



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο  
Τομέας Φυσικής  
ΔΠΜΣ “Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές”

*Μεταπτυχιακή Εργασία*

---

Κβαντική αποσυννοχή λόγω της  
αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον

---

Ανδρέας Κουζέλης

Επιβλέπων καθηγητής: Γεώργιος Βαρελογιάννης

Αθήνα, Ιούνιος 2015





Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο  
Τομέας Φυσικής  
ΔΠΜΣ “Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές”

---

# Κβαντική αποσυνοχή λόγω της αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον

---

Μεταπτυχιακή Εργασία του  
Ανδρέα Κουζέλη

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή

.....

Αθήνα, Ιούνιος 2015



# Περίληψη

Στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία μελετάμε το φαινόμενο της αποσυνοχής (decoherence) στα ανοιχτά κβαντικά συστήματα που αλληλεπιδρούν με διάφορα περιβάλλοντα. Η αλληλεπίδραση αυτή οδηγεί στη σύμπλεξη του συστήματος με τους βαθμούς ελευθερίας του περιβάλλοντος, με αποτέλεσμα η συνοχή της κατάστασης του συστήματος να χάνεται τοπικά. Με άλλα λόγια, οι κβαντικές ιδιότητες του συστήματος χάνονται και το σύστημα γίνεται κλασικό. Αυτή η απώλεια φάσης είναι ο μεγαλύτερος εχθρός στις κβαντικές τεχνολογικές εφαρμογές, ιδιαίτερα στους κβαντικούς υπολογιστές όπου η συνοχή είναι αυτή που επιτρέπει οι υπολογισμοί να γίνονται “παράλληλα”, οπότε η καταπολέμηση της αποσυνοχής αποτελεί ένα σημαντικό κομμάτι της έρευνας.

Στο πρώτο κεφάλαιο της εργασίας αυτής δίνεται μια σύντομη εισαγωγή στις βασικές έννοιες και ιδέες της Κβαντομηχανικής που είναι απαραίτητες για την κατανόηση της θεωρίας της αποσυνοχής στα ανοιχτά κβαντικά συστήματα. Στο δεύτερο κεφάλαιο παρουσιάζεται το απλό και διαισθητικό μοντέλο της αποσυνοχής, το μοντέλο της σκέδασης διαφόρων σωματιδίων του περιβάλλοντος από το σύστημα. Στο τρίτο κεφάλαιο γίνεται μια εισαγωγή στον φορμαλισμό των εξισώσεων master που είναι απαραίτητος για την αποτελεσματική μελέτη των ανοιχτών κβαντικών συστημάτων. Στο τέταρτο κεφάλαιο παρουσιάζονται τα κανονικά μοντέλα της αποσυνοχής, όπως το μοντέλο της κβαντικής κίνησης Brown, τα μοντέλα σπιν-μποζόνιο και σπιν-σπιν, στα οποία μπορούν να αναχθούν τα περισσότερα μοντέλα. Τέλος, στο πέμπτο κεφάλαιο, παρουσιάζονται τρόποι καταπολέμησης της αποσυνοχής στους κβαντικούς υπολογιστές, όπως η κβαντική διόρθωση σφαλμάτων και κβαντικοί υπολογισμοί σε decoherence-free υποχώρους.



# Abstract

In the current M.Sc thesis we study the phenomenon of decoherence in open quantum systems which interact with different environments. This interaction leads to the entanglement of the system with environmental degrees of freedom, and as result, the coherence of the state of the system is locally lost. In other words, the quantum properties of the system are lost and the system becomes classical. This loss of coherence is one of the biggest enemies of quantum technological applications, especially in quantum computers where the quantum coherence is what allows for “parallel” computations, and thus fighting the decoherence is an important part of ongoing research.

In the first chapter of this thesis we give a short introduction to the basic concepts and ideas of Quantum Mechanics which are necessary for the understanding of the theory of decoherence in open quantum systems. In the second chapter we present the simple and intuitive model of decoherence, the scattering model for scattering of different environmental particles with the system. In the third chapter we introduce to the formalism of master equations which are necessary for an effective study of open quantum systems. In the fourth chapter we present the canonical models of decoherence, such as the model for quantum Brownian motion, spin-boson and spin-spin models, to which most of the models can be reduced. Finally, in the fifth chapter, we present ways of combating the decoherence in quantum computers, such as quantum error correction and quantum computations on decoherence-free subspaces.





# Περιεχόμενα

<b>Περίληψη</b>	<b>I</b>
<b>Abstract</b>	<b>III</b>
<b>1 Εισαγωγή</b>	<b>1</b>
1.1 Κβαντικές καταστάσεις . . . . .	1
1.1.1 Εναγκαλισμένες Καταστάσεις . . . . .	2
1.1.2 Μήτρα Πυκνότητας . . . . .	4
1.1.3 Ανηγγμένη μήτρα πυκνότητας . . . . .	6
1.2 Αναπαράσταση Wigner . . . . .	8
1.3 “Καθαρότητα” της κατάστασης . . . . .	9
1.4 Ιδανική κβαντική μέτρηση von Neumann . . . . .	10
1.5 “Μέτρηση” από το περιβάλλον – Αποσυνοχή . . . . .	11
1.5.1 Υπερεπιλογή της προτιμώμενης βάσης από το περιβάλλον . . . . .	13
<b>2 Αποσυνοχή λόγω της σκέδασης</b>	<b>15</b>
2.1 Το μοντέλο της σκέδασης . . . . .	15
2.1.1 Υπολογισμός του συντελεστή αποσυνοχής . . . . .	17
2.2 Δυο οριακές περιπτώσεις . . . . .	22
2.2.1 Το όριο των μικρών μηκών κύματος . . . . .	22
2.2.2 Το όριο των μεγάλων μηκών κύματος . . . . .	23
2.3 Παραδείγματα της αποσυνοχής λόγω σκέδασης . . . . .	25
2.3.1 Σκέδαση φωτονίων . . . . .	25
2.3.2 Σκέδαση μορίων του αέρα . . . . .	27
2.4 Δυναμική της αποσυνοχής . . . . .	29
<b>3 Φορμαλισμός των εξισώσεων master</b>	<b>39</b>
3.1 Δυναμική των ανοιχτών κβαντικών συστημάτων . . . . .	39
3.2 Μαρχοβιανές κβαντικές διαδικασίες . . . . .	40
3.2.1 Κβαντικές δυναμικές ημιομάδες . . . . .	41
3.2.2 Μαρχοβιανές εξισώσεις master σε μορφή Lindblad . . . . .	42
3.2.3 Προσέγγιση Born - Markov . . . . .	47
3.2.4 Εξαγωγή της εξίσωσης Born - Markov . . . . .	47
3.3 Μη-Μαρχοβιανές κβαντικές διαδικασίες . . . . .	53

<b>4</b>	<b>Κανονικά μοντέλα αποσυνοχής</b>	<b>55</b>
4.1	Μοντέλο χβαντικής κίνηση Brown . . . . .	56
4.1.1	Εξαγωγή της εξίσωσης Born - Markov για την χβαντική κίνηση Brown . . . . .	56
4.1.2	Κεντρικό σύστημα - αρμονικός ταλαντωτής . . . . .	59
4.1.3	Ωμική φασματική πυκνότητα . . . . .	62
4.1.4	Εξίσωση master στο όριο υψηλών θερμοκρασιών (Caldeira-Leggett) . . . . .	66
4.1.5	Δυναμική της χβαντικής κίνησης Brown . . . . .	68
4.2	Μοντέλο σπιν-μποζόνιο . . . . .	76
4.2.1	Απλοποιημένο μοντέλο σπιν-μποζόνιο . . . . .	77
4.2.2	Εξίσωση master Born-Markov για το μοντέλο σπιν-μποζόνιο . . . . .	85
4.3	Μοντέλα με σπιν-περιβάλλοντα . . . . .	89
4.3.1	Στατικό μοντέλο σπιν-σπιν . . . . .	89
4.3.2	Δυναμικό μοντέλο σπιν-σπιν . . . . .	92
<b>5</b>	<b>Καταπολέμηση της αποσυνοχής</b>	<b>101</b>
5.1	Σύντομη εισαγωγή στην Κβαντική Πληροφορική . . . . .	101
5.1.1	Στοιχειώδης μονάδα της χβαντικής πληροφορίας - qubit . . . . .	102
5.1.2	Κβαντικές πύλες . . . . .	103
5.1.3	Θεώρημα της μη αντιγραφής . . . . .	106
5.1.4	Η δύναμη των χβαντικών υπολογισμών . . . . .	106
5.2	Κβαντική διόρθωση σφαλμάτων . . . . .	108
5.2.1	Κλασική διόρθωσης σφαλμάτων έναντι της χβαντικής . . . . .	108
5.2.2	Διακριτοποίηση των χβαντικών σφαλμάτων . . . . .	109
5.2.3	Διόρθωση των σφαλμάτων λόγω της αποσυνοχής . . . . .	111
5.2.4	Αλγόριθμος τριών qubits για τη διόρθωση σφαλμάτων φάσης . . . . .	113
5.3	Κβαντικοί υπολογισμοί στους decoherence-free υποχώρους . . . . .	115
5.3.1	Συνθήκες για το DFS . . . . .	116
5.3.2	DFS για το μοντέλο σπιν-μποζόνιο . . . . .	118
	<b>Συμπεράσματα</b>	<b>121</b>

# 1

## Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται οι βασικές έννοιες και ιδέες πάνω στις οποίες στηρίζεται η θεωρία της κβαντικής αποσυνοχής: μικτές και καθαρές κβαντικές καταστάσεις, κβαντικός εναγκαλισμός, μήτρα πυκνότητας, ανηγμένη μήτρα πυκνότητας, εντροπία, διαδικασία της μέτρησης κατά von Neumann, προτιμώμενες καταστάσεις κ.α. Στην συνέχεια γίνεται μια εισαγωγή στην κβαντική αποσυνοχή λόγω της αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον.

### 1.1 Κβαντικές καταστάσεις

Στην Κβαντομηχανική η κατάσταση ενός συστήματος αναπαρίστανται με ένα διάνυσμα (ή “ket”) στον χώρο Hilbert. Τέτοια κατάσταση λέγεται *καθαρή κατάσταση* (pure state) και περιέχει τη μέγιστη δυνατή πληροφορία για το σύστημα. Ισχύει η αντιστοιχία:

$$\text{pure state} \leftrightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

Για την ακρίβεια, η καθαρή κατάσταση είναι σε ένα προς ένα αντιστοιχία με το  $\text{ray}(|\psi\rangle) = \{e^{ia}|\psi\rangle : a \in \mathbb{R}\}$ , όμως επειδή για πρακτικούς σκοπούς η ολική φάση δεν έχει φυσική σημασία, για την αναπαράσταση κάποιας καθαρής κατάστασης χρησιμοποιείται ένα οποιοδήποτε διάνυσμα του ray που αντιστοιχεί στην κατάσταση αυτή, και όχι ολόκληρο το ray.

Λόγω της γραμμικότητας του χώρου Hilbert, ο γραμμικός συνδυασμός κβαντικών καταστάσεων  $|\psi_n\rangle \in \mathcal{H}$  είναι επίσης μια κβαντική κατάσταση:

$$\mathcal{H} \ni |\Psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$$

όπου  $c_n$  είναι μιγαδικοί συντελεστές. Η κβαντική αυτή αρχή της υπέρθεσης βρίσκεται στην καρδιά της Κβαντομηχανικής και είναι αυτή που κατά κύριο λόγο διαφοροποιεί την Κβαντομηχανική από την Κλασική Φυσική.

### 1.1.1 Εναγκαλισμένες Καταστάσεις

Έστω ότι έχουμε δυο συστήματα  $\mathcal{A}$  και  $\mathcal{B}$  με χώρους Hilbert  $\mathcal{H}_A$  και  $\mathcal{H}_B$  αντίστοιχα, και έστω  $\{|\psi_i\rangle_A\}$  είναι μια βάση του  $\mathcal{H}_A$  και  $\{|\phi_j\rangle_B\}$  του  $\mathcal{H}_B$ . Τότε ο χώρος Hilbert του σύνθετου συστήματος  $\mathcal{AB}$  είναι  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ , με μια βάση την  $\{|\psi_i\rangle_A|\phi_j\rangle_B\}$ . Η γενική έκφραση της καθαρής κατάστασης ενός τέτοιου διμερούς συστήματος είναι:

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{i,j} c_{ij} |\psi_i\rangle_A |\phi_j\rangle_B \quad (1.1)$$

Αν οι συντελεστές  $c_{ij}$  είναι διαχωρίσιμοι, δηλαδή  $c_{ij} = c_i^A c_j^B$ , τότε:

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{i,j} c_{ij} |\psi_i\rangle_A |\phi_j\rangle_B = \sum_i c_i^A |\psi_i\rangle_A \sum_j c_j^B |\phi_j\rangle_B = |\Psi\rangle_A |\Phi\rangle_B$$

Αυτό σημαίνει ότι η κατάσταση  $|\Psi\rangle_{AB}$  είναι μια *διαχωρίσιμη κατάσταση*, δηλαδή μπορεί να γραφτεί ως τανυστικό γινόμενο δύο άλλων καταστάσεων. Διαφορετικά, αν  $c_{ij} \neq c_i^A c_j^B$ , η κατάσταση  $|\Psi\rangle_{AB}$  είναι μη διαχωρίσιμη και λέγεται *εναγκαλισμένη κατάσταση* (entangled state).

Αποδεικνύεται ότι πάντα υπάρχουν ορθοκανονικές βάσεις  $|u_i\rangle \in \mathcal{H}_A$  και  $|v_i\rangle \in \mathcal{H}_B$ , τέτοιες ώστε:

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_i^n \lambda_i |u_i\rangle_A |v_i\rangle_B$$

όπου  $n = \min\{\dim(\mathcal{H}_A), \dim(\mathcal{H}_B)\}$  και  $\mathbb{R} \ni \lambda_i \geq 0, \sum_i \lambda_i = 1$ . Αυτό το “διαγώνιο” ανάπτυγμα ονομάζεται *ανάπτυγμα Schmidt* και  $\lambda_i$  *συντελεστές Schmidt*. Το ανάπτυγμα αυτό είναι μοναδικό αν όλοι οι συντελεστές  $\lambda_i$  είναι διαφορετικοί μεταξύ τους. Αν όλοι οι συντελεστές Schmidt είναι ίσοι μεταξύ τους, αλλά διάφοροι του μηδενός, έχουμε μια *κατάσταση μέγιστου εναγκαλισμού* (maximally entangled state). Ο αριθμός των μη μηδενικών συντελεστών Schmidt, γνωστός ως *αριθμός Schmidt*, αποτελεί ένα κριτήριο για το αν η κατάσταση είναι εναγκαλισμένη ή όχι: αν ο αριθμός Schmidt είναι μεγαλύτερος της μονάδας, η κατάσταση είναι μη-διαχωρίσιμη (εναγκαλισμένη), ενώ αν ο αριθμός αυτός είναι ίσος με τη μονάδα, η κατάσταση είναι διαχωρίσιμη (μη εναγκαλισμένη).

Το ενδιαφέρον με τις εναγκαλισμένες καταστάσεις είναι ότι ανάμεσα στα υποσυστήματα του σύνθετου συστήματος υπάρχουν *χβαντικοί συσχετισμοί*, ακόμα και όταν αυτά τα υποσυστήματα βρίσκονται πολύ μακριά το ένα από το άλλο. Αν ένας παρατηρητής εκτελέσει κάποια (τοπική) μέτρηση στο υποσύστημα  $\mathcal{A}$ , τότε, προφανώς, η κατάσταση του υποσυστήματος αυτού γίνεται καθορισμένη (κάποια ιδιοκατάσταση του τελεστή του φυσικού μεγέθους που μέτρησε). Επιπλέον όμως, η κατάσταση του υποσυστήματος  $\mathcal{B}$  γίνεται επίσης καθορισμένη (ως προς τον παρατηρητή  $\mathcal{A}$ ), χωρίς να εκτελείται καμία μέτρηση σε αυτό.

Για να δούμε πως οι χβαντικοί συσχετισμοί διαφέρουν από τους κλασσικούς, θεωρούμε ένα σύστημα δύο σωματιδίων με σπιν 1/2 το καθένα και ολικό σπιν 0, γνωστό ως σύστημα EPR (Einstein-Podolsky-Rosen). Ένα τέτοιο σύστημα προκύπτει πχ. από διάσπαση ενός σωματιδίου με σπιν 0 σε δύο άλλα, με σπιν 1/2 το καθένα. Λόγω της διατήρησης της στροφορμής, η κατάσταση του συστήματος των δυο σωματιδίων που δημιουργούνται θα είναι μια spin singlet:

$$|\Psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B)$$

Το αξιοπερίεργο είναι ότι οι καταστάσεις  $|\uparrow\rangle$  και  $|\downarrow\rangle$ , σπιν “πάνω” και “κάτω” αντίστοιχα, δεν αναφέρονται σε κάποιον συγκεκριμένο άξονα, αλλά σε έναν οποιονδήποτε άξονα (όμως θεωρούμε ότι ο άξονας αυτός, ως προς τον οποίο μετράμε το σπιν, είναι ίδιος και για τα δύο σωματίδια). Αυτό οφείλεται στο ότι η κατάσταση μηδενικού ολικού σπιν έχει πλήρη περιστροφική συμμετρία. Η απόδειξη για αυτό είναι η εξής: Ο προσανατολισμός του αυθαίρετου άξονα, ως προς τον οποίο αναφέρονται τα διανύσματα  $|\uparrow\rangle$  και  $|\downarrow\rangle$ , καθορίζεται από τις συνήθεις σφαιρικές συντεταγμένες  $\theta$  και  $\phi$ :

$$|\uparrow\rangle_{A,B} = \cos(\theta/2)|\uparrow_z\rangle_{A,B} + \sin(\theta/2)e^{+i\phi}|\downarrow_z\rangle_{A,B}$$

$$|\downarrow\rangle_{A,B} = \sin(\theta/2)e^{-i\phi}|\uparrow_z\rangle_{A,B} - \cos(\theta/2)|\downarrow_z\rangle_{A,B}$$

Επομένως

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B &= [\cos(\theta/2)|\uparrow_z\rangle_A + \sin(\theta/2)e^{+i\phi}|\downarrow_z\rangle_A] [\sin(\theta/2)e^{-i\phi}|\uparrow_z\rangle_B - \cos(\theta/2)|\downarrow_z\rangle_B] \\ &= \cos(\theta/2)\sin(\theta/2)e^{-i\phi}|\uparrow_z\rangle_A |\uparrow_z\rangle_B - \cos(\theta/2)^2|\uparrow_z\rangle_A |\downarrow_z\rangle_B + \\ &+ \sin(\theta/2)^2|\downarrow_z\rangle_A |\uparrow_z\rangle_B - \cos(\theta/2)\sin(\theta/2)e^{+i\phi}|\downarrow_z\rangle_A |\downarrow_z\rangle_B \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B &= [\sin(\theta/2)e^{-i\phi}|\uparrow_z\rangle_A - \cos(\theta/2)|\downarrow_z\rangle_A] [\cos(\theta/2)|\uparrow_z\rangle_B + \sin(\theta/2)e^{+i\phi}|\downarrow_z\rangle_B] \\ &= \cos(\theta/2)\sin(\theta/2)e^{-i\phi}|\uparrow_z\rangle_A |\uparrow_z\rangle_B + \sin(\theta/2)^2|\uparrow_z\rangle_A |\downarrow_z\rangle_B - \\ &- \cos(\theta/2)^2|\downarrow_z\rangle_A |\uparrow_z\rangle_B - \cos(\theta/2)\sin(\theta/2)e^{+i\phi}|\downarrow_z\rangle_A |\downarrow_z\rangle_B \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |\Psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle_A |\downarrow_z\rangle_B - |\downarrow_z\rangle_A |\uparrow_z\rangle_B)$$

Το συμπέρασμα λοιπόν είναι ότι, επειδή η πιθανότητα να βρούμε σπιν “πάνω” ή “κάτω” σε μια μέτρηση του σπιν του ενός σωματιδίου ως προς οποιαδήποτε διεύθυνση είναι πάντα 1/2, δεν υπάρχει καθαρή (μονοσωματιδιακή) κυματοσυνάρτηση που να περιγράφει το σωματίδιο αυτό χωριστά.

Εν γένει, δεν υπάρχει χωριστή κατάσταση για ένα υποσύστημα ενός σύνθετου συστήματος. Τα υποσυστήματα που είναι εναγκαλισμένα το ένα με το άλλο δεν έχουν καταστάσεις που είναι ανεξάρτητες από το υπόλοιπο του συστήματος.

Πως μπορούμε να ορίσουμε τον βαθμό της σύμπλεξης δυο συστημάτων; Ας θεωρήσουμε μια διμερή εναγκαλισμένη κατάσταση της μορφής:

$$|\Psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle_A |\phi_1\rangle_B \pm |\psi_2\rangle_A |\phi_2\rangle_B)$$

Υποθέτουμε ότι έχουμε πρόσβαση μόνο στο ένα υποσύστημα, έστω  $\mathcal{A}$ . Αν οι σχετικές καταστάσεις  $|\phi_1\rangle_B$  και  $|\phi_2\rangle_B$  του  $\mathcal{B}$  είναι πλήρως διαχωρίσιμες, δηλαδή δεν υπερκαλύπτονται μεταξύ τους ( $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$ ), η μέτρηση στο υποσύστημα  $\mathcal{A}$  μας λέει αμέσως σε ποια κατάσταση θα είναι το  $\mathcal{B}$ . Στην περίπτωση αυτή, η κατάσταση  $|\Psi\rangle_{AB}$  είναι κατάσταση μέγιστου εναγκαλισμού. Στην άλλη οριακή περίπτωση, που οι σχετικές καταστάσεις  $|\phi_1\rangle_B$  και  $|\phi_2\rangle_B$  του  $\mathcal{B}$  είναι πλήρως μη-διαχωρίσιμες, δηλαδή  $|\phi_1\rangle_B = |\phi_2\rangle_B \equiv |\phi\rangle_B$ , η κατάσταση  $|\Psi\rangle_{AB}$  μπορεί να γραφτεί ως ένα product state:

$$|\Psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle_A \pm |\psi_2\rangle_A)|\phi\rangle_B$$

Όπως είδαμε στην αρχή, μια τέτοια κατάσταση δεν είναι εναγκαλισμένη. Ανάμεσα στις δυο οριακές περιπτώσεις αυτές, είναι δυνατόν να υπάρχουν διάφοροι βαθμοί υπερκάλυψης των σχετικών καταστάσεων  $|\phi_1\rangle_{\mathcal{B}}$  και  $|\phi_2\rangle_{\mathcal{B}}$  του  $\mathcal{B}$ , και επομένως να υπάρχουν διάφοροι βαθμοί εναγκαλισμού των  $\mathcal{A}$  και  $\mathcal{B}$ . Θα δούμε στα επόμενα πως ακριβώς γίνεται η ποσοτικοποίηση του εναγκαλισμού, εισάγοντας την έννοια της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας και της εντροπίας von Neumann.

