накачать ДУС (рис. 4а). Таким образом, видно, что при использовании корректного уравнения Линдблада накачка системы полностью происходит за счёт работы, совершаемой внешней классической монохроматической электромагнитной волной, взаимодействующей с ДУС.

В заключение отметим, что наиболее сильное различие между феноменологическим и корректным уравнениями Линдблада возникает в пределе  $\max(|\omega - \omega_0|, \Omega) \gg \gamma_a, \gamma_{\text{deph}}$  (рис. 4а). В обратном предельном случае, когда  $\max(|\omega - \omega_0|, \Omega) \ll \gamma_a, \gamma_{\text{deph}}$ , различие несущественно (рис. 4б) и можно пользоваться феноменологическим уравнением Линдблада на матрицу плотности, как это и принято в литературе [20, 30, 39].

### 8. Заключение

В настоящей заметке рассмотрена релаксация взаимодействующих открытых квантовых систем. Приведена процедура Дэвиса исключения переменных резервуара и получения уравнения Линдблада на матрицу плотности. Решениями этого уравнения являются положительно определённые матрицы плотности с единичным следом,

обеспечивающие выполнение первого и второго начал термодинамики.

В предположении, что гамильтониан взаимодействия с резервуаром каждой из подсистем независим от других, проведён сравнительный анализ результатов, полученных в рамках подхода Дэвиса и феноменологического подхода. Последний основывается на предположении, что диссипативные супероператоры Линдблада, возникающие при исключении переменных резервуара, остаются для каждой из подсистем такими же, как и в отсутствие взаимодействия между подсистемами. Иными словами, супероператор Линдблада сложной системы считается суммой супероператоров Линдблада отдельных подсистем. Учитывая, что гамильтонианы взаимодействия подсистем с резервуаром не меняются при включении взаимодействия, данное предположение кажется правдоподобным. Показано, что, несмотря на разумность данного предположения, существенно упрощающего расчёты, оно может привести к неправильным результатам, противоречащим второму закону термодинамики. Причиной некорректности такого подхода является пренебрежение изменением собственных состояний гамильтониана сложной системы при учёте взаимодействия между её частями. В результате качественно меняется динамика взаимодействия сложной системы с резервуаром. Оказывается, что взаимодействие между подсистемами приводит не только к появлению соответствующего члена в гамильтониане общей системы, но и к неаддитивности супероператоров Линдблада. В частности, при одних и тех же гамильтонианах

взаимодействия подсистем с резервуаром в зависимости от характера взаимодействия между подсистемами супероператор Линдблада может приводить как к чистой дефазировке, так и к одновременной дефазировке и диссипации.

Отметим, что в литературе, в связи с сравнительной простотой, феноменологический подход используется в подавляющем большинстве случаев. Например, это имеет место при исследовании динамики квантовых точек [13], кубитов [42], атомов, взаимодействующих с модой резонатора [43, 44], квантового транспорта в биологических системах [9, 17], плазмонных структур [45] и т.д. В частности, в последнее время появились работы по квантовому транспорту, в которых утверждается, что взаимодействие с резервуаром может "чудесным" образом улучшить свойства квантового транспорта [7, 12, 13, 16–18, 46, 47]. В таких работах основное внимание уделяется динамике матрицы плотности, в то время как выполнение второго начала термодинамики практически никогда не проверяется. Иными словами, полученные с помощью феноменологического подхода результаты обладают неконтролируемой точностью. В ряде случаев можно доказать их ошибочность, в иных случаях различие результатов носит не качественный, а лишь количественный характер. К сожалению, изначально предсказать, с каким случаем мы имеем дело, довольно трудно.

Исследования были частично поддержаны грантом NSF № DMR-1312707, а также программой президиума РАН I.7 "Актуальные проблемы фотоники, зондирование неоднородных сред и материалов".