### 1.1.2 Μήτρα Πυκνότητας

Υπάρχουν περιπτώσεις που δεν γνωρίζουμε σε ποια ακριβώς καθαρή κατάσταση βρίσκεται το σύστημα (υποκειμενική άγνοια), με αποτέλεσμα η περιγραφή του να μην μπορεί να γίνει με ένα διάνυσμα στον χώρο Hilbert. Αυτό που γνωρίζουμε για ένα τέτοιο σύστημα είναι η πιθανότητα  $p_1$  να βρίσκεται στην κατάσταση  $|\psi_1\rangle$ ,  $p_2$  στην  $|\psi_2\rangle$  και ούτω καθεξής. Επομένως, για πρακτικούς σκοπούς, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι έχουμε μια στατιστική συλλογή (statistical ensemble) πανομοιότυπων αντιγράφων του συστήματος, με το κάθε αντίγραφο να αναπαριστά τη δυνατή κατάσταση του πραγματικού συστήματος. Με άλλα λόγια, θεωρούμε μια κατανομή πιθανότητας για την κατάσταση του συστήματος,  $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ . Στην περίπτωση αυτή, η κατάσταση του συστήματος λέγεται *μικτή κατάσταση* (mixed state) και η περιγραφή του γίνεται με μια *μήτρα πυκνότητας* που ορίζεται ως:

$$\hat{\rho} \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (1.2)$$

$$\sum_i p_i = 1, \quad p_i \geq 0$$

Γενικά, κάθε τελεστής που είναι θετικά ημιορισμένος ( $\langle u|\hat{\rho}|u\rangle \geq 0, \forall u \in \mathcal{H}$ ), ερμιτιανός ( $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$ ) και έχει ίχνος 1 ( $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$ , ανεξαρτήτως της βάσης), λέγεται *μήτρα πυκνότητας*.

Αν υποθέσουμε ότι η χρονική εξέλιξη ενός κλειστού συστήματος δίνεται από τον μοναδιακό τελεστή  $\hat{U}$ , τότε η αρχική κατάσταση του συστήματος  $|\psi_i\rangle$  εξελίσσεται σε  $\hat{U}|\psi_i\rangle$ . Επομένως, η χρονική εξέλιξη της μήτρας πυκνότητας δίνεται από τη σχέση:

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \rightarrow \sum_i p_i \hat{U}|\psi_i\rangle \langle \psi_i| \hat{U}^\dagger = \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger$$

Η μήτρα πυκνότητας μιας καθαρής κατάστασης  $|\psi\rangle$  είναι απλώς ο προβολικός τελεστής στην κατεύθυνση του διανύσματος αυτού:

$$\hat{\rho}_p = |\psi\rangle \langle \psi|$$

Το  $\hat{\rho}_p$  ως προβολικός τελεστής ικανοποιεί τη σχέση:

$$\hat{\rho}_p^2 = \hat{\rho}_p$$

Οπότε

$$\text{Tr} (\hat{\rho}_p^2) = \text{Tr} (\hat{\rho}_p) = 1$$

Αποδεικνύεται ([24, σελ. 216]) ότι για μια μικτή κατάσταση ισχύει:

$$\text{Tr} (\hat{\rho}_m^2) < 1$$

που σημαίνει ότι  $\hat{\rho}_m^2 \neq \hat{\rho}_m$ , δηλαδή η μήτρα πυκνότητας μιας μικτής κατάστασης δεν είναι προβολικός τελεστής. Οπότε το ίχνος του  $\hat{\rho}^2$  αποτελεί ένα καλό κριτήριο για το αν η κατάσταση είναι καθαρή ( $= 1$ ) ή μικτή ( $< 1$ ).

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει η διαφορά μιας μικτής κατάστασης που έχει μήτρα πυκνότητας της μορφής:

$$\hat{\rho}_m = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

από μια καθαρή κατάσταση υπέρθεσης  $|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |\psi_i\rangle$ , η μήτρα πυκνότητας της οποίας είναι:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_p &= |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| + \sum_{i \neq j} \sqrt{p_i p_j} |\psi_i\rangle \langle \psi_j| \\ &= \hat{\rho}_m + \sum_{i \neq j} \sqrt{p_i p_j} |\psi_i\rangle \langle \psi_j| \end{aligned}$$

Η διαφορά μεταξύ των  $\hat{\rho}_m$  και  $\hat{\rho}_p$  είναι εμφανής: η  $\hat{\rho}_p$  δεν είναι διαγώνια στη βάση  $\{|\psi_i\rangle\}$ , και οι μη-διαγώνιοι όροι, γνωστοί ως όροι συμβολής, είναι υπεύθυνοι για τα φαινόμενα συμβολής. Παρόλο που υπάρχει αυτή η θεμελιώδης διαφορά, οι μετρήσεις στη βάση  $\{|\psi_i\rangle\}$  δεν είναι ικανές να διακρίνουν τις δύο περιπτώσεις, καθώς οι πιθανότητες εμφάνισης των επιμέρους καταστάσεων  $|\psi_i\rangle$  είναι  $p_i$  και στις δύο περιπτώσεις. Αλλά, τουλάχιστον θεωρητικά, είναι δυνατών να εκτελεστούν πειράματα συμβολής που να διακρίνουν τις δυο περιπτώσεις αυτές.

Γνωρίζοντας τη μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}$  ενός συστήματος, η μέση τιμή ενός οποιοδήποτε φυσικού μεγέθους  $\hat{O}$  υπολογίζεται ως εξής:

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{O} | \psi_i \rangle = \sum_{i,j} p_j \underbrace{\langle \psi_i | \psi_j \rangle}_{\delta_{ij}} \langle \psi_j | \hat{O} | \psi_i \rangle = \sum_i \langle \psi_i | \hat{\rho} \hat{O} | \psi_i \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{O}) \quad (1.3)$$

Τέλος να σημειώσουμε ότι μια μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$  μικτής κατάστασης ερμηνεύεται ως κλασική κατανομή πιθανότητας καθαρών καταστάσεων  $|\psi_i\rangle$  μόνο όταν γνωρίζουμε από πριν ότι το σύστημα έχει προετοιμαστεί σε μια από τις καταστάσεις  $|\psi_i\rangle$  (χωρίς βέβαια να γνωρίζουμε σε ποια ακριβώς). Ο λόγος για αυτό είναι ότι μια μήτρα πυκνότητας μπορεί να εκφραστεί με πολλούς τρόπους, που σημαίνει ότι, εν γένει, από μόνη της δεν περιέχει την πληροφορία για το σε ποιο σύνολο καταστάσεων έχει προετοιμαστεί το σύστημα. Αποδεικνύεται ότι:

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \sum_i q_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|$$

αν και μόνο αν

$$\sqrt{p_i} |\psi_i\rangle = \sum_j u_{ij} \sqrt{q_j} |\phi_j\rangle$$

όπου  $u_{ij}$  είναι μοναδιαίος πίνακας. Δηλαδή τα σύνολα των διανυσμάτων  $\{|\psi_i\rangle\}$  και  $\{|\phi_i\rangle\}$  παράγουν την ίδια μήτρα πυκνότητας. Για παράδειγμα,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (|0_z\rangle \langle 0_z| + |1_z\rangle \langle 1_z|) = \frac{1}{2} (|0_x\rangle \langle 0_x| + |1_x\rangle \langle 1_x|)$$

καθώς  $|0_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_x\rangle + |1_x\rangle)$  και  $|1_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_x\rangle - |1_x\rangle)$ . Επομένως, αν δεν γνωρίζουμε από πριν ως προς ποιον άξονα έχει προετοιμαστεί το σπιν του συστήματος, η μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}$  περιέχει μόνο την πληροφορία για τις πιθανότητες των καθαρών καταστάσεων των διαφόρων συνόλων ( $\{|0_z\rangle, |1_z\rangle\}$ ,  $\{|0_x\rangle, |1_x\rangle\}$  κτλ.), αλλά δεν μας λέει σε ποιο συγκεκριμένο σύνολο καταστάσεων έχει προετοιμαστεί.

### 1.1.3 Ανηγγεμένη μήτρα πυκνότητας

Θεωρούμε ένα διμερές σύστημα  $\mathcal{AB}$  που βρίσκεται στην εναγκαλισμένη κατάσταση:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle|b_1\rangle + |a_2\rangle|b_2\rangle)$$

όπου  $|a_i\rangle \in \mathcal{H}_A$  και  $|b_i\rangle \in \mathcal{H}_B$ ,  $i = 1, 2$ , είναι κανονικοποιημένες, αλλά όχι απαραίτητα ορθογώνιες, καταστάσεις των υποσυστημάτων  $\mathcal{A}$  και  $\mathcal{B}$  αντίστοιχα. Η μήτρα πυκνότητας του σύνθετου συστήματος είναι:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}(|a_1\rangle|b_1\rangle + |a_2\rangle|b_2\rangle)(\langle a_1|\langle b_1| + \langle a_2|\langle b_2|) = \frac{1}{2}\sum_{i,j}^2 |a_i\rangle\langle a_j| \otimes |b_i\rangle\langle b_j| \quad (1.4)$$

Υποθέτουμε ότι έχουμε πρόσβαση μόνο στο υποσύστημα  $\mathcal{A}$ , δηλαδή μπορούμε να εκτελούμε τοπικές μετρήσεις μόνο στο  $\mathcal{A}$  και όχι στο  $\mathcal{B}$ . Το κατάλληλο μαθηματικό αντικείμενο που περιγράφει τη στατιστική των μετρήσεων στο υποσύστημα  $\mathcal{A}$  είναι η *ανηγμένη μήτρα πυκνότητας* (reduced density matrix) του  $\mathcal{A}$  και ορίζεται ως:

$$\hat{\rho}_A \equiv \text{Tr}_B(\hat{\rho})$$

όπου  $\text{Tr}_B$  είναι το μερικό ίχνος ως προς  $\mathcal{B}$ :

$$\text{Tr}_B : \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_A)$$

$$\text{Tr}_B(\hat{O}_A \otimes \hat{O}_B) = \hat{O}_A \text{Tr}(\hat{O}_B), \quad \forall \hat{O}_A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A), \quad \forall \hat{O}_B \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_B)$$

όπου  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  είναι ο χώρος των γραμμικών τελεστών στον  $\mathcal{H}$ .

Ένα φυσικό παρατηρήσιμο μέγεθος (observable)  $\hat{O}_A$  του υποσυστήματος  $\mathcal{A}$  μόνο, μπορεί να γραφτεί ως  $\hat{O} = \hat{O}_A \otimes \hat{I}_B$ , δηλαδή ως φυσικό μέγεθος του σύνθετου συστήματος  $\mathcal{AB}$ . Η μέση τιμή του  $\hat{O}$  υπολογίζεται από τη σχέση (1.3):

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{O}) = \sum_{k\ell} \langle \phi_\ell | \langle \psi_k | \hat{\rho} (\hat{O}_A \otimes \hat{I}_B) | \psi_k \rangle | \phi_\ell \rangle \\ &= \sum_k \langle \psi_k | \left( \sum_\ell \langle \phi_\ell | \hat{\rho} | \phi_\ell \rangle \right) \hat{O}_A | \psi_k \rangle = \sum_k \langle \psi_k | (\text{Tr}_B \hat{\rho}) \hat{O}_A | \psi_k \rangle \\ &= \sum_k \langle \psi_k | \hat{\rho}_A \hat{O}_A | \psi_k \rangle = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A \hat{O}_A) \end{aligned}$$

όπου  $\{|\psi_i\rangle\}$  και  $\{|\phi_i\rangle\}$  είναι ορθοκανονικές βάσεις των  $\mathcal{H}_A$  και  $\mathcal{H}_B$  αντίστοιχα.



Τα παραπάνω αποτελέσματα γενικεύονται από εναγκαλισμένες καταστάσεις δύο υποσυστημάτων σε οποιαδήποτε κατάσταση εναγκαλισμού  $N$  υποσυστημάτων. Ένα φυσικό μέγεθος  $\hat{O}_i$  του υποσυστήματος  $i$  γράφεται ως

$$\hat{O} = \hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{I}_{i-1} \otimes \hat{O}_i \otimes \hat{I}_{i+1} \otimes \cdots \otimes \hat{I}_N$$

και η αναμενόμενη τιμή του είναι

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{O}) = \text{Tr}_i(\hat{\rho}_i \hat{O}_i)$$

όπου η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας του  $i$  υποσυστήματος είναι

$$\hat{\rho}_i = \text{Tr}_{1, \dots, i-1, i+1, \dots, N}(\hat{\rho})$$

Για να βρούμε την ανηγμένη μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}_A$  που αντιστοιχεί στην (1.4), θεωρούμε μια ορθοκανονική βάση  $\{|\phi_\ell\rangle\}$  του  $\mathcal{H}_B$  και εκφράζουμε τις καταστάσεις  $|b_i\rangle$  του υποσυστήματος  $B$  στη βάση αυτή:

$$|b_i\rangle = \sum_{\ell=1}^2 c_\ell^{(i)} |\phi_\ell\rangle$$

Επομένως

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}_B \left( \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \langle a_j| \otimes |b_i\rangle \langle b_j| \right) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \langle a_j| \text{Tr}(|b_i\rangle \langle b_j|) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \langle a_j| \sum_k \langle \phi_k| \left[ \sum_{\ell\ell'} c_\ell^{(i)} (c_{\ell'}^{(j)})^* |\phi_\ell\rangle \langle \phi_{\ell'}| \right] |\phi_k\rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \langle a_j| \sum_k c_k^{(i)} (c_k^{(j)})^* = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \langle a_j| \langle b_j| b_i\rangle \\ &= \frac{1}{2} \left( |a_1\rangle \langle a_1| + |a_2\rangle \langle a_2| + \langle b_2| b_1\rangle |a_1\rangle \langle a_2| + \langle b_1| b_2\rangle |a_2\rangle \langle a_1| \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 |a_i\rangle \langle a_j| \langle b_j| b_i\rangle \end{aligned}$$

Το αποτέλεσμα αυτό μπορεί να γενικευτεί για ένα σύνθετο σύστημα  $AB$  που περιγράφεται από μια πιο γενική κατάσταση με  $N$  συνιστώσες,  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N |a_n\rangle |b_n\rangle$ :

$$\rho_A = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N |a_i\rangle \langle a_j| \langle b_j| b_i\rangle \quad (1.5)$$

Βλέπουμε ότι το υποσύστημα  $B$  έχει μια επίδραση στην κατάσταση του υποσυστήματος  $A$ , η οποία εξαρτάται από τον βαθμό της υπερκάλυψης  $\langle b_i| b_j\rangle$  των σχετικών καταστάσεων  $|b_i\rangle$  του  $B$ , που είναι ένα-προς-ένα συσχετισμένες με τις καταστάσεις  $|a_i\rangle$  του  $A$ . Οι μη-διαγώνιοι όροι της  $\rho_A$  αντιστοιχούν στη συμβολή ανάμεσα στις καταστάσεις  $|a_i\rangle$  και

$|a_j\rangle$  που μπορεί να παρατηρηθεί με ειδικές μετρήσεις στο  $\mathcal{A}$ , και η υπερκάλυψη  $\langle b_i | b_j \rangle$  ποσοτικοποιεί τον βαθμό της συμβολής στη βάση  $\{|a_i\rangle\}$ .

Η ομοιότητα μεταξύ της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας σε διαγώνια μορφή:

$$\hat{\rho}_{\mathcal{A}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |a_i\rangle \langle a_i| \quad (1.6)$$

(η οποία προκύπτει από την (1.5) για μηδενική υπερκάλυψη μεταξύ των καταστάσεων  $|b_i\rangle$  του υποσυστήματος  $\mathcal{B}$ , δηλαδή  $\langle b_j | b_i \rangle = 0$  για  $i \neq j$ ), με τη μήτρα πυκνότητας μικτής κατάστασης (1.2), συνεπάγεται ότι οι τοπικές μετρήσεις στο  $\mathcal{A}$  δεν μπορούν να διακρίνουν τις δύο περιπτώσεις αυτές (καθαρή vs. μικτή). Ωστόσο υπάρχει μια θεμελιώδεις διαφορά ανάμεσα στις πραγματικές μικτές καταστάσεις και τις μη-πραγματικές (improper) της μορφής (1.6): Όταν το σύστημα  $\mathcal{A}$  “βρίσκεται” στην πραγματική μικτή κατάσταση, σημαίνει ότι αυτό βρίσκεται σε μια καλά καθορισμένη καθαρή κατάσταση, απλά εμείς δεν γνωρίζουμε σε ποια ακριβώς, από ένα σύνολο των δυνατών καθαρών καταστάσεων, βρίσκεται (υποκειμενική άγνοια). Από την άλλη, όταν το σύστημα  $\mathcal{A}$  βρίσκεται σε σύμπλεξη με ένα άλλο σύστημα  $\mathcal{B}$ , παρόλο που η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας του (1.6) είναι πανομοιότυπη με τη μήτρα πυκνότητας μικτής κατάστασης, δεν υπάρχει καθαρή κατάσταση που μπορεί να αποδοθεί στο  $\mathcal{A}$  χωριστά (αν και το σύνθετο σύστημα  $\mathcal{AB}$  βρίσκεται σε καθαρή κατάσταση). Εξ άλλου, δεν πρέπει να ξεχνάμε ότι οι μήτρες πυκνότητας είναι απλώς υπολογιστικά εργαλεία για υπολογισμό πιθανοτήτων διάφορων δυνατών αποτελεσμάτων των μετρήσεων και ότι δεν προσδιορίζουν την κατάσταση του συστήματος.

## 1.2 Αναπαράσταση Wigner

Η αναπαράσταση Wigner χρησιμοποιείται ως μια εναλλακτική στη μήτρα πυκνότητας για συστήματα που περιγράφονται από συνεχείς μεταβλητές. Συνήθως τέτοια μεταβλητή είναι η θέση  $x$  του συστήματος και η συνάρτηση Wigner για τη μήτρα πυκνότητας του συστήματος, που στην αναπαράσταση θέσης είναι  $\rho(x, x') \equiv \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle$ , ορίζεται ως:

$$W(x, p) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{ipy} \rho(x + y/2, x - y/2) \quad (1.7)$$

όπου  $p$  είναι η ορμή του συστήματος (ή πιο γενικά, συζυγής μεταβλητή της  $x$ ).

Η συνάρτηση Wigner μοιάζει με την κλασική κατανομή πιθανότητας στον χώρο των φάσεων, καθώς:

$$P(x) = \rho(x, x) = \int dp W(x, p)$$

$$P(p) = \tilde{\rho}(p, p) = \int dx W(x, p)$$

με  $\int dx \int dp W(x, p) = \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ . Όμως η συνάρτηση Wigner εν γένει θα παίρνει αρνητικές τιμές σε κάποιες περιοχές, κάτι που δείχνει ότι δεν μπορεί να ερμηνευτεί με αυτόν τον τρόπο. Αυτό είναι αναμενόμενο λόγω της αρχής της αβεβαιότητας που απαγορεύει τον ταυτόχρονο προσδιορισμό της θέσης και της ορμής με αυθαίρετη ακρίβεια, και επομένως μια πραγματική κβαντική κατανομή πιθανότητας στον χώρο των φάσεων δεν μπορεί να υφίσταται.

### 1.3 “Καθαρότητα” της κατάστασης

Στα προηγούμενα είδαμε τη διαφορά ανάμεσα στην καθαρή και μίχτη κατάσταση. Θα θέλαμε τώρα να ποσοτικοποιήσουμε την απόκλιση της μίχτης κατάστασης από την καθαρή. Ορίζουμε για τον σκοπό αυτό την *εντροπία von Neumann*:

$$S(\hat{\rho}) \equiv -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$$

όπου  $\hat{\rho}$  είναι η μήτρα πυκνότητας του συστήματος. Στη βάση  $\{|i\rangle\}$  στην οποία η μήτρα πυκνότητας είναι διαγώνια:

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |i\rangle \langle i|$$

όπου  $p_i$  είναι οι ιδιοτιμές της, η εντροπία von Neumann γίνεται:

$$S(\hat{\rho}) = -\sum_i p_i \ln p_i$$

Αν η κατάσταση είναι καθαρή,  $\hat{\rho} = \hat{\rho}^2$ , η εντροπία είναι μηδέν:

$$S(\hat{\rho}) = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}^2) = 2S(\hat{\rho}) \Rightarrow S(\hat{\rho}) = 0$$

Η εντροπία γίνεται μέγιστη όταν  $p_i = 1/N, \forall i$ , όπου  $N$  είναι η διάσταση του χώρου Hilbert, δηλαδή όταν όλες οι δυνατές καταστάσεις είναι ισοπίθανες:

$$S_{max} = -\sum_i \frac{1}{N} \ln \frac{1}{N} = \ln N$$

Εν γένει, αν  $\hat{\rho}$  είναι προβολικός τελεστής στον υπόχωρο διάστασης  $n$ , θα είναι:

$$S = \ln n$$

Επομένως βλέπουμε ότι η εντροπία von Neumann μετρά τον αριθμό των καταστάσεων οι οποίες έχουν μη μηδενική πιθανότητα στη στατιστική συλλογή.

Στην περίπτωση που έχουμε ένα σύνθετο σύστημα  $\mathcal{AB}$  με μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}_{\mathcal{AB}}$ , αποδεικνύεται ότι ισχύει η παρακάτω ανισότητα:

$$0 \leq S(\hat{\rho}_{\mathcal{AB}}) \leq S(\hat{\rho}_{\mathcal{A}}) + S(\hat{\rho}_{\mathcal{B}})$$

όπου  $\hat{\rho}_{\mathcal{A}}$  και  $\hat{\rho}_{\mathcal{B}}$  είναι οι ανηγμένες μήτρες πυκνότητας των υποσυστημάτων  $\mathcal{A}$  και  $\mathcal{B}$  αντίστοιχα. Βλέπουμε ότι σε αντίθεση με την κλασική θεωρία, η εντροπία von Neumann ενός σύνθετου συστήματος μπορεί να είναι μικρότερη από το άθροισμα των εντροπιών των μερών του. Μάλιστα στην περίπτωση που το σύνθετο σύστημα  $\mathcal{AB}$  είναι στην καθαρή εναγκαλισμένη κατάσταση, θα είναι  $S(\hat{\rho}_{\mathcal{AB}}) = 0$  και  $S(\hat{\rho}_{\mathcal{A}}) = S(\hat{\rho}_{\mathcal{B}}) > 0$ . Αυτό οφείλεται στο ότι τα υποσυστήματα  $\mathcal{A}$  και  $\mathcal{B}$  είναι εναγκαλισμένα και επομένως το καθένα χωριστά περιγράφεται από μια ανηγμένη μήτρα πυκνότητας που είναι πανομοιότυπη με μήτρα πυκνότητας μιας μίχτης κατάστασης.

Ένας άλλος τρόπος ποσοτικοποίησης της “καθαρότητας” μιας κατάστασης είναι η λεγόμενη *καθαρότητα* (purity) της μήτρας πυκνότητας, που ορίζεται ως:

$$\varsigma \equiv \text{Tr}(\hat{\rho}^2)$$

Αν η κατάσταση είναι καθαρή,  $\hat{\rho} = \hat{\rho}^2$ , τότε  $\varsigma = \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ . Από την άλλη, η μικτή κατάσταση (1.2), υποθέτοντας ότι οι καταστάσεις  $\{|\psi_i\rangle\}$  αποτελούν μια ορθοκανονική βάση του  $N$ -διάστατου χώρου Hilbert του συστήματος, έχει καθαρότητα:

$$\varsigma = \sum_{i=1}^N p_i^2 \geq \frac{1}{N}$$

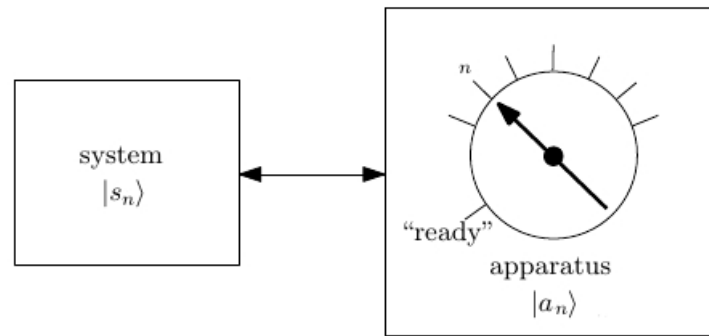
που παίρνει την ελάχιστη τιμή  $\varsigma = 1/N$  στην περίπτωση της μέγιστης “μικτότητας” της μήτρας πυκνότητας (όταν  $p_i = 1/N$  για κάθε  $i = 1, \dots, N$ ).

## 1.4 Ιδανική κβαντική μέτρηση von Neumann

Ο σκοπός του von Neumann ήταν να περιγράψει τη διαδικασία της κβαντικής μέτρησης εξ ολοκλήρου με όρους της Κβαντομηχανικής, δηλαδή ως αλληλεπίδραση ανάμεσα στο σύστημα  $\mathcal{S}$  και τη συσκευή μέτρησης  $\mathcal{A}$ . Επομένως, κατά τον von Neumann, τόσο το σύστημα που μετράμε, όσο η συσκευή μέτρησης, θεωρούνται ως κβαντικά συστήματα που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους:

$$|\psi\rangle |a_r\rangle = \left( \sum_n c_n |s_n\rangle \right) |a_r\rangle \rightarrow |\Psi\rangle = \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle \quad (1.8)$$

όπου  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |s_n\rangle$  και  $|a_r\rangle$  είναι η κατάσταση του συστήματος  $\mathcal{S}$  και της συσκευής μέτρησης  $\mathcal{A}$  αντίστοιχα, πριν τη μέτρηση. Μετά τη μέτρηση – μετά την αλληλεπίδραση μεταξύ τους – η κατάσταση του σύνθετου συστήματος  $\mathcal{SA}$  γίνεται  $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle$ . Η μοναδιακή εξέλιξη αυτή είναι συνέπεια της γραμμικότητας της εξίσωσης Schrodinger.



Παρατηρούμε ότι η τελική κατάσταση του σύνθετου συστήματος  $\mathcal{SA}$  είναι εν γένει μια εναγκαλισμένη κατάσταση, που σημαίνει ότι πλέον δεν μπορούμε να αποδώσουμε μια καθαρή κατάσταση στο σύστημα ή τη συσκευή μέτρησης χωριστά. Η υπέρθεση, που αρχικά ήταν παρούσα μόνο στο σύστημα  $\mathcal{S}$ , ενισχύθηκε και επεκτάθηκε στο επίπεδο της (συνήθως μακροσκοπικής) συσκευής μέτρησης, με τη έννοια ότι η τελική υπέρθεση περιλαμβάνει το σύστημα και τη συσκευή μέτρησης μαζί.

Όμως η μέτρηση της μορφής (1.8) δεν είναι πλήρης, με την έννοια ότι στο τέλος δεν λαμβάνουμε κάποιο συγκεκριμένο αποτέλεσμα  $|a_n\rangle$  όπως συμβαίνει στην πράξη, και για

το λόγω αυτό η μέτρηση αυτή συχνά αναφέρεται ως *premeasurement*. Η πλήρης εικόνα της μέτρησης είναι η εξής:

$$|\psi\rangle |a_r\rangle \rightarrow \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle \xrightarrow{|c_k|^2} |s_k\rangle |a_k\rangle$$

Όμως δεν είναι καθόλου ξεκάθαρο πως συμβαίνει η τελευταία μη-μοναδιακή μετάβαση (“κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης”), κάτι που είναι γνωστό ως *πρόβλημα της μέτρησης*.

Άλλο ένα πρόβλημα που προκύπτει με τη μέτρηση κατά von Neumann είναι το πρόβλημα της *προτιμώμενης βάσης* (preferred basis) που οφείλεται στο ότι η τελική κατάσταση  $|\Psi\rangle$  της (1.8) μπορεί, εν γένει, να εκφραστεί με πολλούς διαφορετικούς τρόπους:

$$|\psi\rangle |a_r\rangle \rightarrow |\Psi\rangle = \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle = \sum_n c'_n |s'_n\rangle |a'_n\rangle = \dots \quad (1.9)$$

(υπενθυμίζουμε ότι το ανάπτυγμα Schmidt είναι μοναδικό μόνο αν οι συντελεστές  $c_i$  είναι πραγματικοί και όλοι διάφοροι μεταξύ τους, κάτι που γενικά δεν ισχύει), που σημαίνει ότι το φυσικό μέγεθος, που υποτίθεται ότι μετρήθηκε, δεν είναι ορισμένο με μοναδικό τρόπο. Με άλλα λόγια, η μέτρηση von Neumann (1.9) μας λέει ότι ταυτόχρονα μετρήθηκαν πολλά φυσικά μεγέθη, ακόμα και αυτά που δεν μετατίθενται μεταξύ τους. Τέτοια ταυτόχρονη μέτρηση μη-μετατιθέμενων φυσικών μεγεθών όχι μόνο παραβιάζει τους νόμους της Κβαντομηχανικής, αλλά έρχεται σε αντίθεση με την εμπειρία μας ότι οι συσκευές μέτρησης είναι σχεδιασμένες να μετρούν μόνο πολύ συγκεκριμένα φυσικά μεγέθη. Επομένως βλέπουμε ότι το μοντέλο της μέτρησης του von Neumann δεν μπορεί να εξηγήσει την ύπαρξη της προτιμώμενης βάσης στην οποία γίνεται η μέτρηση. Το πρόβλημα αυτό, όπως και το πρόβλημα του ότι λαμβάνουμε μόνο ένα αποτέλεσμα κατά τη μέτρηση, μπορεί να ξεπεραστεί αν θεωρήσουμε το σύστημα-συσκευή  $\mathcal{SA}$  ως ανοιχτό σύστημα που αλληλεπιδρά με το περιβάλλον του.

## 1.5 “Μέτρηση” από το περιβάλλον – Αποσυνοχή

Επανεξετάζουμε το μοντέλο von Neumann για την ιδανική κβαντική μέτρηση (1.8), συμπεριλαμβάνοντας αυτή τη φορά το περιβάλλον  $\mathcal{E}$ . Ο χώρος Hilbert του σύνθετου συστήματος σύστημα-συσκευή-περιβάλλον  $\mathcal{SAE}$  είναι  $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$ . Η γραμμικότητα της εξίσωσης Schrodinger δίνει την παρακάτω χρονική εξέλιξη του σύνθετου συστήματος  $\mathcal{SAE}$ :

$$\begin{aligned} \left( \sum_n c_n |s_n\rangle \right) |a_r\rangle |e_0\rangle &\xrightarrow{(1)} \left( \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle \right) |e_0\rangle \\ &\xrightarrow{(2)} \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle |e_n\rangle \end{aligned} \quad (1.10)$$

όπου  $|e_n\rangle$  είναι οι καταστάσεις του περιβάλλοντος που σχετίζονται με τις διάφορες καταστάσεις pointer  $|a_n\rangle$  της συσκευής μέτρησης και  $|e_0\rangle$  είναι η αρχική του κατάσταση πριν τη μέτρηση. Συνήθως  $|e_n\rangle = |e_n\rangle_1 |e_n\rangle_2 |e_n\rangle_3 \dots$ , δηλαδή το περιβάλλον είναι ένα πολύπλοκο σύστημα αποτελούμενο από πολλά υποπεριβάλλοντα. Η κατάσταση που

προκύπτει στο βήμα (2) (όπου υποθέσαμε ότι η αλληλεπίδραση με το περιβάλλον δεν διαταράσσει τους συσχετισμούς ανάμεσα στην κατάσταση του συστήματος  $|s_n\rangle$  και την αντίστοιχη κατάσταση pointer  $|a_n\rangle$ ) είναι εναγκαλισμένη, δηλαδή ανάμεσα στο  $\mathcal{SA}$  και στις διάφορες καταστάσεις του περιβάλλοντος σχηματίστηκαν κβαντικοί συσχετισμοί (πρακτικά μη-αναστρέψιμοι λόγω του πολύ μεγάλου αριθμού των βαθμών ελευθερίας του περιβάλλοντος). Αυτό σημαίνει ότι το περιβάλλον κατέγραψε την κατάσταση του συστήματος  $\mathcal{S}$  (για την ακρίβεια, του  $\mathcal{SA}$ ). Για αυτό και μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το περιβάλλον δρα ως μια συσκευή μέτρησης.

Μια μέτρηση συνήθως περιορίζεται στο σύστημα  $\mathcal{SA}$  (ή μόνο στη συσκευή μέτρησης  $\mathcal{A}$ ), καθώς οι βαθμοί ελευθερίας του περιβάλλοντος (το μεγαλύτερο μέρος τους) είναι πρακτικά μη-παρατηρήσιμοι. Επομένως η περιγραφή του συστήματος  $\mathcal{SA}$  θα γίνεται με ανηγμένη μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}_{\mathcal{SA}}$ , που προκύπτει παίρνοντας το μερικό ίχνος της μήτρας πυκνότητας  $\hat{\rho}_{\mathcal{SA}\mathcal{E}}$  ως προς το περιβάλλον  $\mathcal{E}$ . Έχουμε:

$$\hat{\rho}_{\mathcal{SA}\mathcal{E}} = \sum_{m,n} c_m c_n^* |s_m\rangle |a_m\rangle |e_m\rangle \langle s_n| \langle a_n| \langle e_n|$$

$$\hat{\rho}_{\mathcal{SA}} = \text{Tr}_{\mathcal{E}}(\hat{\rho}_{\mathcal{SA}\mathcal{E}}) = \sum_{m,n} c_m c_n^* |s_m\rangle |a_m\rangle \langle s_n| \langle a_n| \langle e_n| e_m\rangle$$

Η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}_{\mathcal{SA}}$  αυτή περιέχει όρους συμβολής  $|s_m\rangle |a_m\rangle \langle s_n| \langle a_n|$ ,  $m \neq n$ , καθώς δεν μπορούμε να υποθέσουμε a priori ότι οι καταστάσεις του περιβάλλοντος  $|e_n\rangle$  είναι αμοιβαία ορθογώνιες,  $\langle e_n| e_m\rangle = 0$  για  $n \neq m$ . Ωστόσο, λόγω του μεγάλου αριθμού των υποσυστημάτων του περιβάλλοντος, οι καταστάσεις  $|e_n\rangle$  με το πέρασ του χρόνου γίνονται ορθογώνιες μεταξύ τους,  $\langle e_n| e_m\rangle(t) \rightarrow \delta_{nm}$ , με αποτέλεσμα η ανηγμένη μήτρα πυκνότητα  $\hat{\rho}_{\mathcal{SA}}$  να γίνεται προσεγγιστικά διαγώνια στην “pointer βάση”  $\{|a_n\rangle\}$ :

$$\hat{\rho}_{\mathcal{SA}} \xrightarrow{t} \hat{\rho}_{\mathcal{SA}}^d = \sum_n |c_n|^2 |s_n\rangle |a_n\rangle \langle s_n| \langle a_n| = \sum_n |c_n|^2 \hat{P}_n^{(S)} \otimes \hat{P}_n^{(A)}$$

όπου  $\hat{P}_n^{(S)} = |s_n\rangle \langle s_n|$  και  $\hat{P}_n^{(A)} = |a_n\rangle \langle a_n|$  είναι οι προβολικοί τελεστές στις ιδιοκαταστάσεις των  $\mathcal{S}$  και  $\mathcal{A}$  αντίστοιχα. Βλέπουμε λοιπόν ότι οι όροι συμβολής εξαφανίζονται, δηλαδή η φασική συνοχή έχει χαθεί τοπικά (ωστόσο globaly, στο  $\mathcal{SA}\mathcal{E}$ , η συνοχή διατηρείται), και η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}_{\mathcal{SA}}^d$  είναι πανομοιότυπη με μια μήτρα πυκνότητας μικτήρας κατάστασης. Αυτό το φαινόμενο – πρακτικά μη-αναστρέψιμος απεντοπισμός των φασικών σχέσεων από το  $\mathcal{SA}$  στο σύνθετο σύστημα  $\mathcal{SA}\mathcal{E}$  – είναι γνωστό ως αποσυνοχή (decoherence). Σημειώνουμε ότι η διαδικασία αυτή είναι μη-μοναδιακή.

Το μεγαλύτερο μέρος της έρευνας στην αποσυνοχή είναι αφιερωμένο στη μοντελοποίηση των αλληλεπιδράσεων του συστήματος με το περιβάλλον σε διάφορες φυσικές περιπτώσεις. Αυτό μας δίνει την ακριβή δυναμική περιγραφή της χρονική εξέλιξη των καταστάσεων του περιβάλλοντος και της προκύπτουσας επίδρασης στη δυναμική της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος. Όπως θα δούμε στα επόμενα κεφάλαια, σε πολλά μοντέλα η υπερκάλυψη των διαφόρων σχετικών καταστάσεων του περιβάλλοντος  $|e_n\rangle$  ακολουθεί τον εκθετικό νόμο:

$$\langle e_n| e_m\rangle \propto e^{-t/\tau_d}$$

για  $n \neq m$ . Η ποσότητα  $\tau_d$  συμβολίζει τη χαρακτηριστική χρονική κλίμακα της αποσυνοχής, δηλαδή τον χρόνο στον οποίο η αρχική υπερκάλυψη μειώνεται κατά  $e$ .

### 1.5.1 Υπερεπιλογή της προτιμώμενης βάσης από το περιβάλλον

Εκ πρώτης όψεως φαίνεται πως το πρόβλημα της προτιμώμενης βάσης (1.9) εξακολουθεί να υπάρχει και στην περίπτωση της “μέτρησης” από το περιβάλλον (1.10):

$$|\psi\rangle |a_r\rangle |e_0\rangle \rightarrow \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle |e_n\rangle = \sum_n c'_n |s'_n\rangle |a'_n\rangle |e'_n\rangle = \dots$$

Όμως αυτό δεν ισχύει για δύο λόγους:

1. *Υπερεπιλογή (superselection) της προτιμώμενης βάσης από το περιβάλλον* [30]. Η αλληλεπίδραση του συστήματος με το περιβάλλον επιλέγει ένα σύνολο αμοιβαία μετατιθέμενων παρατηρήσιμων μεγεθών. Η επιλογή αυτή γίνεται σύμφωνα με το κριτήριο σταθερότητας: η προτιμώμενη pointer βάση είναι η βάση στην οποία οι συσχετισμοί ανάμεσα στο  $\mathcal{S}$  και  $\mathcal{A}$  δεν διαταράσσονται από την αλληλεπίδραση με το περιβάλλον. Επομένως, το προτιμώμενο φυσικό μέγεθος  $\hat{O}_{\mathcal{A}}$ , που έχει ως ιδιοκαταστάσεις τις προτιμώμενες pointer καταστάσεις  $|a_n\rangle$ , είναι:

$$\hat{O}_{\mathcal{A}} = \sum_n \lambda_n |a_n\rangle \langle a_n| = \sum_n \lambda_n \hat{P}_n^{(\mathcal{A})}$$

για το οποίο ισχύει:

$$[\hat{P}_n^{(\mathcal{A})}, \hat{H}_{\mathcal{AE}}] = 0, \quad \forall n$$

όπου  $\hat{H}_{\mathcal{AE}}$  είναι η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης της συσκευής μέτρησης  $\mathcal{A}$  με το περιβάλλον  $\mathcal{E}$  (για ευκολία υποθέσαμε ότι το περιβάλλον αλληλεπιδρά μόνο με τη συσκευή μέτρησης και όχι με το σύστημα  $\mathcal{S}$ ). Οι σχέσεις μετάθεσης αυτές εξασφαλίζουν ότι η αλληλεπίδραση του  $\mathcal{A}$  με το περιβάλλον δεν διαταράσσει τις καταστάσεις pointer. Επομένως οι προτιμώμενες pointer καταστάσεις είναι καταστάσεις που επιτρέπουν την ελάχιστη διαφυγή της πληροφορίας για το σύστημα  $\mathcal{S}$  στο περιβάλλον, δηλαδή είναι λιγότερο επιρρεπής στην αποσυναγωγή.

Άλλο ένα ισοδύναμο κριτήριο επιλογής των προτιμώμενων pointer καταστάσεων βασίζεται στην ελαχιστοποίηση της μεταβολής (στον χρόνο) της εντροπίας von Neumann  $S = -\text{Tr}(\hat{\rho}_{\Psi} \ln \hat{\rho}_{\Psi})$ .

2. *Θεώρημα της μοναδικότητας του αναπτύγματος μιας καθαρής κατάστασης τριών υποσυστημάτων* [4], [5]. Αν η κατάσταση  $|\Psi\rangle$  στον χώρο Hilbert  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$  μπορεί να αναπτυχθεί σε διαγώνια Schmidt μορφή  $|\Psi\rangle = \sum_i a_i |\phi_i\rangle_1 |\phi_i\rangle_2 |\phi_i\rangle_3$ , τότε το ανάπτυγμα αυτό είναι μοναδικό αν τα  $\{|\phi_i\rangle_1\}$  και  $\{|\phi_i\rangle_2\}$  είναι σύνολα γραμμικά ανεξάρτητων, κανονικοποιημένων διανυσμάτων στους  $\mathcal{H}_1$  και  $\mathcal{H}_2$  αντίστοιχα, και το  $\{|\phi_i\rangle_3\}$  είναι σύνολο αμοιβαία μη-συγγραμμικών κανονικοποιημένων διανυσμάτων στον  $\mathcal{H}_3$ . Αυτό το θεώρημα γενικεύεται και για  $N > 3$  συστήματα. Σημειώνουμε ότι δεν είναι πάντα δυνατόν να αναπτύξουμε μια αυθαίρετη κατάσταση  $|\Psi\rangle$  για  $N \geq 3$  σε διαγώνια μορφή Schmidt  $|\Psi\rangle = \sum_i a_i |\phi_i\rangle_1 |\phi_i\rangle_2 \cdots |\phi_i\rangle_N$ , αλλά αν υπάρχει ένα τέτοιο ανάπτυγμα, τότε είναι μοναδικό.

Επομένως, το περιβάλλον, μέσω της Χαμιλτονιανής αλληλεπίδρασης  $\hat{H}_{\mathcal{AE}}$ , ορίζει το προτιμώμενο φυσικό μέγεθος  $\hat{O}_{\mathcal{A}}$ , και κατά συνέπεια τις καταστάσεις του συστήματος

$\mathcal{S}$  που μετρούνται από το  $\mathcal{A}$ . Το θεώρημα της μοναδικότητας τότε εξασφαλίζει τη μοναδικότητα του αναπτύγματος της τελικής κατάστασης  $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle |e_n\rangle$  (χωρίς να χρειάζεται να επιβληθούν κάποιοι περιορισμοί στους συντελεστές  $c_n$ ), και κατά συνέπεια τη μοναδικότητα της προτιμώμενης βάσης pointer.



# 2

## Αποσυνοχή λόγω της σκέδασης

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται το μοντέλο της αποσυνοχής για τη περίπτωση της σκέδασης σωματιδίων του περιβάλλοντος από ένα μεσοσκοπικό ή μακροσκοπικό αντικείμενο.

Η σκέδαση των σωματιδίων του περιβάλλοντος (φωτόνια του ορατού φωτός, μόρια του αέρα, κοσμικά μίονια, ηλιακά νετρίνα, κοσμική μικροκυματική ακτινοβολία υποβάθρου κτλ.) είναι η κυρίαρχη και πανταχού παρούσα διαδικασία που οδηγεί στην αποσυνοχή στον μακρόκοσμο, και ως εκ τούτου παίζει σημαντικό ρόλο στην εμφάνιση της “κλασικότητας” του κόσμου γύρω μας. Τέτοιες σκεδάσεις δημιουργούν χβαντική σύμπλεξη ανάμεσα στο σύστημα και τα σωματίδια του περιβάλλοντος, προκαλώντας έτσι τον απεντοπισμό (delocalization) των τοπικών σχέσεων φάσης ανάμεσα στις χωρικά διαχωρισμένες συνιστώσες της κυματοσυνάρτησης (αποσυνοχή στον χώρο). Αυτό εξηγεί γιατί στις τοπικές μετρήσεις τα μακροσκοπικά αντικείμενα φαίνονται εντοπισμένα στον χώρο και γιατί είναι δύσκολο να παρατηρηθούν μακροσκοπικά φαινόμενα συμβολής.

### 2.1 Το μοντέλο της σκέδασης

Μας ενδιαφέρει να μελετήσουμε το φαινόμενο της χωρικής χβαντικής αποσυνοχής για μακροσκοπικά αντικείμενα που οφείλεται στην σκέδαση μικροσκοπικών σωματιδίων. Θεωρούμε ένα αντικείμενο (σύστημα  $\mathcal{S}$ ) που σκεδάζει σωματίδια (περιβάλλον  $\mathcal{E}$ ) όπως πχ. μόρια του αέρα ή φωτόνια. Υποθέτουμε ότι αρχικά, για  $t = 0$ , τα  $\mathcal{S}$  και  $\mathcal{E}$  είναι ασυσχέτιστα, δηλαδή αρχικά η κατάσταση του συστήματος  $\mathcal{SE}$  δεν είναι entangled:

$$\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_{\mathcal{S}}(0) \otimes \hat{\rho}_{\mathcal{E}}(0)$$

Θεωρούμε αρχικά την περίπτωση της σκέδασης ενός μόνο σωματιδίου του περιβάλλοντος, καθώς αυτό είναι αρκετό για να προκληθεί η αποσυνοχή (έστω μερική) στο  $\mathcal{S}$ , και αργότερα θα γενικεύσουμε σε σκεδάσεις  $N$  σωματιδίων. Και μιας και μας ενδιαφέρει εδώ να μελετήσουμε το φαινόμενο της χβαντικής αποσυνοχής που είναι η συνέπεια

των κβαντικών συσχετίσεων ανάμεσα στο σύστημα  $\mathcal{S}$  και το περιβάλλον  $\mathcal{E}$  που θα δημιουργηθούν μετά τη σκέδαση, θεωρούμε ότι η μάζα του σκεδαζόμενου σωματιδίου είναι πολύ μικρή σχετικά με τη μάζα του αντικειμένου, ώστε η θέση του κέντρου μάζας  $\mathbf{x}$  του συστήματος  $\mathcal{S}$  να μην διαταράσσεται από την σκέδαση και να αλλάζει μόνο η θέση  $\chi$  του σωματιδίου.