## Список литературы

- Weisskopf V, Wigner E Z. *Phys.* **63** 54 (1930)
- Ханин Я И *Основы динамики лазеров* (М.: Физматлит, 1999)
- Lamb W E (Jr.) *Phys. Rev.* **134** A1429 (1964)
- Gorini V, Kossakowski A, Sudarshan E C G *J. Math. Phys.* **17** 821 (1976)
- Lindblad G *Commun. Math. Phys.* **48** 119 (1976)
- Biggerstaff D N et al. *Nature Commun.* **7** 11282 (2016)
- Caruso F et al. *J. Chem. Phys.* **131** 09B612 (2009)
- Caruso F et al. *Nature Commun.* **7** 11682 (2016)
- Caruso F et al. *Phys. Rev. B* **85** 125424 (2012)
- Caruso F et al. *Phys. Rev. A* **83** 013811 (2011)
- Chin A W et al. *Nature Phys.* **9** 113 (2013)
- Cifuentes A A, Semião F L *Phys. Rev. A* **95** 062302 (2017)
- Contreras-Pulido L D et al. *New J. Phys.* **16** 113061 (2014)
- Feist J, Garcia-Vidal F J *Phys. Rev. Lett.* **114** 196402 (2015)
- Hartmann L, Dür W, Briegel H-J *Phys. Rev. A* **74** 052304 (2006)
- Kassal I, Aspuru-Guzik A *New J. Phys.* **14** 053041 (2012)
- Plenio M B, Huelga S F *New J. Phys.* **10** 113019 (2008)
- Rebentrost P et al. *New J. Phys.* **11** 033003 (2009)
- Vaziri A, Plenio M B *New J. Phys.* **12** 085001 (2010)
- Breuer H-P, Petruccione F *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford: Oxford Univ. Press, 2002); Пер. на русск. яз.: Бройер Х-П, Петруccione Ф *Теория открытых квантовых систем* (М.–Ижевск: Институт компьютер. исслед., РХД, 2010)
- Davies E B *Commun. Math. Phys.* **39** 91 (1974)
- Davies E B *Math. Ann.* **219** 147 (1976)
- Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М.: Наука, 1963); Пер. на англ. яз.: Landau L D, Lifshitz E M *Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory* (Oxford: Pergamon Press, 1977)
- Scully M O, Zubairy M S *Quantum Optics* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1997); Пер. на русск. яз.: Скалли М О, Зубайри М С *Квантовая оптика* (М.: Физматлит, 2002)
- Kubo R *J. Phys. Soc. Jpn.* **12** 570 (1957)
- Martin P C, Schwinger J *Phys. Rev.* **115** 1342 (1959)
- Spohn H, Lebowitz J L *Adv. Chem. Phys.* **38** 109 (1978)
- Kosloff R *Entropy* **15** 2100 (2013)
- Spohn H *Rev. Mod. Phys.* **52** 569 (1980)
- Carmichael H J *Statistical Methods in Quantum Optics 2. Non-Classical Fields* (New York: Springer, 2009)
- Alessi A, Salvalaggio M, Ruzzon G *J. Luminescence* **134** 385 (2013)
- Beija M, Afonso C A M, Martinho J M G *Chem. Soc. Rev.* **38** 2410 (2009)
- Noginov M A et al. *Nature* **460** 1110 (2009)
- Wuestner S et al. *Phys. Rev. Lett.* **105** 127401 (2010)
- Weiss U *Quantum Dissipative Systems* (Singapore: World Scientific, 2012)
- Siegman A E *Lasers* (Mill Valley, Calif.: Univ. Science Books, 1986)
- Карлов Н В *Лекции по квантовой электронике* (М.: Наука, 1988); Пер. на англ. яз.: Karlov N V *Lectures on Quantum Electronics* (Moscow: Mir Publ., 1993)
- Meystre P, Sargent M (III) *Elements of Quantum Optics* (Berlin: Springer, 2013)
- Mandel L, Wolf E *Optical Coherence and Quantum Optics* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1995); Пер. на русск. яз.: Мандель Л, Вольф Э *Оптическая когерентность и квантовая оптика* (М.: Физматлит, 2000)
- Chubchev E D et al. *J. Phys. B* **50** 175401 (2017)
- Szczygielski K, Gelbwaser-Klimovsky D, Alicki R *Phys. Rev. E* **87** 012120 (2013)
- Rivas A, Oxtoby N P, Huelga S F *Eur. Phys. J. B* **69** 51 (2009)
- Waks E, Sridharan D *Phys. Rev. A* **82** 043845 (2010)
- He Y, Li J-J, Zhu K-D *J. Opt. Soc. Am. B* **29** 997 (2012)
- Tasgin M E *Nanoscale* **5** 8616 (2013)
- Levi F et al. *Rep. Prog. Phys.* **78** 082001 (2015)
- Levy A, Kosloff R *Europhys. Lett.* **107** 20004 (2014)

## Relaxation of interacting open quantum systems

V.Yu. Shishkov<sup>(1,2,3,\*)</sup>, E.S. Andrianov<sup>(2,3,†)</sup>, A.A. Pukhov<sup>(1,2,3,‡)</sup>, A.P. Vinogradov<sup>(1,2,3,§)</sup>, A.A. Lisyansky<sup>(4,5,◊)</sup>

<sup>(1)</sup> Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics, Russian Academy of Sciences, ul. Izhorskaya 13, 125412 Moscow, Russian Federation

<sup>(2)</sup> Dukhov Research Institute of Automatics, ul. Sushchevskaya 22, 127055 Moscow, Russian Federation

<sup>(3)</sup> Moscow Institute of Physics and Technology (State University), Institutskii per. 9, 141700 Dolgoprudnyi, Moscow region, Russian Federation

<sup>(4)</sup> Department of Physics, Queens College of the City University of New York, Queens, New York 11367, USA

<sup>(5)</sup> The Graduate Center of the City University of New York, New York 10016, USA

E-mail: \*vladislavmipt@gmail.com, †andrianov.es@mipt.ru, ‡pukhov@mail.ru, §a-vinogr@yandex.ru, ◊lisyansky@qc.edu

We consider a transition from the description of a closed quantum system that includes an open quantum system and a reservoir to the description of an open quantum system alone by eliminating reservoir degrees of freedom by averaging over them. An approach based on the Lindblad master equation for the density matrix is used. A general scheme for deriving the Lindblad superoperator that emerges after averaging the von Neumann equation over the reservoir degrees of freedom is developed. This scheme is illustrated by the cases of radiation of a two-level atom into free space and the dynamics of the transition of a two-level atom from the pure state to the mixed state due to the interaction with a dephasing reservoir. Special attention is paid to the open system consisting of several subsystems each of which independently interacts with the reservoir. In the case of noninteracting subsystems, the density matrix is a tensor product of the subsystem density matrices, and the Lindblad superoperator of the system is a sum of Lindblad superoperators of those subsystems. The interaction between the subsystems results not only in the emergence of the corresponding term in the Hamiltonian of the combined system but also in non-additivity of the Lindblad superoperators. The latter is often overlooked in modern literature possibly leading, as it is shown in the present methodological note, to serious errors; for example, the second law of thermodynamics could be violated.

**Keywords:** open quantum systems, Lindblad master equation, second law of thermodynamics

PACS numbers: 03.65.Yz, **05.30.-d**

Bibliography — 47 references

*Uspekhi Fizicheskikh Nauk* **189** (5) 544–558 (2019)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.06.038359>

Received 19 February 2018, revised 16 April 2018

*Physics – Uspekhi* **62** (5) (2019)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2018.06.038359>