Οπότε συμβολίζουμε την κατάσταση του συστήματος  $\mathcal{S}$  ως ιδιοκατάσταση θέσης  $|\mathbf{x}\rangle$  (με ιδιοτιμή  $\mathbf{x}$ ), και την αρχική κατάσταση του σωματιδίου του περιβάλλοντος με  $|\chi_i\rangle$ . Το αποτέλεσμα της σκέδασης μπορεί να εκφραστεί με τη δράση του τελεστή σκέδασης  $\hat{S}$  (γνωστού και ως  $S$ -matrix):

$$|\mathbf{x}\rangle |\chi_i\rangle \rightarrow \hat{S} |\mathbf{x}\rangle |\chi_i\rangle$$

Αν γράψουμε την κατάσταση  $|\mathbf{x}\rangle$  ως κατάσταση που προκύπτει από την δράση του τελεστή μετάθεσης<sup>1</sup>  $\hat{M}(\mathbf{x})$  στην κατάσταση  $|\mathbf{x} = \mathbf{0}\rangle \equiv |\mathbf{0}\rangle$  (που αντιστοιχεί στο κέντρο σκέδασης ευρισκόμενο στην αρχή των αξόνων),  $|\mathbf{x}\rangle = e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar} |\mathbf{0}\rangle$ , τότε

$$|\mathbf{x}\rangle |\chi_i\rangle = e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar} |\mathbf{0}\rangle |\chi_i\rangle \rightarrow \hat{S} e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar} |\mathbf{0}\rangle |\chi_i\rangle = \hat{S} e^{-i\mathbf{x}\cdot(\hat{\mathbf{p}}+\hat{\mathbf{q}})/\hbar} |\mathbf{0}\rangle e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{q}}/\hbar} |\chi_i\rangle$$

όπου  $\mathbf{q}$  είναι η ορμή του σκεδαζόμενου σωματιδίου και  $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \mathbf{q}$  η ορμή ολόκληρου του συστήματος  $\mathcal{SE}$ .

Λόγω της διατήρησης της ενέργειας κατά την ελαστική σκέδαση, η αλληλεπίδραση  $\hat{S}$  δεν εξαρτάται από τη συνολική ορμή  $\mathbf{P}$  του συστήματος  $\mathcal{SE}$  (παρά μόνο από τη σχετική ορμή των  $\mathcal{S}$  και  $\mathcal{E}$ ), ισχύει ότι  $[\hat{S}, \hat{\mathbf{P}}] = 0$ . Επομένως μπορούμε να γράψουμε:

$$\hat{S} |\mathbf{x}\rangle |\chi_i\rangle = e^{-i\mathbf{x}\cdot(\hat{\mathbf{p}}+\hat{\mathbf{q}})/\hbar} \hat{S} |\mathbf{0}\rangle e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{q}}/\hbar} |\chi_i\rangle$$

Λόγω της υπόθεσης που κάναμε για τις μάζες του συστήματος  $\mathcal{S}$  και του σωματιδίου, η κατάσταση του κέντρου μάζας  $|\mathbf{x}\rangle$  δεν επηρεάζεται από την δράση του τελεστή σκέδασης  $\hat{S}$ . Επομένως

$$\begin{aligned} \hat{S} |\mathbf{x}\rangle |\chi_i\rangle &= e^{-i\mathbf{x}\cdot(\hat{\mathbf{p}}+\hat{\mathbf{q}})/\hbar} |\mathbf{0}\rangle \hat{S}_0 e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{q}}/\hbar} |\chi_i\rangle \\ &= e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar} |\mathbf{0}\rangle e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{q}}/\hbar} \hat{S}_0 e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{q}}/\hbar} |\chi_i\rangle \\ &= |\mathbf{x}\rangle \hat{S}_x |\chi_i\rangle \end{aligned}$$

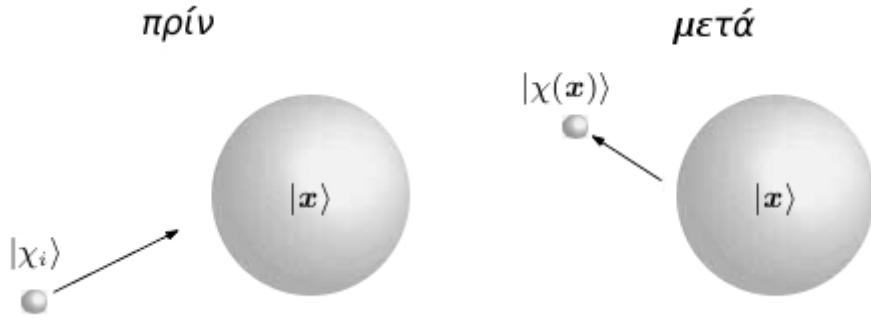
$$|\mathbf{x}\rangle |\chi_i\rangle \rightarrow \hat{S} |\mathbf{x}\rangle |\chi_i\rangle = |\mathbf{x}\rangle \hat{S}_x |\chi_i\rangle \equiv |\mathbf{x}\rangle |\chi(\mathbf{x})\rangle \quad (2.1)$$

όπου ορίσαμε τον τελεστή  $\hat{S}_x$  ως:

$$\hat{S}_x \equiv e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{q}}/\hbar} \hat{S}_0 e^{i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{q}}/\hbar}$$

Ο κατω δέκτης στον τελεστή  $\hat{S}$  υποδεικνύει το κέντρο σκέδασης. Η κατάσταση  $|\chi(\mathbf{x})\rangle$  είναι η τελική κατάσταση του σωματιδίου του περιβάλλοντος που σκεδάστηκε στο  $\mathbf{x}$ .

<sup>1</sup>Ο τελεστής μετάθεσης ορίζεται ως  $\hat{M}(\mathbf{x}) |\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} + \mathbf{x}\rangle$ . Αναπτύσσοντας σε σειρά Taylor γύρω από το μηδέν, παίρνουμε:  $\hat{M}(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\mathbf{x}^n}{n!} \cdot \left( \frac{\partial^n \hat{M}}{\partial \mathbf{x}^n} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{0}} = e^{\mathbf{x}\cdot\left(\frac{\partial \hat{M}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{\mathbf{x}=\mathbf{0}}} = e^{-i\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar}$ , όπου ορίσαμε τη συζυγή ορμή (τελεστής)  $\hat{\mathbf{p}} \equiv i\hbar \left( \frac{\partial \hat{M}}{\partial \mathbf{x}} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{0}}$



Βλέπουμε από την εξίσωση (2.1) ότι η σκέδαση μπορεί να ειδωθεί ως μια διαδικασία μέτρησης που δημιουργεί κβαντικούς συσχετισμούς ανάμεσα στην κατάσταση  $|\mathbf{x}\rangle$  του κέντρου μάζας του συστήματος  $\mathcal{S}$  και την τελική κατάσταση  $|\chi(\mathbf{x})\rangle$  του σωματιδίου του περιβάλλοντος που περιέχει την πληροφορία για τη θέση  $\mathbf{x}$  του κέντρου σκέδασης.

Από την εξίσωση (2.1) προκύπτει ότι η διαδικασία σκέδασης μετατρέπει την αρχική μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}(0)$  του σύνθετου συστήματος  $\mathcal{SE}$ :

$$\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_{\mathcal{S}}(0) \otimes \hat{\rho}_{\mathcal{E}}(0) = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}'| \otimes |\chi_i\rangle \langle \chi_i|$$

σε μήτρα πυκνότητας:

$$\hat{\rho} = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}'| \otimes |\chi(\mathbf{x})\rangle \langle \chi(\mathbf{x}')|$$

Με τη βοήθεια της εξίσωσης (1.5) βρίσκουμε ότι η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}_{\mathcal{S}}$  του συστήματος  $\mathcal{S}$  είναι:

$$\hat{\rho}_{\mathcal{S}} = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}'| \langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle$$

Επομένως, στον χώρο των θέσεων, η εξέλιξη της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος  $\mathcal{S}$  λόγω της σκέδασης είναι:

$$\rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) \rightarrow \rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) \langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle \quad (2.2)$$

Βλέπουμε ότι ο βαθμός της αποσυνοχής εξαρτάται από την υπερκάλυψη  $\langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle$  των σχετικών καταστάσεων του σκεδαζόμενου σωματιδίου. Οι μη διαγώνιοι όροι (όροι συμβολής) της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας  $\hat{\rho}_{\mathcal{S}}$  εξαφανίζονται στην οριακή περίπτωση  $\langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle = 0$  για  $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}'$ , με αποτέλεσμα η αποσυνοχή να είναι μέγιστη και η  $\hat{\rho}_{\mathcal{S}}$  πανομοιότυπη με μήτρα πυκνότητας μιας μικτής κατάστασης.

### 2.1.1 Υπολογισμός του συντελεστή αποσυνοχής

Χρησιμοποιώντας την εξίσωση (2.1) και το γεγονός ότι  $\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Tr}(\rho \mathcal{O}) = \text{Tr}_{\mathcal{E}}(\rho_{\mathcal{E}} \mathcal{O}_{\mathcal{E}})$ , η υπερκάλυψη  $\langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle$  δίνεται από τη σχέση:

$$\langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle = \langle \chi_i | \hat{S}_{\mathbf{x}'}^{\dagger} \hat{S}_{\mathbf{x}} | \chi_i \rangle = \text{Tr}_{\mathcal{E}} \left[ \rho_{\mathcal{E}}(0) \hat{S}_{\mathbf{x}'}^{\dagger} \hat{S}_{\mathbf{x}} \right]$$

όπου  $\rho_{\varepsilon}(0) = |\chi_i\rangle \langle \chi_i|$ . Υποθέτουμε τώρα ότι το σωματίδιο του περιβάλλοντος είναι περιορισμένο σε ένα κουτί όγκου  $V$ . Τότε οι κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις ορμής  $|\tilde{\mathbf{q}}\rangle$  είναι:

$$|\tilde{\mathbf{q}}\rangle = \left[ \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \right]^{1/2} |\mathbf{q}\rangle$$

Η σταθερά  $\frac{(2\pi\hbar)^3}{V}$  είναι ο όγκος στον χώρο των  $\mathbf{q}$  που περιέχει ακριβώς μια κβαντική κατάσταση.

Οι καταστάσεις  $|\tilde{\mathbf{q}}\rangle$  αποτελούν μια ορθοκανονική βάση στον όγκο  $V$  με την έννοια ότι:

$$\sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} |\tilde{\mathbf{q}}\rangle \langle \tilde{\mathbf{q}}| = I_V \quad (2.3)$$

όπου  $\mathbf{Q}_V$  είναι το σύνολο όλων των ορμών που αντιστοιχούν στον χώρο των κυματο-συναρτήσεων που ικανοποιούν τις περιοδικές συνθήκες στον όγκο  $V$ , και το  $I_V$  είναι ο μοναδιαίος τελεστής στο χώρο αυτό. Έτσι μπορούμε να αναπτύξουμε την αρχική ανηγμένη μήτρα πυκνότητας  $\rho_{\varepsilon}(0)$  στην βάση αυτή:

$$\rho_{\varepsilon}(0) = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) |\tilde{\mathbf{q}}\rangle \langle \tilde{\mathbf{q}}|$$

όπου το  $\mu(\mathbf{q})$  είναι η πυκνότητα πιθανότητας στον χώρο των ορμών.

Επομένως η υπερκάλυψη  $\langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle$  γίνεται:

$$\begin{aligned} \langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle &= \text{Tr}_{\varepsilon} \left[ \rho_{\varepsilon}(0) \hat{S}_{\mathbf{x}'}^{\dagger} \hat{S}_{\mathbf{x}} \right] = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{S}_{\mathbf{x}'}^{\dagger} \hat{S}_{\mathbf{x}} | \tilde{\mathbf{q}} \rangle \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) \langle \tilde{\mathbf{q}} | e^{-i\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{x}' / \hbar} \hat{S}_0^{\dagger} e^{-i\hat{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \hat{S}_0 e^{i\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{x} / \hbar} | \tilde{\mathbf{q}} \rangle \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) e^{i\hat{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{S}_0^{\dagger} e^{-i\hat{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \hat{S}_0 | \tilde{\mathbf{q}} \rangle \end{aligned} \quad (2.4)$$

Ξαναγράφουμε τον τελεστή σκέδασης  $\hat{S}_0$  στη μορφή που χρησιμοποιείται στην κβαντομηχανική θεωρία σκέδασης:

$$\hat{S}_0 = \hat{I} + i\hat{T}_0$$

Ο τελεστής  $\hat{T}$  είναι ο “πίνακας - T”, τα στοιχεία του οποίου στην βάση των ιδιοτιμών ορμής  $\{|\mathbf{q}\rangle\}$  του σχεδαζόμενου σωματιδίου, ορίζονται ως:

$$\langle \mathbf{q} | \hat{T}_0 | \mathbf{q}' \rangle = \frac{i}{2\pi\hbar q} \delta(q - q') f(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \frac{i}{2\pi\hbar m} \delta(E - E') f(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \quad (2.5)$$

όπου  $q = |\mathbf{q}|$ ,  $E = q^2/2m$  και  $m$  είναι η μάζα του σχεδαζόμενου σωματιδίου. Η συνάρτηση δέλτα εξασφαλίζει τη διατήρηση ενέργειας,  $E = E'$  (και  $q = q'$ ), κατά την ελαστική σκέδαση. Οπότε  $\frac{\delta(E - E')}{2m} = \delta[2m(E - E')] = \delta(q^2 - q'^2) = \delta[(q - q')(q + q')] = \delta[2q(q - q')] = \frac{\delta(q - q')}{2q}$ . Η συνάρτηση  $f(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$  είναι το πλάτος σκέδασης, και η ποσότητα  $|f(\mathbf{q}, \mathbf{q}')|^2$  μπορεί να βρεθεί πειραματικά καθώς είναι η διαφορική ενεργός διατομή της σκέδασης:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{q}, \mathbf{q}')|^2 \quad (2.6)$$

και εκφράζει την πιθανότητα εύρεσης του σκεδαζόμενου σωματιδίου σε κάποια συγκεκριμένη κατεύθυνση και στερεά γωνία (ή την πιθανότητα ότι μετά τη σκέδαση, η αρχική ορμή  $\mathbf{q}$  του σωματιδίου θα γίνει  $\mathbf{q}'$ ).

Επειδή ο τελεστής  $\hat{S}_0$  είναι μοναδιακός,  $\hat{S}_0\hat{S}_0^\dagger = I$ , ισχύει η ακόλουθη σχέση για τον τελεστή  $\hat{T}_0$ :

$$\begin{aligned}\hat{S}_0\hat{S}_0^\dagger &= (I + i\hat{T}_0)(I - i\hat{T}_0^\dagger) = I + i(\hat{T}_0 - \hat{T}_0^\dagger) + \hat{T}_0\hat{T}_0^\dagger = I \Rightarrow \\ &\hat{T}_0\hat{T}_0^\dagger + i(\hat{T}_0 - \hat{T}_0^\dagger) = 0\end{aligned}$$

Με βάση τα παραπάνω, η σχέση (2.4) γίνεται:

$$\begin{aligned}\langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \langle \tilde{\mathbf{q}} | (I - i\hat{T}_0^\dagger) e^{-i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} (I + i\hat{T}_0) | \tilde{\mathbf{q}} \rangle \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \langle \tilde{\mathbf{q}} | e^{-i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \left[ I + i(\hat{T}_0 - \hat{T}_0^\dagger) \right] + \hat{T}_0^\dagger e^{-i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}} \rangle \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) \left[ 1 - \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 \hat{T}_0^\dagger | \tilde{\mathbf{q}} \rangle + e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0^\dagger e^{-i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}} \rangle \right]\end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι ο τελεστής  $\hat{T}_0$  μετατίθεται με τον τελεστή της ορμής του σωματιδίου.

$$\begin{aligned}\langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \langle \tilde{\mathbf{q}} | (I - i\hat{T}_0^\dagger) e^{-i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} (I + i\hat{T}_0) | \tilde{\mathbf{q}} \rangle \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \langle \tilde{\mathbf{q}} | e^{-i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \left[ I + i(\hat{T}_0 - \hat{T}_0^\dagger) \right] + \hat{T}_0^\dagger e^{-i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}} \rangle \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) \left[ 1 - \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 \hat{T}_0^\dagger | \tilde{\mathbf{q}} \rangle + e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0^\dagger e^{-i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}} \rangle \right]\end{aligned}$$

Με τη βοήθεια της σχέσης πληρότητας (2.3), γράφουμε:

$$\begin{aligned}\langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) \left\{ 1 - \sum_{\mathbf{q}' \in \mathbf{Q}_V} \left[ \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}}' \rangle \underbrace{\langle \tilde{\mathbf{q}}' | \hat{T}_0^\dagger | \tilde{\mathbf{q}} \rangle}_{\langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}}' \rangle^*} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \underbrace{\langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0^\dagger e^{-i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} | \tilde{\mathbf{q}}' \rangle}_{e^{-i\mathbf{q}' \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \langle \tilde{\mathbf{q}}' | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}} \rangle^*} \langle \tilde{\mathbf{q}}' | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}} \rangle \right] \right\} \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \mu(\mathbf{q}) \left\{ 1 - \sum_{\mathbf{q}' \in \mathbf{Q}_V} \left[ 1 - e^{i(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \right] \left| \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}}' \rangle \right|^2 \right\}\end{aligned}$$

όπου  $\left| \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}}' \rangle \right|^2 = \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}}' \rangle \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}}' \rangle^* = \langle \tilde{\mathbf{q}}' | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}} \rangle^* \langle \tilde{\mathbf{q}}' | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}} \rangle$ , καθώς ο τελεστής  $\hat{T}_0$  είναι ερμιτιανός,  $\hat{T}_0 = \hat{T}_0^\dagger$ , με αποτέλεσμα  $\langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}}' \rangle = \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}}' \rangle^*$  και  $\langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}}' \rangle^* = \langle \tilde{\mathbf{q}}' | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}} \rangle$ .

Είναι πιο πρακτικό το άθροισμα στις ιδιοκαταστάσεις ορμής να μετατραπεί σε ένα ολοκλήρωμα. Όπως είπαμε, το  $\frac{(2\pi\hbar)^3}{V}$  είναι ο όγκος στον χώρο  $\mathbf{Q}_V$  που περιέχει ακριβώς μια κβαντική κατάσταση, επομένως, στον απειροστό όγκο  $d\mathbf{q}$  ο αριθμός των καταστάσεων είναι  $\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{q}$ . Οπότε μπορούμε να κάνουμε την αντικατάσταση:

$$\frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \sum_{\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_V} \rightarrow \int d\mathbf{q}$$

Επομένως

$$\langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle = 1 - \int d\mathbf{q} \mu(\mathbf{q}) \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \int d\mathbf{q}' \left[ 1 - e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} \right] \left| \langle \mathbf{q} | \hat{T}_0 | \mathbf{q}' \rangle \right|^2$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τη σχέση πληρότητας  $\int d\mathbf{q} \mu(\mathbf{q}) = 1$  και  $|\tilde{\mathbf{q}}\rangle = \left[ \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \right]^{1/2} |\mathbf{q}\rangle$  που δίνει  $\left| \langle \tilde{\mathbf{q}} | \hat{T}_0 | \tilde{\mathbf{q}}' \rangle \right|^2 = \left[ \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \right]^2 \left| \langle \mathbf{q} | \hat{T}_0 | \mathbf{q}' \rangle \right|^2$ .

Από την εξίσωση (2.2) που δίνει την εξέλιξη της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος  $\mathcal{S}$  λόγω της σκέδασης, υπολογίζουμε τη μεταβολή στην  $\rho_{\mathcal{S}}$ :

$$\begin{aligned} \rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', T) &= \rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) \langle \chi(\mathbf{x}') | \chi(\mathbf{x}) \rangle \\ &= \rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) \left\{ 1 - \int d\mathbf{q} \mu(\mathbf{q}) \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \int d\mathbf{q}' \left[ 1 - e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} \right] \left| \langle \mathbf{q} | \hat{T}_0 | \mathbf{q}' \rangle \right|^2 \right\} \end{aligned}$$

Οπότε

$$\begin{aligned} \rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', T) - \rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) \\ = -\rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) \int d\mathbf{q} \mu(\mathbf{q}) \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \int d\mathbf{q}' \left[ 1 - e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} \right] \left| \langle \mathbf{q} | \hat{T}_0 | \mathbf{q}' \rangle \right|^2 \end{aligned}$$

Όπου με την χρονική παράμετρο  $T$  συμβολίζουμε τον χρόνο που έχει περάσει κατά τη διαδικασία της σκέδασης. Εδώ υποθέσαμε ότι οι μόνες αλλαγές στην μήτρα πυκνότητας  $\rho_{\mathcal{S}}$  κατά την χρονική διάρκεια  $T$  οφείλονται στην σκέδαση, δηλαδή στην Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης  $\mathcal{H}_{int}$  του  $\mathcal{S}$  με το σωματίδιο του περιβάλλοντος, και όχι στην εξέλιξη του συστήματος που οφείλεται στην Χαμιλτονιανή  $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$  του συστήματος (αυτό ισχύει όταν ο χαρακτηριστικός χρόνος ελεύθερης εξέλιξης του συστήματος είναι πολύ μεγαλύτερος του μέσου χρόνου σκέδασης).

Για τον υπολογισμό της ποσότητας  $\left| \langle \mathbf{q} | \hat{T}_0 | \mathbf{q}' \rangle \right|^2$  χρησιμοποιούμε τη σχέση (2.5) του ορισμού του τελεστή  $\hat{T}_0$ :

$$\left| \langle \mathbf{q} | \hat{T}_0 | \mathbf{q}' \rangle \right|^2 = \frac{1}{(2\pi\hbar m)^2} \delta^2(E - E') |f(\mathbf{q}, \mathbf{q}')|^2$$

Το τετράγωνο της συνάρτησης δέλτα υπολογίζεται ως εξής (χρησιμοποιούμε τη μέθοδο του Adler [1]): Η αναπαράσταση Fourier της ενεργειακής συνάρτησης δέλτα είναι:

$$\delta(E - E') = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{i(E-E')t/\hbar}$$

Επομένως μπορούμε να γράψουμε:

$$\begin{aligned} \delta^2(E - E') &= \delta(E - E') \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{i(E-E')t/\hbar} \\ &= \delta(E - E') \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} dt \\ &= \delta(E - E') \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{T}{2\pi\hbar} \end{aligned}$$

όπου το γεγονός ότι η συνάρτηση  $\delta(E - E')$  μηδενίζεται για  $E \neq E'$  μας επέτρεψε να γράψουμε  $e^{i(E-E')t/\hbar} = 1$  στη δεύτερη γραμμή. Αν υποθέσουμε ότι το χρονικό διάστημα  $T$  είναι κατά πολύ μεγαλύτερο από τον χρόνο σκέδασης ενός σωματιδίου, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι:

$$\delta^2(E - E') = \delta(E - E') \frac{T}{2\pi\hbar} = \delta(q - q') \frac{m}{q} \frac{T}{2\pi\hbar}$$

Επίσης υποθέτουμε ότι το  $T$  είναι σημαντικά μικρότερο από τον χαρακτηριστικό χρόνο αποσυνοχής από σκέδαση μεγάλου αριθμού σωματιδίων του περιβάλλοντος, επειδή εν γένει χρειάζονται να γίνουν πολλές σκεδάσεις για να προκληθεί μια αισθητή αποσυνοχή. Επομένως

$$\left| \langle \mathbf{q} | \hat{T}_0 | \mathbf{q}' \rangle \right|^2 = \frac{v(q)}{q^2} \frac{T}{(2\pi\hbar)^3} \delta(q - q') |f(\mathbf{q}, \mathbf{q}')|^2$$

όπου  $v(q) = q/m$  είναι η ταχύτητα σωματιδίου ορμής  $q$ .

Γράφοντας το στοιχείο όγκου στον χώρο των ορμών σε σφαιρικές συντεταγμένες  $d\mathbf{q}' = q'^2 \sin \theta' d\theta' d\phi' dq' = q'^2 d\hat{n}' dq'$ , όπου  $d\hat{n}'$  είναι το διαφορικό της στερεάς γωνίας στον χώρο των ορμών στην κατεύθυνση του μοναδιαίου διανύσματος  $\hat{\mathbf{n}}' = \mathbf{q}'/q'$ , θα έχουμε  $\int d\mathbf{q}' \delta(q - q') = \int dq' q'^2 \delta(q - q') \int d\hat{n}' = q^2 \int d\hat{n}'$ . Επομένως

$$\begin{aligned} \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', T) - \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) \\ = -\rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) \frac{T}{V} \int d\mathbf{q} \mu(\mathbf{q}) v(q) \int d\hat{n}' \left[ 1 - e^{i(\mathbf{q} - q\hat{n}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')/\hbar} \right] |f(\mathbf{q}, q\hat{n}')|^2 \end{aligned} \quad (2.7)$$

Η εξίσωση (2.7) δίνει τη μεταβολή της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος  $\mathcal{S}$  λόγω της σκέδασης ενός μόνο σωματιδίου του περιβάλλοντος. Για να γενικεύσουμε σε  $N$  ανεξάρτητες σκεδάσεις, απλώς πολλαπλασιάζουμε το ολοκλήρωμα της εξίσωσης (2.7) με  $N$ . Τότε η ποσότητα  $N/V$  είναι η συνολική πυκνότητα αριθμού σωματιδίων του περιβάλλοντος. Για ευκολία υποθέτουμε ότι τα "είσερχόμενα" σωματίδια είναι ισοτροπικά κατανεμημένα στον χώρο, δηλαδή κάθε διεύθυνση  $\mathbf{q}/q$  είναι ισοδύναμη. Ξαναγράφουμε την πυκνότητα πιθανότητας στον χώρο των ορμών ως:

$$\mu(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = \frac{1}{4\pi} \frac{V}{N} \rho(q) dq d\hat{n}$$

όπου  $\rho(q)$  είναι η πυκνότητα "είσερχόμενων" σωματιδίων με ορμή  $q$ , και η σταθερά κανονικοποίησης  $\frac{1}{4\pi N}$  τέτοια ώστε  $\int \rho(q) dq = \frac{N}{V}$  (δεδομένου ότι  $\int \mu(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = 1$  και  $\int d\hat{n} = 4\pi$ ).

Διαιρώντας την εξίσωση (2.7) με την παράμετρο  $T$  και παίρνοντας το όριο  $T \rightarrow 0$ , παίρνουμε τη διαφορική εξίσωση για τη χρονική εξέλιξη της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος  $\mathcal{S}$ :

$$\frac{\partial \rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)}{\partial t} = -F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rho_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) \quad (2.8)$$

όπου

$$F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \int dq \rho(q) v(q) \int \int \frac{d\hat{n} d\hat{n}'}{4\pi} \left[ 1 - e^{iq(\hat{n} - \hat{n}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')/\hbar} \right] |f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2 \quad (2.9)$$

είναι ο παράγοντας αποσυνοχής και παίζει το ρόλο του ρυθμού της αποσυνοχής με τον οποίο η χωρική συνοχή ανάμεσα σε δύο θέσεις  $\mathbf{x}$  και  $\mathbf{x}'$  καταστέλλεται τοπικά. Ωστόσο η σχέση αυτή είναι αρκετά γενική μιας και δεν έχουμε ακόμα καθορίσει την ενεργό διατομή σκέδασης  $|f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2$ .

## 2.2 Δυο οριακές περιπτώσεις

Υποθέτουμε ότι το σύστημα  $\mathcal{S}$  βρίσκεται σε μια coherent κατάσταση υπέρθεσης δύο καλά εντοπισμένων κυματοπακέτων σε απόσταση  $\Delta x = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$  μεταξύ τους. Το ερώτημα που θέλουμε να απαντήσουμε είναι πόσο γρήγορα θα γίνει η αποσυνοχή σε μια τέτοια κατάσταση υπέρθεσης λόγω της σκέδασης σωματιδίων του περιβάλλοντος. Για το σκοπό αυτό διακρίνουμε δύο οριακές περιπτώσεις για το μήκος κύματος του σχεδαζόμενου σωματιδίου (σχετικά με την απόσταση  $\Delta x$ ): το όριο των μικρών μηκών κύματος στο οποίο το κάθε σχεδαζόμενο σωματίδιο πλήρως καταστέλλει τη χωρική συνοχή, και το όριο των μεγάλων μηκών κύματος στο οποίο απαιτούνται πολλές σχεδάσεις σωματιδίων για την πλήρη καταστολή της χωρικής συνοχής.

### 2.2.1 Το όριο των μικρών μηκών κύματος

Στην περίπτωση αυτή το τυπικό μήκος κύματος  $\lambda_0$  είναι πολύ μικρότερο του διαχωρισμού  $\Delta x = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ , δηλαδή  $\lambda_0 \ll \Delta x$ , που σημαίνει ότι το σχεδαζόμενο σωματίδιο θα μπορεί να διακρίνει αυτόν τον διαχωρισμό και να πάρει μαζί του τη μέγιστη πληροφορία για την κατάσταση του αντικειμένου (συστήματος  $\mathcal{S}$ ), προκαλώντας τη μέγιστη αποσυνοχή σε κάθε σκέδαση. Αυτό σημαίνει ότι υπάρχει ένα άνω όριο στον ρυθμό της αποσυνοχής, και η περαιτέρω αύξηση του  $\Delta x$  δεν θα προκαλεί περισσότερη χωρική αποσυνοχή, καθώς για κάθε δοσμένο  $\Delta x$  υπάρχει ένα μήκος κύματος του σχεδαζόμενου σωματιδίου που προκαλεί τη μέγιστη χωρική αποσυνοχή. Με άλλα λόγια, ο ρυθμός της χωρικής αποσυνοχής στην περίπτωση αυτή δεν εξαρτάται από το  $\Delta x$ .

Σύμφωνα με τη σχέση de Broglie, το μήκος κύματος  $\lambda_0$  αντιστοιχεί σε ορμή  $q_0 = 2\pi\hbar/\lambda_0$ , οπότε συνεπάγεται ότι  $q_0\Delta x/\hbar \gg 1$ . Αυτό σημαίνει ότι το εκθετικό στη σχέση (2.9) θα ταλαντώνεται πολύ γρήγορα και συγκριτικά με τη μονάδα κατά μέσο όρο δεν θα



συνεισφέρει στον παράγοντα αποσυνοχής  $F(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ . Επομένως στο όριο αυτό μπορούμε να γράψουμε:

$$F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \int dq \rho(q) v(q) \int \int \frac{d\hat{n} d\hat{n}'}{4\pi} |f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2$$

Εδώ το ολοκλήρωμα  $\int d\hat{n}' |f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2$  είναι απλώς η ολική ενεργός διατομή  $\sigma_{tot}(\mathbf{q})$  για την ορμή  $\mathbf{q} = q\hat{n}$ , καθώς το  $|f|^2$  είναι η διαφορική ενεργός διατομή (2.6). Οπότε το ολοκλήρωμα  $\int \sigma_{tot}(\mathbf{q}) d\hat{n}/4\pi$  δίνει την μέση τιμή του  $\sigma_{tot}(\mathbf{q})$  για όλες τις διευθύνσεις  $\hat{n}$  του  $\mathbf{q}$ . Άρα

$$\int \int \frac{d\hat{n} d\hat{n}'}{4\pi} |f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2 = \int \frac{d\hat{n}}{4\pi} \sigma_{tot}(\mathbf{q}) = \sigma_{tot}(q)$$

όπου  $\sigma_{tot}(q)$  είναι η ολική ενεργός διατομή για το μέτρο της ορμής  $q$ , ανεξαρτήτως της διεύθυνσης της. Τελικά ο ρυθμός της αποσυνοχής γράφεται:

$$F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \int dq \rho(q) v(q) \sigma_{tot}(q) \equiv \Gamma_{tot}$$

όπου  $\Gamma_{tot}$  είναι ο ολικός ρυθμός σκέδασης.

Με βάση τα παραπάνω, η χρονική εξέλιξη (2.8) των όρων σκέδασης (μη διαγώνιων όρων,  $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}'$ ) της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας  $\rho_S$  είναι:

$$\frac{\partial \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)}{\partial t} = -\Gamma_{tot} \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)$$

και για χρόνους που η εσωτερική δυναμική του συστήματος είναι αμελητέα, έχουμε:

$$\rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) = \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) e^{-\Gamma_{tot} t}$$

Επομένως βλέπουμε ότι στο όριο των μικρών μηκών κύματος των σκεδαζόμενων σωματιδίων, οι όροι (χωρικής) υπέρθεσης καταστέλλονται εκθετικά με ρυθμό που ορίζεται από τον ολικό ρυθμό σκέδασης  $\Gamma_{tot}$ .

### 2.2.2 Το όριο των μεγάλων μηκών κύματος

Θεωρούμε τώρα το όριο του μεγάλου μηκών κύματος του σκεδαζόμενου σωματιδίου,  $\lambda_0 \gg \Delta x$  (ή ισοδύναμα  $q_0 \Delta x / \hbar \ll 1$ ). Στην περίπτωση αυτή, ένα μόνο σκεδαζόμενο σωματίδιο δεν είναι αρκετό για να διακρίνει τον διαχωρισμό  $\Delta x$  και για αυτό θα περιέχει μόνο ένα μικρό μέρος της πληροφορίας για την κατάσταση του συστήματος, επομένως για την πλήρη χωρική αποσυνοχή της κατάστασης του αντικειμένου θα χρειαστεί ένας μεγάλος αριθμός σκεδάσεων.

Αναπτύσσουμε σε σειρά (μέχρι δεύτερης τάξης) τον εκθετικό όρο της σχέσης (2.9):

$$1 - e^{iq(\hat{n} - \hat{n}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') / \hbar} \approx -\frac{i}{\hbar} q(\hat{n} - \hat{n}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \frac{1}{2\hbar^2} q^2 [(\hat{n} - \hat{n}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')]^2$$

Ο πρώτος όρος του αναπτύγματος αυτού δεν συνεισφέρει στο ολοκλήρωμα επειδή η συνάρτηση  $(\hat{n} - \hat{n}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  είναι περιττή στο  $(\hat{n}, \hat{n}')$ , ενώ η  $|f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2 = f(q\hat{n}', q\hat{n})|^2$  είναι άρτια, με αποτέλεσμα το γινόμενο τους να είναι μια περιττή συνάρτηση ως προς  $(\hat{n}, \hat{n}')$  και το ολοκλήρωμα της ως προς όλες τις διευθύνσεις  $\hat{n}$  και  $\hat{n}'$  να είναι μηδέν.

Επομένως, στο όριο αυτό, ο ρυθμός αποσυνοχής είναι:

$$F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \int dq \rho(q) v(q) q^2 \int \int \frac{d\hat{n} d\hat{n}'}{8\pi\hbar^2} [(\hat{n} - \hat{n}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')]^2 |f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2$$

Για να απλοποιήσουμε τα πράγματα, υποθέτουμε ότι η σκέδαση δεν επηρεάζεται από τον προσανατολισμό του συστήματος συντεταγμένως. Αυτό μας επιτρέπει να γράψουμε:

$$\begin{aligned} [(\hat{n} - \hat{n}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')]^2 &= (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 \frac{1}{3} \sum_{\hat{i}=\hat{x},\hat{y},\hat{z}} [(\hat{n} - \hat{n}') \cdot \hat{i}]^2 \\ &= \frac{1}{3} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 (\hat{n} - \hat{n}')^2 \\ &= \frac{2}{3} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 (1 - \hat{n} \cdot \hat{n}') \\ &= \frac{2}{3} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 (1 - \cos \Theta) \\ &= \frac{2}{3} (\Delta x)^2 (1 - \cos \Theta) \end{aligned}$$

όπου  $\Theta$  είναι η γωνία ανάμεσα στην εισερχόμενη και εξερχόμενη τροχιά του σκεδαζόμενου σωματιδίου. Επιπλέον θεωρούμε ότι η ενεργός διατομή  $|f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2$  είναι ισοτροπική, δηλαδή εξαρτάται μόνο από το μέτρο της ορμής και την γωνία σκέδασης  $\Theta$ ,  $|f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2 = |f(q, \cos \Theta)|^2$ . Επομένως

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= \frac{2}{3\hbar^2} (\Delta x)^2 \int dq \rho(q) v(q) q^2 \int \int \frac{d\hat{n} d\hat{n}'}{8\pi} (1 - \cos \Theta) |f(q, \cos \Theta)|^2 \\ &= \frac{2\pi}{3\hbar^2} (\Delta x)^2 \int dq \rho(q) v(q) q^2 \int d\cos \Theta (1 - \cos \Theta) |f(q, \cos \Theta)|^2 \\ &= (\Delta x)^2 \int dq \rho(q) v(q) \frac{q^2}{\hbar^2} \sigma_{eff}(q) = (\Delta x)^2 \Lambda \end{aligned}$$

όπου

$$\sigma_{eff}(q) \equiv \frac{2\pi}{3} \int d\cos \Theta (1 - \cos \Theta) |f(q, \cos \Theta)|^2 \quad (2.10)$$

είναι η effective ενεργός διατομή της σκέδασης, και

$$\Lambda \equiv \int dq \rho(q) v(q) \frac{q^2}{\hbar^2} \sigma_{eff}(q) \quad (2.11)$$

είναι η σταθερά σκέδασης που εμπεριέχει τις λεπτομέρειες της σκέδασης.

Με βάση τα παραπάνω, η χρονική εξέλιξη (2.8) των όρων σκέδασης της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας  $\rho_S$  είναι:

$$\frac{\partial \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)}{\partial t} = -(\Delta x)^2 \Lambda \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) \quad (2.12)$$

Για χρονικές κλίμακες που η εσωτερική δυναμική του συστήματος είναι αμελητέα, έχουμε

$$\rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) = \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) e^{-\Lambda(\Delta x)^2 t} = \rho_S(\mathbf{x}, \mathbf{x}', 0) e^{-t/\tau_{\Delta x}}$$

όπου

$$\tau_{\Delta x} = \frac{1}{\Lambda(\Delta x)^2} \quad (2.13)$$

είναι ο χρόνος αποσυνοχής, δηλαδή ο χρόνος που χρειάζεται για την καταστολή της χωρικής συνοχής σε απόσταση  $\Delta x$  κατά παράγοντα  $e$ . Κατά συνέπεια, το  $1/\tau_{\Delta x}$  είναι ο ρυθμός της χωρικής αποσυνοχής.

Βλέπουμε ότι σε αντίθεση με την περίπτωση μικρών μηκών κύματος, τώρα η καταστολή της αποσυνοχής εξαρτάται ρητά από την απόσταση  $\Delta x$ . Αυτή η εξάρτηση είναι αναμενόμενη, καθώς όπως εξηγήσαμε στην αρχή, στην περίπτωση  $\lambda_0 \gg \Delta x$ , μειώνοντας την απόσταση  $\Delta x$  και κρατώντας σταθερό το μήκος κύματος  $\lambda_0$ , μειώνεται το resolution και χρειάζονται περισσότερες σκεδάσεις για την καταστολή της χωρικής συνοχής.

Τέλος αναφέρουμε ότι ο χρόνος αποσυνοχής  $\tau_{\Delta x}$  (ως συνάρτηση του  $\Delta x$ ) που δίνεται από τη σχέση (2.13), είναι φραγμένος από κάτω σε κάποια πεπερασμένη τιμή (μεγαλύτερη του μηδενός), παρόλο που αυτό δεν είναι εμφανές από τη σχέση αυτή. Αυτό οφείλεται στο ότι αυξάνοντας την απόσταση  $\Delta x$ , κρατώντας το μήκος κύματος  $\lambda_0$  του σκεδαζόμενου σωματιδίου σταθερό, θα φτάσουμε κάποια στιγμή στην περίπτωση που το  $\Delta x$  θα γίνει μεγαλύτερο από το  $\lambda_0$ , με αποτέλεσμα το όριο των μεγάλων μηκών κύματος να μην ισχύει πλέον και έτσι θα πρέπει να περάσουμε στο όριο των μικρών μηκών κύματος στο οποίο ο χρόνος αποσυνοχής είναι ανεξάρτητος του  $\Delta x$ . Επομένως όταν γίνει αυτό, η περαιτέρω αύξηση της απόστασης  $\Delta x$  δεν θα έχει καμία επίπτωση στον χρόνο αποσυνοχής.

## 2.3 Παραδείγματα της αποσυνοχής λόγω σκέδασης

Στην ενότητα αυτή θα δούμε δύο παραδείγματα εφαρμογής του μοντέλου σκέδασης για τη χωρική αποσυνοχή που αναπτύξαμε προηγουμένως. Στο πρώτο παράδειγμα θα εξετάσουμε την περίπτωση που τα σωματίδια του περιβάλλοντος είναι φωτόνια, ενώ στο δεύτερο – μόρια του αέρα. Το σύστημα υπό μελέτη είναι ένα μικρό αντικείμενο (πχ. ένας κόκκος σκόνης).

### 2.3.1 Σκέδαση φωτονίων

Θεωρούμε ότι μια μικρή διηλεκτρική σφαίρα ακτίνας  $a$  και διηλεκτρικής σταθεράς  $\epsilon$  (σύστημα  $\mathcal{S}$ ) αλληλεπιδρά με αέριο φωτονίων σε θερμοκρασία  $T$  (περιβάλλον  $\mathcal{E}$ ). Υποθέτουμε ότι η διηλεκτρική σταθερά  $\epsilon$  είναι ανεξάρτητη από τη συχνότητα των σκεδαζόμενων φωτονίων. Θα εξετάσουμε την περίπτωση των μεγάλων μηκών κύματος των φωτονίων ώστε να μελετήσουμε την αποσυνοχή λόγω της σκέδασης θερμικής ακτινοβολίας σε θερμοκρασία δωματίου ( $T = 300 \text{ K}$ ) και της κοσμικής ακτινοβολίας υποβάθρου CMB ( $T = 3 \text{ K}$ ) με έναν κόκκο σκόνης.

Η διαφορική ενεργός διατομή στην περίπτωση αυτή δίνεται από τον νόμο του Rayleigh [12] (θεωρώντας ότι η σκέδαση είναι ανεξάρτητη της πόλωσης του σκεδαζόμενου σωματιδίου):

$$|f(q\hat{\mathbf{n}}, q\hat{\mathbf{n}}')|^2 = |f(q, \cos \Theta)|^2 = \left(\frac{q}{\hbar}\right)^4 a^6 \left(\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2}\right)^2 \frac{1}{2}(1 + \cos^2 \Theta)$$

η οποία εξαρτάται από το μέτρο της ορμής  $q$  του φωτονίου και την γωνία σκέδασης  $\Theta$ . Επομένως η effective ενεργός διατομή  $\sigma_{eff}(q)$  (2.10) θα είναι:

$$\begin{aligned}\sigma_{eff}(q) &= \frac{\pi}{3} \left(\frac{q}{\hbar}\right)^4 a^6 \left(\frac{\epsilon-1}{\epsilon+2}\right)^2 \int_1^{-1} d\cos\Theta (1-\cos\Theta)(1+\cos^2\Theta) \\ &= \frac{\pi}{3} \left(\frac{q}{\hbar}\right)^4 a^6 \left(\frac{\epsilon-1}{\epsilon+2}\right)^2 \int_1^{-1} d\cos\Theta (1+\cos^2\Theta) \\ &= \frac{\pi}{3} \left(\frac{q}{\hbar}\right)^4 a^6 \left(\frac{\epsilon-1}{\epsilon+2}\right)^2 \left(2 + \frac{2}{3}\right) = \frac{8\pi}{9} \left(\frac{q}{\hbar}\right)^4 a^6 \left(\frac{\epsilon-1}{\epsilon+2}\right)^2\end{aligned}$$

Για τον υπολογισμό της σταθεράς σκέδασης  $\Lambda$  (2.11), πρέπει πρώτα να προσδιορίσουμε την πυκνότητα  $\rho(q)$  των σωματιδίων ορμής  $q$ . Η μέση τιμή του αριθμού κατάληψης των φωτονίων ενέργειας  $cq$  (όπου  $v(q) = c$  είναι η ταχύτητα του φωτός στο κενό) στην θερμοκρασία  $T$  δίνεται από την κατανομή Planck (υποθέτοντας ακτινοβολία μελανός σώματος):

$$\langle n(\mathbf{q}) \rangle_T = \frac{2}{e^{cq/k_B T} - 1}$$

όπου ο παράγοντας 2 οφείλεται σε δύο δυνατές διευθύνσεις πόλωσης του φωτονίου. Επομένως η πυκνότητα  $\rho(q)$  προκύπτει αν πολλαπλασιάσουμε το  $\langle n(\mathbf{q}) \rangle_T$  με τον αριθμό των καταστάσεων ανάμεσα στο  $\mathbf{q}$  και  $\mathbf{q} + d\mathbf{q}$  ανά μονάδα όγκου,  $\frac{d^3q}{(2\pi\hbar)^3}$ . Υποθέτοντας ότι η κατανομή ορμής είναι ισοτροπική, θα είναι:

$$\frac{d^3q}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{q^2}{2\pi^2\hbar^3} dq$$

Επομένως

$$\rho(q) = \frac{1}{\pi^2\hbar^3} \left( \frac{q^2}{e^{cq/k_B T} - 1} \right)$$

Όποτε η σταθερά σκέδασης είναι:

$$\begin{aligned}\Lambda &= \int dq \rho(q) v(q) \frac{q^2}{\hbar^2} \sigma_{eff}(q) \\ &= \frac{8a^6 c}{9\pi\hbar^9} \left(\frac{\epsilon-1}{\epsilon+2}\right)^2 \int dq \frac{q^8}{e^{cq/k_B T} - 1}\end{aligned}$$

Το ολοκλήρωμα αυτό μπορεί να υπολογιστεί αν επικαλεστούμε τον ορισμό της συνάρτησης  $\zeta$  του Riemann:

$$\zeta(n) = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^\infty dx \frac{x^{n-1}}{e^x - 1}$$

Οπότε για  $x = cq/k_B T$  και  $n-1 = 8$ , έχουμε:

$$\int dq \frac{q^8}{e^{cq/k_B T} - 1} = \left(\frac{k_B T}{c}\right)^9 \int d\left(\frac{cq}{k_B T}\right) \frac{(cq/k_B T)^8}{e^{cq/k_B T} - 1} = \left(\frac{k_B T}{c}\right)^9 8! \zeta(9)$$

Επομένως

$$\Lambda = 8! \frac{8a^6 c}{9\pi} \left(\frac{\epsilon-1}{\epsilon+2}\right)^2 \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^9 \zeta(9)$$

Παρατηρούμε έντονη εξάρτηση του  $\Lambda$  από την θερμοκρασία του αερίου φωτονίων, καθώς και από το μέγεθος  $a$  του αντικειμένου,  $\Lambda \propto a^6 T^9$ .

Για  $c \approx 3 \times 10^{10} \text{ cm/s}$ ,  $k_B/\hbar c \approx 4.367 \text{ K}^{-1}\text{cm}^{-1}$ ,  $\zeta(9) \approx 1.002$  και για μεγάλες τιμές διηλεκτρικής σταθεράς  $\epsilon$  του αντικειμένου, ώστε  $(\epsilon - 1)/(\epsilon + 2) \approx 1$ , παίρνουμε:

$$\Lambda \approx 10^{20} \left( \frac{a}{[\text{cm}]} \right)^6 \left( \frac{T}{[\text{K}]} \right)^9 \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$$

Ας δούμε μερικά παραδείγματα. Για φωτόνια σε θερμοκρασία δωματίου ( $T = 300 \text{ K}$ ) που σκεδάζονται από ένα κόκκο σκόνης μεγέθους  $a = 10^{-3} \text{ cm}$ , η σταθερά σκέδασης είναι  $\Lambda \approx 10^{24} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ . Αν ο κόκκος σκόνης αυτός βρισκόταν σε κατάσταση υπέρθεσης δύο θέσεων  $\mathbf{x}$  και  $\mathbf{x}'$ , με απόσταση της τάξης  $\Delta x \approx 10^{-12} \text{ cm}$ , ο χρόνος αποσυνοχής θα ήταν  $= \frac{1}{\Lambda(\Delta x)^2} \approx 1 \text{ s}$ . Για αποστάσεις  $\Delta x$  της τάξης μεγέθους του ίδιου του κόκκου σκόνης,  $\Delta x = 10^{-3} \text{ cm}$ , η αποσυνοχή θα γινόταν σε εξαιρετικά μικρό χρονικό διάστημα  $10^{-18} \text{ s}$ . Ακόμα και αν θεωρήσουμε την κοσμική ακτινοβολία υποβάθρου CMB με  $T = 3 \text{ K}$ , ο χρόνος αποσυνοχής για τον παραπάνω κόκκο σκόνης με  $\Delta x = 10^{-3} \text{ cm}$ , είναι της τάξης ενός δευτερολέπτου. Ωστόσο για πιο μικρά αντικείμενα, η χωρική συνοχή μπορεί να διατηρείται για πιο μεγάλα χρονικά διαστήματα, (πχ. για ένα μόριο ακτίνας  $a = 10^{-6} \text{ cm}$  και  $\Delta x = a$ , ο τυπικός χρόνος αποσυνοχής λόγω της σκέδασης της ακτινοβολίας CMB θα ήταν  $10^{24} \text{ s}$  – μεγαλύτερος κατά πολύ από την ηλικία του σύμπαντος). Αλλά συνήθως η πηγή αποσυνοχής δεν είναι μόνο η ακτινοβολία CMB και οι χρόνοι αποσυνοχής για τα μεσοσκοπικά και μακροσκοπικά αντικείμενα είναι εξαιρετικά μικροί. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο είναι δύσκολο να παρατηρηθεί χωρική υπέρθεση για τα “συνηθισμένα” αντικείμενα.

Όσον αφορά τα μικροσκοπικά φορτισμένα σωματίδια (πχ. ηλεκτρόνια), έχει αποδειχτεί ότι η σκέδαση φωτονίων έχει επίσης επίπτωση στη συνοχή των καταστάσεων υπέρθεσης τους, αλλά οι χρόνοι αποσυνοχής θα είναι κατά πολύ μεγαλύτεροι. Ωστόσο δεν πρέπει να ξεχνάμε την αρχική μας υπόθεση ότι η σκέδαση δεν διαταράσσει την κίνηση του αντικειμένου, κάτι που δεν μπορεί να θεωρηθεί και για την περίπτωση των μικροσκοπικών σωματιδίων. Οπότε δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το μοντέλο που αναπτύξουμε εδώ για την περίπτωση αυτή.

### 2.3.2 Σκέδαση μορίων του αέρα

Θεωρούμε τώρα ότι τα σωματίδια του περιβάλλοντος είναι μόρια του αέρα, που σκεδάζονται από ένα μικρό αντικείμενο (με μέγεθος  $a$  από  $10^{-6} \text{ cm}$  μέχρι  $10^{-3} \text{ cm}$ , δηλαδή από ένα μεγάλο μόριο μέχρι έναν κόκκο σκόνης). Τυπικά, το μήκος κύματος de Broglie τέτοιων μορίων είναι πολύ μικρό (για παράδειγμα το μόριο  $O_2$  σε θερμοκρασία δωματίου έχει  $\lambda_{dB} \approx 2 \times 10^{-11} \text{ cm}$ ). Επομένως στην περίπτωση αυτή θα είναι  $a \gg \lambda_{dB}$  και αυτό μας επιτρέπει να θεωρήσουμε ότι η διαφορική ενεργός διατομή  $|f(q\hat{n}, q\hat{n}')|^2$  είναι σταθερά  $|f|^2$ , τέτοια ώστε αν την ολοκληρώσουμε ως προς όλες τις δυνατές διευθύνσεις, η ενεργός διατομή θα ισούται με την γεωμετρική ενεργό διατομή  $\pi a^2$  του αντικειμένου:

$$\int d\hat{n} |f|^2 = 4\pi |f|^2 = \pi a^2 \Rightarrow |f|^2 = \frac{a^2}{4}$$

Ενδιαφερόμαστε να προσδιορίσουμε το κάτω όριο του ρυθμού αποσυνοχής, δηλαδή το μέγιστο χρόνο αποσυνοχής. Επομένως θεωρούμε πάλι το όριο μεγάλων μηκών κύματος, στο οποίο η απόσταση  $\Delta x$  ανάμεσα σε δυο συνιστώσες της κατάστασης χωρικής

υπέρθεσης που περιγράφει το αντικείμενο, είναι πολύ μικρότερη από το μήκος κύματος του σχεδαζόμενου μορίου του αέρα. Οπότε, η εφφεστιε ενεργός διατομή  $\sigma_{eff}$  είναι:

$$\sigma_{eff}(q) = \frac{2\pi}{3} |f|^2 \int_1^{-1} d \cos \Theta (1 - \cos \Theta) = \frac{4\pi}{3} |f|^2 = \frac{\pi a^2}{3}$$

και η σταθερά σκέδασης:

$$\begin{aligned} \Lambda &= \int dq \rho(q) v(q) \frac{q^2}{\hbar^2} \sigma_{eff}(q) \\ &= \frac{\pi a^2}{3m\hbar^2} \int dq \rho(q) q^3 \end{aligned}$$

Η πυκνότητα  $\rho(q)$  των μορίων του αέρα με ορμή  $q$  θα δίνεται από την κατανομή Maxwell-Boltzmann:

$$\Lambda = \frac{N}{V} 4\pi q^2 \left( \frac{1}{2\pi m k_B T} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{q^2}{2m k_B T} \right)$$

όπου  $N/V$  είναι η ολική πυκνότητα του αέρα. Θέτοντας  $x = \frac{q^2}{2m k_B T}$ , έχουμε:

$$\begin{aligned} \Lambda &= \frac{N}{V} \frac{4\pi^{1/2} a^2}{3m\hbar^2} \int dq q^5 \left( \frac{1}{2m k_B T} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{q^2}{2m k_B T} \right) \\ &= \frac{N}{V} \frac{2\pi^{1/2} a^2}{3m\hbar^2} \int d \left[ \frac{q^2}{2m k_B T} \right] q^4 \left( \frac{1}{2m k_B T} \right)^{1/2} \exp \left( -\frac{q^2}{2m k_B T} \right) \\ &= \frac{N}{V} \frac{2\pi^{1/2} a^2}{3m\hbar^2} (2m k_B T)^{3/2} \int d \left[ \frac{q^2}{2m k_B T} \right] \left( \frac{q^2}{2m k_B T} \right)^2 \exp \left( -\frac{q^2}{2m k_B T} \right) \\ &= \frac{N}{V} \frac{2\pi^{1/2} a^2}{3m\hbar^2} (2m k_B T)^{3/2} \int_0^\infty dx x^2 e^{-x} \end{aligned}$$

Για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος αυτού επικαλούμαστε τον ορισμό της συνάρτησης Γάμμα:

$$\Gamma(n+1) = \int_0^\infty dx x^n e^{-x} = n!$$

Επομένως:

$$\Lambda = \frac{8}{3\hbar^2} \frac{N}{V} (2\pi m)^{1/2} a^2 (k_B T)^{3/2}$$

Παρατηρούμε ότι η εξάρτηση της σταθεράς σκέδασης  $\Lambda$  από το μέγεθος  $a$  του αντικειμένου και από τη θερμοκρασία  $T$  των μορίων του αέρα,  $T \propto a^2 T^{3/2}$ , είναι πολύ μικρότερη από ότι στην περίπτωση των φωτονίων ( $T \propto a^6 T^9$ ).

Από τη σχέση αυτή μπορούμε να εκτιμήσουμε μερικές τυπικές τιμές του  $\Lambda$ . Σε κανονική πίεση του αέρα έχουμε  $N/V \approx 3 \times 10^{19}$  μόρια/cm<sup>3</sup>, και η μάζα ενός μορίου του αέρα είναι περίπου  $m = 0.5 \times 10^{-25}$  kg. Εισάγοντας όλες τις αριθμητικές τιμές στη σταθερά σκέδασης, παίρνουμε:

$$\Lambda \approx 10^{39} \left( \frac{a}{[cm]} \right)^2 \left( \frac{T}{[K]} \right)^{3/2} cm^{-2} s^{-1}$$

Για έναν κόκκο σκόνης ( $a = 10^{-3} \text{ cm}$ ) σε θερμοκρασία δωματίου ( $T = 300 \text{ K}$ ) η σταθερά σκέδασης είναι της τάξης  $\Lambda \approx 10^{37} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ . Στο εργαστήριο είναι δυνατόν να επιτευχθούν υψηλά επίπεδα κενού, ακόμα και  $N/V \approx 10^6 \text{ μόρια/cm}^3$ . Επομένως για έναν κόκκο σκόνης σε τέτοιο εργαστηριακό κενό, η σταθερά σκέδασης θα ήταν  $\Lambda \approx 10^{24} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ .

Για την επίδειξη της αποτελεσματικότητας της αποσυνοχής λόγω σκέδασης μορίων του αέρα, θεωρούμε ότι ο κόκκος σκόνης βρίσκεται σε κατάσταση υπέρθεσης δύο θέσεων σε μικροσκοπική απόσταση  $\Delta x = 10 \text{ \AA} = 10^{-7} \text{ cm}$  μεταξύ τους. Οπότε, σε κανονική πίεση αέρα και θερμοκρασία δωματίου, ο χρόνος αποσυνοχής θα είναι  $\tau_{\Delta x} = \frac{1}{\Lambda(\Delta x)^2} \approx 10^{-23} \text{ s}$ , ενώ σε υψηλό εργαστηριακό κενό ( $N/V \approx 10^6 \text{ μόρια/cm}^3$ ), θα είναι  $\tau_{\Delta x} \approx 10^{-10} \text{ s}$ .

Στον παρακάτω πίνακα είναι συγκεντρωμένες οι τιμές για τους χρόνους αποσυνοχής που υπολογίσαμε για τον κόκκο σκόνης μεγέθους  $a = 10^{-3} \text{ cm}$  που αλληλεπιδρά με διάφορα περιβάλλοντα:

Περιβάλλον	$\Delta x \text{ (cm)}$	$\tau_{\Delta x} \text{ (sec)}$
Φωτόνια σε θερμοκρασία δωματίου	$10^{-12}$	1
	$10^{-3}$	$10^{-18}$
Ακτινοβολία CMB	$10^{-3}$	1
Μόρια του αέρα σε κανονική πίεση ( $3 \times 10^{19} \text{ μόρια/cm}^3$ )	$10^{-7}$	$10^{-23}$
Μόρια του αέρα σε υψηλό κενό ( $10^6 \text{ μόρια/cm}^3$ )	$10^{-7}$	$10^{-10}$

Οι χρόνοι αποσυνοχής αυτοί είναι εξαιρετικά μικροί και μας δείχνουν γιατί είναι τόσο δύσκολο να παρατηρηθούν φαινόμενα συμβολής για τα μεσοσκοπικά και μακροσκοπικά αντικείμενα, όχι μόνο σε κανονικές συνθήκες, αλλά ακόμα και σε εργαστηριακές.

## 2.4 Δυναμική της αποσυνοχής

Στην προηγούμενη ενότητα για να εκτιμήσαμε τις τυπικές χρονικές κλίμακες της χωρικής αποσυνοχής, αγνοήσαμε την επίδραση της χρονικής εξέλιξης της Χαμιλτονιανής του συστήματος  $H_S$ . Στο όριο των μεγάλων μηκών κύματος βρήκαμε ότι η (μη-μοναδιακή) χρονική εξέλιξη των όρων σκέδασης της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος, που οφείλετε μόνο στη σκέδαση, είναι (σε μια διάσταση τώρα):

$$\frac{\partial \rho_S(x, x', t)}{\partial t} = -(x - x')^2 \Lambda \rho_S(x, x', t)$$

Η Χαμιλτονιανή αυτή οδηγεί στην εξάπλωση των κυματοπακέτων και κατά συνέπεια στην αύξηση του μήκους συνοχής, σε αντίθεση με την Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης που οδηγεί στον εντοπισμό (localization) των κυματοπακέτων.

Για την πλήρη περιγραφή της δυναμικής της αποσυνοχής, πρέπει να προσθέσουμε στην εξίσωση αυτή τον όρο που περιγράφει την (μοναδιακή) χρονική εξέλιξη της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος λόγω της “ελεύθερης” Χαμιλτονιανής<sup>2</sup>:

$$\hat{H}_S = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

όπου θέσαμε  $\hbar \equiv 1$ . Ο όρος αυτός δίνεται από την εξίσωση Liouville - von Neumann:

$$\frac{\partial \hat{\rho}_S(t)}{\partial t} = -i[\hat{H}_S(t), \hat{\rho}_S(t)] = -\frac{i}{2m} (\hat{p}^2 \hat{\rho}_S(t) - \hat{\rho}_S(t) \hat{p}^2)$$

που στην αναπαράσταση θέσης είναι:

$$\begin{aligned} -\frac{i}{2m} (\langle x | \hat{p}^2 \hat{\rho}_S(t) | x' \rangle - \langle x | \hat{\rho}_S(t) \hat{p}^2 | x' \rangle) &= \frac{i}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \right) \langle x | \hat{\rho}_S(t) | x' \rangle \\ &= \frac{i}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \right) \rho_S(x, x', t) \end{aligned}$$

Επομένως

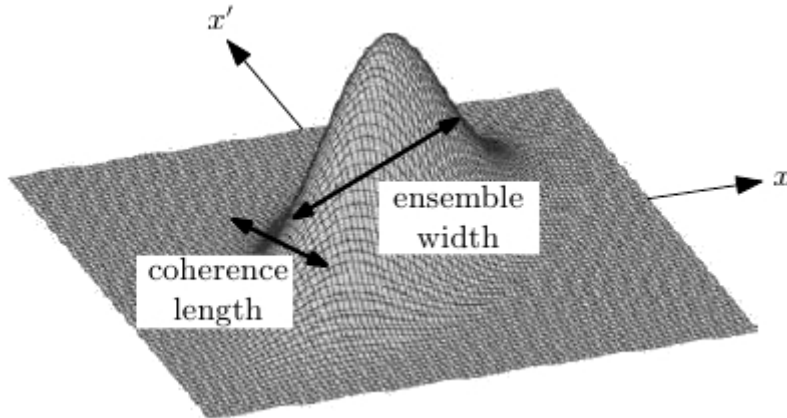
$$\frac{\partial \rho_S(x, x', t)}{\partial t} = \left\langle x \left| \frac{\partial \hat{\rho}_S(t)}{\partial t} \right| x' \right\rangle = \frac{i}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \right) \rho_S(x, x', t) - \Lambda(x-x')^2 \rho_S(x, x', t) \quad (2.14)$$

Η εξίσωση αυτή είναι ένα παράδειγμα της εξίσωσης master για την αποσυνοχή (θα μελετήσουμε τις εξισώσεις master πιο διεξοδικά στο επόμενο κεφάλαιο).

Για την επίλυση της εξίσωσης κίνησης (2.14), ακολουθούμε το paper των E. Joos και H.D. Zeh [15] που χρησιμοποιεί το Γκαουσιανό ansatz:

$$\rho_S(x, x', t) = \exp \left[ -A(t)(x-x')^2 - iB(t)(x-x')(x+x') - C(t)(x+x')^2 - D(t) \right] \quad (2.15)$$

όπου  $A(t)$ ,  $B(t)$ ,  $C(t)$  και  $D(t)$  είναι χρονικά εξαρτώμενοι συντελεστές, και αν η  $\rho_S$  είναι ερμητιανή τότε οι συναρτήσεις αυτές παίρνουν πραγματικές τιμές. Ο συντελεστής  $D(t)$  απλώς κανονικοποιεί το ίχνος του  $\rho_S$  στην μονάδα. Παρακάτω βλέπουμε ένα τυπικό γράφημα αυτής της Γκαουσιανής μήτρας πυκνότητας στον χώρο  $(x, x')$ :



<sup>2</sup>Στην πραγματικότητα η Χαμιλτονιανή αυτή, εν γένει, δεν είναι “ελεύθερη” επειδή το σύστημα αλληλεπιδρά με το περιβάλλον. Αλλά για τους σκοπούς μας εδώ μπορεί να θεωρηθεί ως τέτοια.



Η χωρική κατανομή πιθανότητας είναι:

$$P(x, t) = N \rho_S(x, x, t) = N e^{-4C(t)x^2}$$

όπου η σταθερά κανονικοποίησης είναι:

$$N \int e^{-4Cx^2} = 1 \Rightarrow N = \sqrt{\frac{4C}{\pi}}$$

οπότε

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{4C(t)}{\pi}} e^{-4C(t)x^2}$$

Υπολογίζουμε τώρα τις αναμενόμενες τιμές  $\langle x \rangle$  και  $\langle x^2 \rangle$ :

$$\langle x \rangle = \int dx P(x)x = \sqrt{\frac{4C}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-4Cx^2} x = -\sqrt{\frac{4C}{\pi}} \frac{1}{8C} \left[ e^{-4Cx^2} \right]_{-\infty}^{\infty} = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \int dx P(x)x^2 = \sqrt{\frac{4C}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-4Cx^2} x^2 = \frac{1}{8C} \underbrace{\sqrt{\frac{4C}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-4Cx^2}}_{\int dx P(x)=1} = \frac{1}{8C}$$

Επομένως η αβεβαιότητα στη θέση είναι:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{1}{\sqrt{8C(t)}}$$

Το  $\Delta x$  είναι το πλάτος της  $\rho_S(x, x', t)$  στη διεύθυνση  $x = x'$  και το ονομάζουμε πλάτος της στατιστικής συλλογής (ensemble width).

Ομοίως, το πλάτος της Γκαουσιανής  $\rho_S(x, x', t)$  στη διεύθυνση  $x = -x'$  είναι αντιστρόφως ανάλογο του  $\sqrt{A(t)}$  και δίνει το εύρος της χωρικής συνοχής. Οπότε μπορούμε να ορίσουμε το τυπικό μήκος χωρικής συνοχής (coherence length) ως:

$$\ell(t) \equiv \frac{1}{\sqrt{8A(t)}}$$

Το μήκος συνοχής είναι η απόσταση στην οποία μπορούν να παρατηρηθούν φαινόμενα συμβολής.

Η αναπαράσταση της Γκαουσιανής  $\rho_S(x, x', t)$  στο χώρο των ορμών προκύπτει από το μετασχηματισμό Fourier:

$$\rho_S(p, p', t) = \frac{1}{2\pi} \int dx dx' e^{-i(px-p'x')} \rho_S(x, x', t) = \sqrt{\frac{C(t)}{\pi[B(t)^2 + 4A(t)C(t)]}} \times \exp \left\{ \frac{-1}{4[B(t)^2 + 4A(t)C(t)]} \left[ A(t)(p-p')^2 - iB(t)(p-p')(p+p') + C(t)(p+p')^2 \right] \right\}$$

Επομένως η κατανομή πιθανότητας είναι:

$$P(p, t) = \rho_S(p, p, t) = \sqrt{\frac{C(t)}{\pi[B(t)^2 + 4A(t)C(t)]}} \exp \left[ -\frac{C(t)p^2}{B(t)^2 + 4A(t)C(t)} \right]$$

και οι αναμενόμενες τιμές:

$$\langle p \rangle = 0, \quad \langle p^2 \rangle = 2A(t) + \frac{B(t)^2}{2C(t)}$$

δίνουν την αβεβαιότητα στην ορμή:

$$\Delta p(t) = \sqrt{2A(t) + \frac{B(t)^2}{2C(t)}}$$

Με βάση τα παραπάνω, η σχέση αβεβαιότητας είναι:

$$\Delta x^2 \Delta p^2 = \frac{B^2 + 4AC}{16C^2} \geq \frac{4A}{4C} = \frac{1}{4} \frac{1}{(S_{lin} - 1)^2} \geq \frac{1}{4}$$

Όπου ορίσαμε  $S_{lin} = \text{Tr}(\rho - \rho^2) = 1 - \sqrt{C/A}$  ως γραμμική εντροπία. Για  $A = C$  έχουμε καθαρή κατάσταση ( $S_{lin} = 0$  και  $\ell = \Delta x$ ), και αν επιπλέον  $B = 0$ , τότε έχουμε τη γνωστή περίπτωση του Γκαουσιανού κυματοπακέτου με ελάχιστη τιμή αβεβαιότητας  $\Delta x^2 \Delta p^2 = 1/4$ .

Εισάγοντας το ansatz (2.15) στην εξίσωση κίνησης (2.14), παίρνουμε ένα σύστημα τριών συζευγμένων συνήθων διαφορικών εξισώσεων:

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= \frac{4}{m} AB + \Lambda \\ \frac{dB}{dt} &= \frac{2}{m} B^2 - \frac{8}{m} AC \\ \frac{dC}{dt} &= \frac{4}{m} BC \end{aligned}$$

ενώ το  $D(t)$  δίνεται από τη σχέση  $e^{-D} = 2(C/\pi)^{1/2}$ . Το σύστημα αυτό μπορεί να επιλυθεί ακριβώς για αυθαίρετες αρχικές συνθήκες (πχ. στο βιβλίο [14]). Εδώ θα παρουσιάσουμε τη δυναμική της αποσυνοχής για μια αρχικά καθαρή Γκαουσιανή κατάσταση πλάτους  $b$  και με κέντρο στο  $x = 0$ :

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= (2\pi b^2)^{-1/4} \exp\left(\frac{-x^2}{4b^2}\right) \\ \rho_S(x, x', 0) &= (2\pi b^2)^{-1/2} \exp\left(-\frac{x^2 + x'^2}{4b^2}\right) \end{aligned}$$

Με την αρχική μήτρα πυκνότητας αυτή, οι αρχικές συνθήκες για τους συντελεστές  $A$ ,  $B$  και  $C$  είναι:

$$A(0) = C(0) = \frac{1}{8b^2}, \quad B(0) = 0$$

Τότε, σύμφωνα με τον υπολογισμό στο [14], οι συντελεστές  $A$  και  $C$  είναι:

$$A(t) = \frac{\Lambda t^3 + 3m^2 b^2 / 2 + 2\Lambda^2 b^2 t^4 + 12\Lambda m^2 b^4 t}{3t^2 + 8\Lambda b^2 t^3 + 12m^2 b^4}$$

$$C(t) = \frac{1}{2} \left( \frac{t^2}{m^2 b^2} + \frac{8\Lambda t^3}{3m^3} + 4b^2 \right)^{-1}$$

Έχοντας τα αποτελέσματα αυτά, υπολογίζουμε το μήκος συνοχής  $\ell$ :

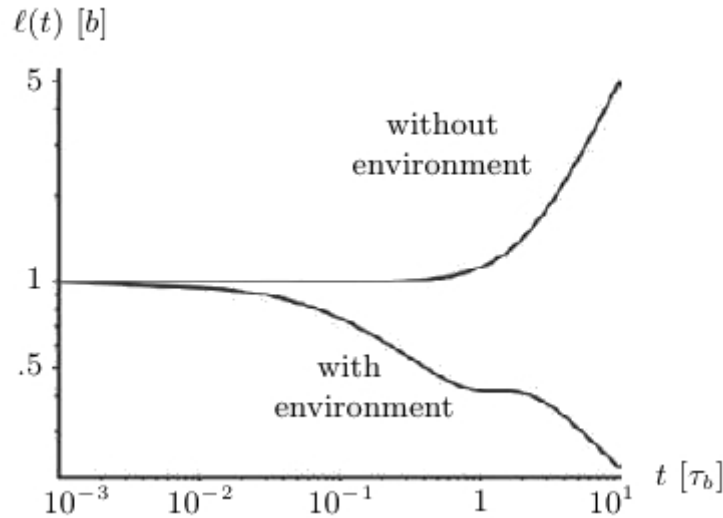
$$\ell(t) = \frac{1}{\sqrt{8A(t)}} = \frac{1}{2} \left( \frac{3t^2 + 8\Lambda b^2 t^3 + 12m^2 b^4}{2\Lambda t^3 + 3m^2 b^2 + 4\Lambda^2 b^2 t^4 + 24\Lambda m^2 b^4 t} \right)^{1/2} \quad (2.16)$$

Την χρονική στιγμή  $t = 0$  το μήκος συνοχής ισούται απλώς με το πλάτος  $b$  του κυματοπακέτου. Στην περίπτωση που το σύστημα δεν αλληλεπιδρά με το περιβάλλον του ( $\Lambda = 0$ ), το μήκος συνοχής ισούται με το πλάτος της στατιστικής συλλογής για όλους τους χρόνους:

$$\ell_{\text{free}}(t) = \frac{1}{2} \left( \frac{t^2}{m^2 b^2} + 4b^2 \right)^{1/2} = \Delta x_{\text{free}}(t)$$

και περιγράφει τη συνεκτική εξάπλωση του κυματοπακέτου στον χώρο λόγω της εσωτερικής δυναμικής του συστήματος (Χαμιλτονιανή του συστήματος  $\mathcal{S}$ ).

Στην περίπτωση που το σύστημα αλληλεπιδρά με το περιβάλλον του ( $\Lambda \neq 0$ ), παρατηρείται μείωση του μήκους συνοχής με τον χρόνο. Αυτό φαίνεται στο παρακάτω διάγραμμα, στο οποίο ο χρόνος  $t$  είναι σε μονάδες χαρακτηριστικού χρόνου εντοπισμού  $\tau_b = 1/\Lambda b^2$  για την χωρική συνοχή σε απόσταση  $b$ :



Για χρόνους  $t$  πολύ μικρότερους από την κλίμακα  $\tau_b$ , το μήκος συνοχής μειώνεται γραμμικά με τον χρόνο με ρυθμό που είναι ανάλογος της σταθεράς σκέδασης  $\Lambda$ . Αυτό φαίνεται αν πάρουμε το ανάπτυγμα μέχρι πρώτης τάξης του μήκους συνοχής (2.16) γύρω από το  $\Lambda b^2 t = 0$ :

$$\ell(t) \approx b(1 - 4\Lambda b^2 t)$$

Ενώ για χρόνους  $t$  πολύ μεγαλύτερους από το  $\tau_b$ , το μήκος συνοχής (2.16) ακολουθεί την ασυμπτωτική σχέση:

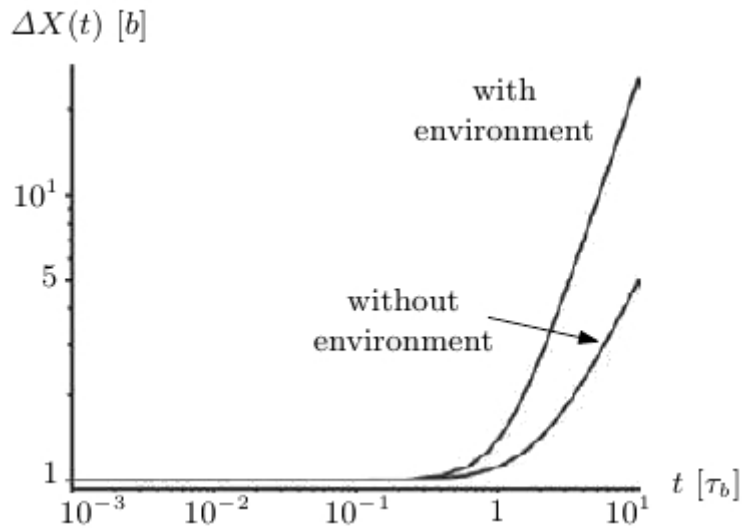
$$\ell(t) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\Lambda t}}$$

Παρατηρούμε ότι δεν υπάρχει εξάρτηση από το πλάτος  $b$ . Σημειώνουμε επίσης ότι το όριο  $t \gg \tau_b$  επιτυγχάνεται σε κλάσματα του δευτερολέπτου για μακροσκοπικά αντικείμενα (πχ. για  $\Lambda \approx 10^{20} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ , κόκκο σκόνης μεγέθους  $a = 10^{-3} \text{ cm}$  και αρχική απόσταση συνοχής  $b = 10^{-4} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ , έχουμε  $\tau_b \approx 10^{-12} \text{ s}$ ).

Από την άλλη, το πλάτος της στατιστικής συλλογής αυξάνεται με το χρόνο, και στις δύο περιπτώσεις,  $\Lambda = 0$  και για  $\Lambda \neq 0$ . Για,  $\Lambda = 0$ , όπως είδαμε προηγουμένως, θα είναι  $\Delta x_{\text{free}}(t) = \ell_{\text{free}}(t)$  που σημαίνει ότι η αύξηση του μεγέθους της στατιστικής συλλογής θα γίνεται με τον ίδιο ρυθμό με τον οποίο αυξάνεται το μήκος συνοχής. Στην περίπτωση που το σύστημα αλληλεπιδρά με το περιβάλλον του,  $\Lambda \neq 0$ , ο ρυθμός της αύξησης του  $\Delta x$  είναι μεγαλύτερος, καθώς προστίθεται ο όρος  $8\Lambda t^3/3m^2$ :

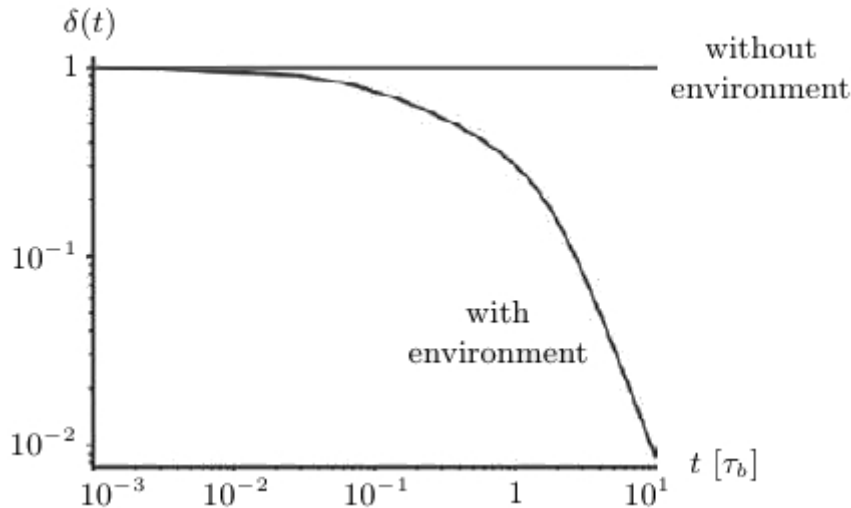
$$\Delta x(t) = \frac{1}{2} \left( \frac{t^2}{m^2 b^2} + 4b^2 + \frac{8\Lambda t^3}{3m^2} \right)^{1/2}$$

Αυτή η χρονική εξέλιξη φαίνεται στο παρακάτω γράφημα:



Για να ποσοτικοποιήσουμε την αναλογία ανάμεσα στην μείωση του μήκους συνοχής και αύξηση του μεγέθους της στατιστικής συλλογής με τον χρόνο, ορίζουμε την αδιάστατη ποσότητα:

$$\delta(t) \equiv \frac{\ell(t)}{\Delta x(t)} = \sqrt{\frac{C(t)}{A(t)}} = 1 - 4\Lambda b^2 t - O(t^2)$$



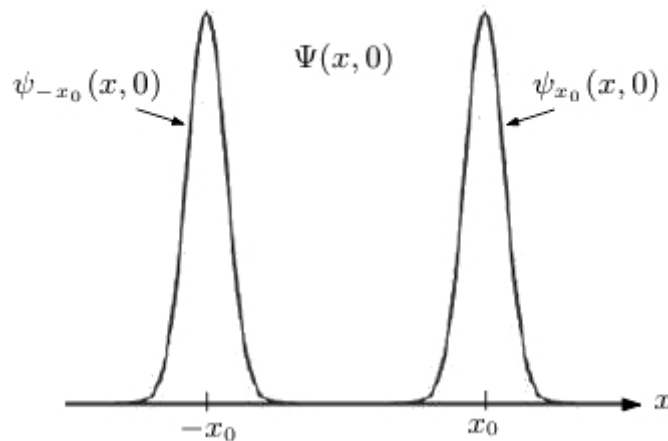
Η ποσότητα  $\delta(t)$  περιγράφει επίσης την καθαρότητα της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του μοντέλου σχέδασής μας. Βλέπουμε από το παραπάνω γράφημα ότι η αλληλεπίδραση του συστήματος με το περιβάλλον οδηγεί στην μείωση της καθαρότητας της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος.

Η μείωση αυτή σημαίνει ότι η αλληλεπίδραση του συστήματος με το περιβάλλον του οδηγεί στην μείωση με τον χρόνο της απόστασης στην οποία διατηρείται η χωρική συνοχή και είναι δυνατόν να παρατηρηθούν φαινόμενα χωρικής συμβολής, αλλά παράλληλα στην αύξηση του εύρους των δυνατών θέσεων στις οποίες είναι δυνατόν να βρεθεί το σύστημα μετά την μέτρηση (που οφείλεται στην εσωτερική δυναμική).

Τέλος, παρουσιάζουμε τη χρονική εξέλιξη λόγω μιας υπέρθεσης δύο Γκαουσιανών κυματοπακέτων της μορφής:

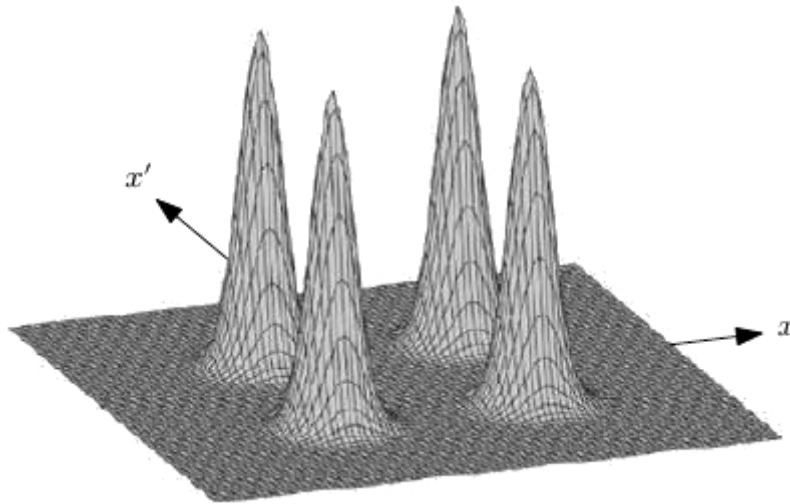
$$\begin{aligned}\Psi(x, 0) &= \psi_{x_0}(x, 0) + \psi_{-x_0}(x, 0) \\ &= \left(\frac{1}{2\pi b^2}\right)^{1/4} \left\{ \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4b^2}\right] + \exp\left[-\frac{(x+x_0)^2}{4b^2}\right] \right\}\end{aligned}$$

Το γράφημα της κυματοσυνάρτησης αυτής φαίνεται παρακάτω:



Η αντίστοιχη μήτρα πυκνότητας είναι:

$$\begin{aligned}\rho_S(x, x', 0) &= \Psi^*(x', 0)\Psi(x, 0) \\ &= \psi_{x_0}^*(x', 0)\psi_{x_0}(x, 0) + \psi_{-x_0}^*(x', 0)\psi_{-x_0}(x, 0) \\ &\quad + \psi_{x_0}^*(x', 0)\psi_{-x_0}(x, 0) + \psi_{-x_0}^*(x', 0)\psi_{x_0}(x, 0)\end{aligned}$$

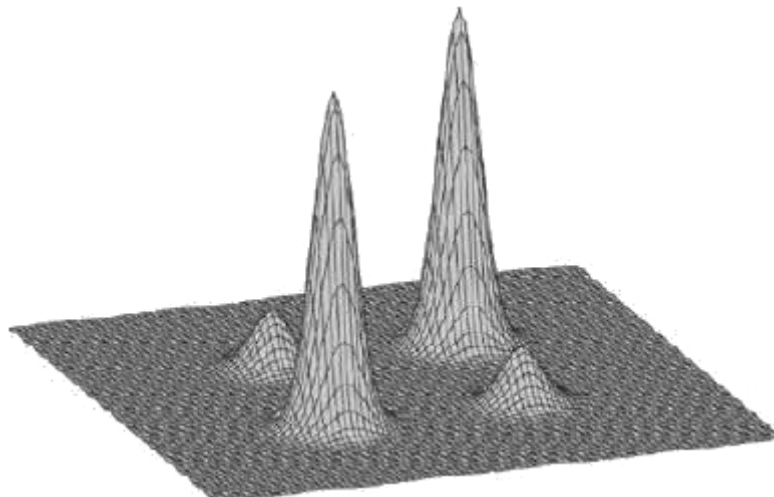


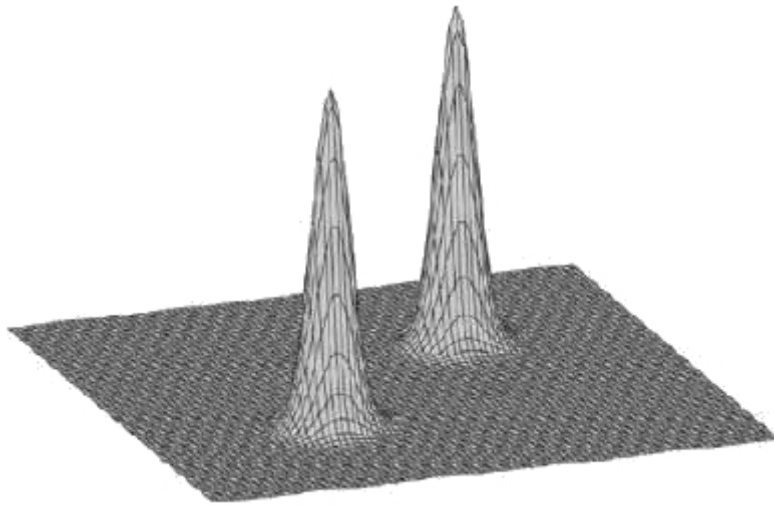
Η δύο κορυφές στον άξονα  $x = -x'$  αντιστοιχούν στους όρους συμβολής  $\psi_{x_0}^*(x', 0)\psi_{-x_0}(x, 0)$  και  $\psi_{-x_0}^*(x', 0)\psi_{x_0}(x, 0)$  ανάμεσα στα δύο Γκαουσιανά κυματοπακέτα  $\psi_{x_0}(x, 0)$  και  $\psi_{-x_0}(x, 0)$ . Αυτό σημαίνει ότι παρόλο που τα δύο κυματοπακέτα στην αρχή δεν υπερκαλύπτονται, η κατάσταση υπέρθεσης τους μπορεί να διακριθεί από μια στατιστική συλλογή, παρατηρώντας φαινόμενα συμβολής (πχ. στο πείραμα διπλής σχισμής).

Αγνοώντας την εσωτερική δυναμική, η χρονική εξέλιξη της  $\rho_S$  λόγω της σκέδασης σωματιδίων του περιβάλλοντος δίνεται από την εξίσωση κίνησης (2.12), οπότε έχουμε:

$$\rho_S(x, x', t) = \rho_S(x, x', 0)e^{-\Lambda(x-x')^2 t}$$

Αυτή η χρονική εξέλιξη οδηγεί στη σταδιακή καταστολή των όρων χωρικής συμβολής ανάμεσα σε δύο περιοχές γύρω από το  $x = \pm x_0$ : στη κύρια διαγώνιο  $x = x'$  στην οποία βρίσκονται οι δύο κορυφές που αντιστοιχούν στους όρους στατιστικής συλλογής, ο όρος απόσβεσης είναι  $e^{-\Lambda(x-x')^2 t} = e^0 = 1$  και δεν προκαλεί απόσβεση, ενώ στη διαγώνιο  $x = -x'$  στην οποία βρίσκονται οι δύο κορυφές που αντιστοιχούν στους όρους συμβολής, ο όρος απόσβεσης είναι  $e^{-4\Lambda x^2 t}$  και προκαλεί μείωση του ύψους τους με την πάροδο του χρόνου.





Στο όριο της πλήρους αποσυνοχής, οι όροι συμβολής εξαφανίζονται εντελώς και παίρνουμε μία (improper) στατιστική συλλογή δύο καταστάσεων που περιγράφουν τον εντοπισμό του συστήματος γύρω από το  $x_0$  και  $-x_0$  αντίστοιχα. Στην περίπτωση αυτή, εκτελώντας μετρήσεις μόνο στο σύστημα  $\mathcal{S}$ , η στατιστική συλλογή αυτή δεν μπορεί να διακριθεί από μια κλασική (proper) στατιστική συλλογή.





# 3

## Φορμαλισμός των εξισώσεων master

Στο κεφάλαιο παρουσιάζεται η περιγραφή της δυναμικής της αποσυνοχής με τη βοήθεια των εξισώσεων master. Οι εξισώσεις αυτές δίνουν άμεσα τη χρονική εξέλιξη της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας  $\hat{\rho}_S$  ενός ανοιχτού συστήματος  $S$  το οποίο αλληλεπιδρά με περιβάλλον  $E$ , χωρίς να χρειάζεται πρώτα να προσδιορίσουμε τη δυναμική του συνολικού συστήματος  $SE$  και μετά να κάνουμε το trace out των βαθμών ελευθερίας του περιβάλλοντος.

Η χρήση των εξισώσεων master γίνεται συνήθως στην περίπτωση που μας ενδιαφέρει μόνο η επίδραση του περιβάλλοντος στο σύστημα μας και όχι η δυναμική του περιβάλλοντος ή του συνολικού συστήματος  $SE$ . Επιπλέον, στις περισσότερες περιπτώσεις είναι αδύνατον να βρεθεί αναλυτικά η χρονική εξέλιξη της μήτρας πυκνότητας του συνολικού συστήματος, και σε τέτοιες περιπτώσεις μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε προσεγγιστικές μεθόδους για τη χρονική εξέλιξη της ανηγμένη μήτρας πυκνότητας του συστήματος.

Σημειώνουμε ότι, σε αντίθεση με τη χρονική εξέλιξη της μήτρας πυκνότητας ενός κλειστού συστήματος, η εξέλιξη της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας είναι εν γένει μη-μοναδιακή λόγω της αλληλεπίδρασης του συστήματος με το περιβάλλον. Αυτό φαίνεται και από το γεγονός ότι η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας προκύπτει από τη δράση του μερικού ίχνους στη μήτρα πυκνότητας του συνολικού συστήματος  $SE$ , και η διαδικασία αυτή είναι μη-μοναδιακή. Επομένως, εν γένει, οι εξισώσεις master θα είναι μη-μοναδιακές.

### 3.1 Δυναμική των ανοιχτών κβαντικών συστημάτων

Όπως είδαμε στα προηγούμενα κεφάλαια, η μοναδιακή χρονική εξέλιξη ενός κλειστού συστήματος  $SE$  με Χαμιλτονιανή  $\hat{H} = \hat{H}_S \otimes I_E + I_S \otimes \hat{H}_E + \hat{H}_{int}$  δίνεται από την εξίσωση Liouville - von Neumann:

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

που έχει ως λύση την:

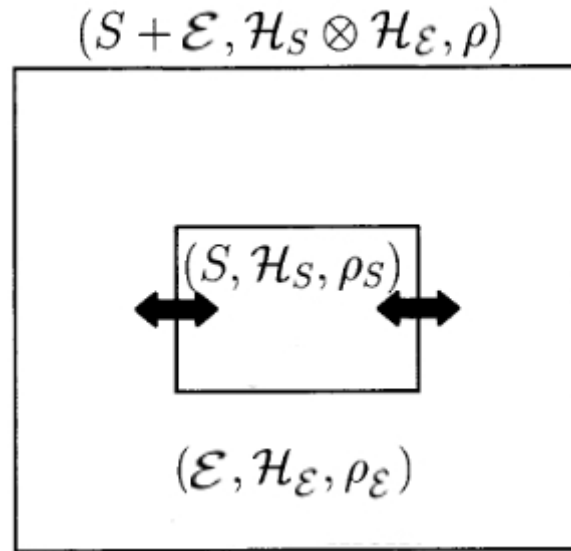
$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}(t) [\hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_E] \hat{U}^\dagger(t)$$

όπου υποθέσαμε ότι η αρχική κατάσταση του συνολικού συστήματος είναι  $\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_E$  (με  $\hat{\rho}_E = \hat{\rho}_E(0)$ ) και  $\hat{U}(t) = e^{-it\hat{H}}$  είναι ο μοναδιακός τελεστής χρονικής εξέλιξης του κλειστού συστήματος.

Η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας του ανοιχτού υποσυστήματος  $\mathcal{S}$  υπολογίζεται παίρνοντας το μερικό ίχνος της μήτρας πυκνότητας του συνολικού συστήματος  $\mathcal{SE}$ :

$$\hat{\rho}_S(t) = \text{Tr}_E \{ \hat{\rho}(t) \} = \text{Tr}_E \left\{ \hat{U}(t) [\hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_E] \hat{U}^\dagger(t) \right\}$$

Η χρονική εξέλιξη ενός ανοιχτού συστήματος εν γένει δεν είναι μοναδιακή λόγω των κβαντικών συσχετισμών που δημιουργούνται ανάμεσα στο υποσύστημα  $\mathcal{S}$  και το περιβάλλον  $\mathcal{E}$  με το οποίο αυτό αλληλεπιδρά.



Όμως, όπως αναφέραμε στην εισαγωγή, η χρονική εξέλιξη του συστήματος  $\mathcal{SE}$  στις περισσότερες περιπτώσεις είναι πολύ δύσκολο έως αδύνατο να βρεθεί. Επομένως αυτός ο τρόπος υπολογισμού της ανηγμένης μήτρας του συστήματος  $\mathcal{S}$  δεν είναι πρακτικός και χρησιμοποιείται σπάνια.

### 3.2 Μαρκοβιανές κβαντικές διαδικασίες

Οι Μαρκοβιανές κβαντικές διαδικασίες είναι αυτές που μπορούν να διατυπωθούν με τη βοήθεια της κβαντικής δυναμικής ημιμαμάδας. Η βασική προϋπόθεση που κάνουμε είναι ότι οι χρόνοι των περιβαλλοντικών κβαντικών αυτοσυσχετισμών είναι μικροί συγκριτικά με τον χαρακτηριστικό χρόνο στον οποίο η κατάσταση του ανοιχτού συστήματος αλλάζει σημαντικά, έτσι ώστε να μπορούμε να αγνοήσουμε τα φαινόμενα μνήμης.

### 3.2.1 Κβαντικές δυναμικές ημιομάδες

Στον φορμαλισμό των εξισώσεων master υπολογίζουμε κατευθείαν την ανηγμένη μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}_S(t)$  από μια σχέση της μορφής:

$$\hat{\rho}_S(t) = \hat{V}(t)\hat{\rho}_S(0)$$

όπου ο υπερτελεστής  $\hat{V}(t)$  είναι η λεγόμενη *δυναμική απεικόνιση* που παράγει τη χρονική εξέλιξη της  $\hat{\rho}_S(t)$ :

$$\hat{V}(t) : \mathcal{S}(\mathcal{H}_S) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H}_S)$$

$$\hat{\rho}_S(0) \mapsto \hat{\rho}_S(t) = \hat{V}(t)\hat{\rho}_S(0) = \text{Tr}_E \{ \hat{\rho}(t) \} = \text{Tr}_E \{ \hat{U}(t) [\hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_E] \hat{U}^\dagger(t) \}$$

όπου  $\mathcal{S}(\mathcal{H}_S)$  είναι ο χώρος των ανηγμένων μητρών πυκνότητας του συστήματος  $\mathcal{S}$ .

Αναπτύσσουμε την  $\hat{\rho}_E$  στην ορθοκανονική βάση  $|\phi_\alpha\rangle$  του χώρου Χίλμπερτ  $\mathcal{H}_E$ :

$$\hat{\rho}_E = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} |\phi_{\alpha}\rangle \langle \phi_{\alpha}|$$

όπου  $\lambda_{\alpha}$  είναι μη-αρνητικοί πραγματικοί αριθμοί που ικανοποιούν τη σχέση  $\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} = 1$ . Τότε θα έχουμε:

$$\begin{aligned} \hat{V}(t)\hat{\rho}_S(0) &= \sum_{\alpha,\beta} \lambda_{\beta} \langle \phi_{\alpha} | \hat{U}(t) | \phi_{\beta} \rangle \hat{\rho}_S(0) \langle \phi_{\beta} | \hat{U}^\dagger(t) | \phi_{\alpha} \rangle \\ &= \sum_{\alpha,\beta} W_{\alpha\beta}(t) \hat{\rho}_S(0) W_{\alpha\beta}^\dagger(t) \end{aligned} \quad (3.1)$$

όπου

$$W_{\alpha\beta}(t) = \sqrt{\lambda_{\beta}} \langle \phi_{\alpha} | \hat{U}(t) | \phi_{\beta} \rangle \quad (3.2)$$

είναι τελεστές στον χώρο  $\mathcal{H}_S$  που ικανοποιούν τη συνθήκη:

$$\sum_{\alpha,\beta} W_{\alpha\beta}(t) W_{\alpha\beta}^\dagger(t) = I_S$$

από την οποία προκύπτει ότι:

$$\text{Tr}_S \{ \hat{V}(t)\hat{\rho}(0) \} = \text{Tr}_S \{ \hat{\rho}(0) \} = 1 \quad (3.3)$$

Επομένως συμπεραίνουμε ότι η δυναμική απεικόνιση  $\hat{V}(t)$  είναι κυρτή, γραμμική, πλήρως θετική και διατηρούσα το ίχνος απεικόνιση.

Προηγούμενους ορίσαμε τη δυναμική απεικόνιση για κάποιο συγκεκριμένο  $t$ . Αν επιτρέψουμε στο  $t$  να μεταβάλλεται, προκύπτει μια μονοπαραμετρική οικογένεια  $\{ \hat{V}(t) | t \geq 0 \}$  δυναμικών απεικονίσεων, όπου  $\hat{V}(0)$  είναι η ταυτοτική απεικόνιση. Τέτοια οικογένεια περιγράφει όλη τη μελλοντική χρονική εξέλιξη του ανοικτού συστήματος  $\mathcal{S}$ . Στην περίπτωση που τα φαινόμενα μνήμης του περιβάλλοντος μπορούν να αγνοηθούν (Μακροβιανή υπόθεση), ισχύει η παρακάτω ιδιότητα ημιομάδων:

$$\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2) = \hat{V}(t_1 + t_2) , \quad t_1, t_2 \geq 0$$

Η χβαντική δυναμική ημιομάδα μπορεί να εκφραστεί σε εκθετική μορφή:

$$\hat{V}(t) = \exp(\hat{\mathcal{L}}t)$$

όπου η γραμμική απεικόνιση  $\hat{\mathcal{L}}$  είναι ο γεννήτορας της ημιομάδας. Ο γεννήτορας  $\hat{\mathcal{L}}$  είναι ένας υπερτελεστής (τελεστής που δρα σε άλλους τελεστές) και είναι γνωστός ως τελεστής Liouville. Η σχέση αυτή οδηγεί αμέσως στη διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης που είναι τοπική στο χρόνο (με την έννοια ότι η αλλαγή της  $\rho_S(t)$  εξαρτάται μόνο από την  $\rho_S$  τη χρονική στιγμή  $t$  και σε κανέναν άλλο χρόνο  $t' \neq t$ ):

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_S(t) = \hat{\mathcal{L}}\hat{\rho}_S(t)$$

Η εξίσωση αυτή λέγεται *Μαρκοβιανή εξίσωση master*.

Τέλος σημειώνουμε ότι η θετικότητα της δυναμικής απεικόνισης  $\hat{V}(t)$  μας εξασφαλίζει ότι:

$$\langle \psi | \hat{\rho}_S(t) | \psi \rangle \geq 0, \quad \forall \psi, t$$

δηλαδή ότι διατηρείται η θετικότητα της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος  $\mathcal{S}$  για οποιαδήποτε καθαρή κατάσταση  $|\psi\rangle$  του και όλους τους χρόνους  $t$ . Αυτή η συνθήκη είναι σημαντική καθώς τα στοιχεία  $\langle \psi | \hat{\rho}_S(t) | \psi \rangle$  της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας δίνουν την πιθανότητα κατάληψης και πρέπει να είναι θετικοί αριθμοί.

### 3.2.2 Μαρκοβιανές εξισώσεις master σε μορφή Lindblad

Η δύναμη των εξισώσεων master έγκειται στο ότι ακόμα και αν δεν είναι δυνατόν να προσδιορίσουμε την ακριβή δυναμική του συνολικού συστήματος  $\mathcal{SE}$ , κάνοντας διάφορες υποθέσεις μπορούμε να βρούμε μια προσέγγιση για τη χρονική εξέλιξη της  $\rho_S(t)$ . Η γενική μορφή μιας Μαρκοβιανής εξίσωσης master είναι

$$\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = \hat{\mathcal{L}}\hat{\rho}_S(t) = -i \left[ \hat{H}'_S, \hat{\rho}_S(t) \right] + \hat{\mathcal{D}}\hat{\rho}_S(t) \quad (3.4)$$

όπου το πρώτο μέρος της εξίσωσης αυτής είναι η *μοναδιακή χρονική εξέλιξη* (μεταθέτης Liouville - von Neumann) με Χαμιλτονιανή  $\hat{H}'_S$ , η οποία διαφέρει από την αδιατάρακτη ελεύθερη Χαμιλτονιανή  $\hat{H}_S$  του συστήματος  $\mathcal{S}$  λόγω της παρουσίας του περιβάλλοντος που τη διαταράσσει (κάτι που οδηγεί στην επανακανονικοποίηση των ενεργειακών επιπέδων του συστήματος). Το *μη-μοναδιακό* μέρος  $\hat{\mathcal{D}}\hat{\rho}_S(t)$  της εξίσωσης αναπαριστά την αποσυνοχή και διάχυση της ενέργειας λόγω της αλληλεπίδρασης του συστήματος με το περιβάλλον.

Για να κατασκευάσουμε την πιο γενική μορφή του τελεστή Liouville  $\hat{\mathcal{L}}$ , θεωρούμε ότι ο χώρος Χίλμπερτ  $\mathcal{H}_S$  του συστήματος είναι πεπερασμένης διάστασης,  $\dim \mathcal{H}_S = N$ . Ο χώρος Liouville (Καρτεσιανό γινόμενο δύο χώρων Χίλμπερτ) που του αντιστοιχεί είναι ένας μιγαδικός χώρος διάστασης  $N^2$  και επιλέγουμε για αυτόν μια πλήρη ορθοκανονική βάση τελεστών  $\hat{S}_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, N^2$ , που ικανοποιούν το εσωτερικό γινόμενο Hilbert - Schmidt:

$$\left( \hat{S}_i, \hat{S}_j \right) \equiv \text{Tr}_S \left\{ \hat{S}_i^\dagger \hat{S}_j \right\} = \delta_{ij}$$

Για ευκολία επιλέγουμε ο ένας εκ των τελεστών βάσης να είναι ανάλογος της μονάδας,  $\hat{S}_{N^2} = \sqrt{1/N} I_S$ , έτσι ώστε οι υπόλοιποι τελεστές βάσης να έχουν μηδενικό ίχνος,

δηλαδή  $\text{Tr}_S \left\{ \hat{S}_i \right\} = 0$  για  $i = 1, 2, \dots, N^2 - 1$ . Εφαρμόζοντας τη σχέση πληρότητας για τον καθένα από τους τελεστές  $\hat{W}_{\alpha\beta}(t)$  που ορίσαμε στο (3.2), έχουμε:

$$W_{\alpha\beta}(t) = \sum_{i=1}^{N^2} \hat{S}_i \left( \hat{S}_i, W_{\alpha\beta}(t) \right)$$

Οπότε η εξίσωση (3.1) γίνεται:

$$\hat{V}(t)\hat{\rho}_S(0) = \sum_{i,j}^{N^2} c_{ij}(t) \hat{S}_i \hat{\rho}_S(0) \hat{S}_j^\dagger \quad (3.5)$$

όπου

$$c_{ij}(t) \equiv \sum_{\alpha\beta} \left( \hat{S}_i, W_{\alpha\beta}(t) \right) \left( \hat{S}_j, W_{\alpha\beta}(t) \right)^*$$

είναι θετικοί και ερμητιανοί συντελεστές.

Από τον ορισμό του γεννήτορα  $\hat{\mathcal{L}}$ :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}\hat{\rho}_S(t) &= \frac{d}{dt}\hat{\rho}_S(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{\rho}_S(t+\epsilon) - \hat{\rho}_S(t)}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{V}(t+\epsilon)\hat{\rho}_S(0) - \hat{\rho}_S(t)}{\epsilon} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{V}(\epsilon)\hat{V}(t)\hat{\rho}_S(0) - \hat{\rho}_S(t)}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{V}(\epsilon)\hat{\rho}_S(t) - \hat{\rho}_S(t)}{\epsilon} \end{aligned}$$

και την εξίσωση (3.5), έχουμε:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}\hat{\rho}_S(t) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{c_{N^2 N^2}(\epsilon) \hat{S}_{N^2} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{N^2}^\dagger}{\epsilon} + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} \frac{c_{ij}(\epsilon) \hat{S}_i \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_j^\dagger}{\epsilon} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i=1}^{N^2-1} \left( \frac{c_{i N^2}(\epsilon) \hat{S}_i \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_{N^2}^\dagger}{\epsilon} + \frac{c_{N^2 i}(\epsilon) \hat{S}_{N^2} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_i^\dagger}{\epsilon} \right) - \frac{\hat{\rho}_S(t)}{\epsilon} \right] \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{1}{N} \frac{c_{N^2 N^2}(\epsilon) - N}{\epsilon} \hat{\rho}_S(t) + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} \frac{c_{ij}(\epsilon)}{\epsilon} \hat{S}_i \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_j^\dagger \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N^2-1} \left( \frac{c_{i N^2}(\epsilon)}{\epsilon} \hat{S}_i \hat{\rho}_S(t) + \frac{c_{N^2 i}(\epsilon)}{\epsilon} \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_i^\dagger \right) \right] \end{aligned}$$

Θέτουμε:

$$\begin{aligned} a_{N^2 N^2} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{c_{N^2 N^2}(\epsilon) - N}{\epsilon} \\ a_{i N^2} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{c_{i N^2}(\epsilon)}{\epsilon}, \quad i = 1, \dots, N^2 - 1 \\ a_{ij} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{c_{ij}(\epsilon)}{\epsilon}, \quad i, j = 1, \dots, N^2 - 1 \end{aligned}$$

Οπότε

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{L}}\hat{\rho}_S(t) &= \frac{1}{N}a_{N^2N^2}\hat{\rho}_S(t) + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij}\hat{S}_i\hat{\rho}_S(t)\hat{S}_j^\dagger \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N^2-1} \left( a_{iN^2}\hat{S}_i\hat{\rho}_S(t) + \hat{\rho}_S(t)a_{N^2i}\hat{S}_i^\dagger \right)\end{aligned}$$

Εισάγουμε τις ποσότητες:

$$\begin{aligned}\hat{S} &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N^2-1} a_{iN^2}\hat{S}_i \\ \hat{S}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N^2-1} a_{N^2i}\hat{S}_i^\dagger \\ \hat{H} &= \frac{1}{2i}(\hat{S}^\dagger - \hat{S}) \\ \hat{G} &= \frac{1}{2N}a_{N^2N^2}I_S + \frac{1}{2}(\hat{S}^\dagger + \hat{S})\end{aligned}$$

Με τη βοήθεια αυτών των ορισμών μπορούμε να γράψουμε:

$$\hat{\mathcal{L}}\hat{\rho}_S(t) = \frac{1}{N}a_{N^2N^2}\hat{\rho}_S(t) + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij}\hat{S}_i\hat{\rho}_S(t)\hat{S}_j^\dagger + \hat{S}\hat{\rho}_S(t) + \hat{\rho}_S(t)\hat{S}^\dagger$$

Παρατηρούμε ότι

$$\begin{aligned}-i[\hat{H}, \hat{\rho}_S(t)] + \{\hat{G}, \hat{\rho}_S(t)\} &= (\hat{G} - i\hat{H})\hat{\rho}_S(t) + \hat{\rho}_S(t)(\hat{G} + i\hat{H}) \\ &= \frac{1}{N}a_{N^2N^2}\hat{\rho}_S(t) + \hat{S}\hat{\rho}_S(t) + \hat{\rho}_S(t)\hat{S}^\dagger\end{aligned}$$

Επομένως

$$\hat{\mathcal{L}}\hat{\rho}_S(t) = -i[\hat{H}, \hat{\rho}_S(t)] + \{\hat{G}, \hat{\rho}_S(t)\} + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij}\hat{S}_i\hat{\rho}_S(t)\hat{S}_j^\dagger$$

Το μερικό ίχνος της παραπάνω σχέσεις είναι 0, διότι όπως είδαμε στην προηγούμενη ενότητα, η δυναμική ημιομάδα διατηρεί το ίχνος (3.3). Οπότε, για κάθε  $\hat{\rho}_S(t)$ , ισχύει:

$$\begin{aligned}\text{Tr}_S \left\{ \hat{\mathcal{L}}\hat{\rho}_S(t) \right\} &= \text{Tr}_S \left\{ \frac{1}{N}a_{N^2N^2}\hat{\rho}_S(t) + \hat{S}\hat{\rho}_S(t) + \hat{\rho}_S(t)\hat{S}^\dagger \right\} + \text{Tr}_S \left\{ \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij}\hat{S}_i\hat{\rho}_S(t)\hat{S}_j^\dagger \right\} \\ &= \text{Tr}_S \left\{ 2\hat{G}\hat{\rho}_S(t) \right\} + \text{Tr}_S \left\{ \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij}\hat{S}_j^\dagger\hat{S}_i\hat{\rho}_S(t) \right\} \\ &= \text{Tr}_S \left\{ \left( 2\hat{G} + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij}\hat{S}_j^\dagger\hat{S}_i \right) \hat{\rho}_S(t) \right\} = 0\end{aligned}$$

και συμπεραίνουμε ότι:

$$\hat{G} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} \hat{S}_j^\dagger \hat{S}_i$$

Αντικαθιστώντας, προκύπτει η πρώτη κανονική μορφή του γεννήτορα της δυναμικής ημιομάδας:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}} \hat{\rho}_S(t) &= -i \left[ \hat{H}, \hat{\rho}_S(t) \right] + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} \left( \hat{S}_i \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_j^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \hat{S}_j^\dagger \hat{S}_i, \hat{\rho}_S(t) \right\} \right) \\ &= -i \left[ \hat{H}, \hat{\rho}_S(t) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} \left( \left[ \hat{S}_i, \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_j^\dagger \right] + \left[ \hat{S}_i \hat{\rho}_S(t), \hat{S}_j^\dagger \right] \right) \end{aligned}$$

Επομένως, η χρονική εξέλιξη της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος  $\mathcal{S}$  δίνεται από την εξίσωση:

$$\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = -i \left[ \hat{H}'_S, \hat{\rho}_S(t) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} \left( \left[ \hat{S}_i, \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_j^\dagger \right] + \left[ \hat{S}_i \hat{\rho}_S(t), \hat{S}_j^\dagger \right] \right) \quad (3.6)$$

όπου  $\hat{H} = \hat{H}'_S$  είναι η διαταραγμένη Χαμιλτονιανή ("Lamb - shifted") του συστήματος και  $\hat{S}_i$  είναι τελεστές του συστήματος με τους οποίους η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης παίρνει τη διαγώνια μορφή  $\hat{H}_{int} = \sum_i \hat{S}_i \otimes \hat{E}_i$ . Η εξίσωση (3.6) ονομάζεται εξίσωση *master Lindblad*. Αν επιπλέον θέσουμε:

$$\mathcal{D}\hat{\rho}_S(t) \equiv \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} \left( \left[ \hat{S}_i, \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_j^\dagger \right] + \left[ \hat{S}_i \hat{\rho}_S(t), \hat{S}_j^\dagger \right] \right)$$

η (3.6) παίρνει τη γενική μορφή (3.4):

$$\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = \hat{\mathcal{L}} \hat{\rho}_S(t) = -i \left[ \hat{H}'_S, \hat{\rho}_S(t) \right] + \hat{\mathcal{D}} \hat{\rho}_S(t)$$

Καθώς οι συντελεστές  $a_{ij}$  είναι θετικοί, ο πίνακας  $a = [a_{ij}]$  μπορεί να διαγωνοποιηθεί με τη βοήθεια ενός μοναδιακού μετασχηματισμού  $u$ :

$$uau^\dagger = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \gamma_{N^2-1} \end{pmatrix}$$

όπου οι ιδιοτιμές  $\gamma_i$  είναι μη-αρνητικές. Εισάγοντας ένα νέο σύνολο τελεστών  $\hat{A}_k$  μέσω της σχέσης:

$$\hat{S}_i = \sum_{k=1}^{N^2-1} u_{ki} \hat{A}_k$$

καταλήγουμε στη διαγώνια μορφή της εξίσωσης master Lindblad (3.6):

$$\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = -i \left[ \hat{H}'_S, \hat{\rho}_S(t) \right] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left( \hat{A}_k \hat{\rho}_S(t) \hat{A}_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k, \hat{\rho}_S(t) \right\} \right) \quad (3.7)$$

Οι τελεστές  $\hat{A}_k$  λέγονται *τελεστές Lindblad* και είναι απλώς γραμμικοί συνδυασμοί των τελεστών του συστήματος  $\hat{S}_i$ . Αν οι τελεστές Lindblad επιλεγούν να είναι αδιάστατοι, οι συντελεστές  $\gamma_k$  θα αναπαριστούν άμεσα τους ρυθμούς αποσυνοχής, καθώς έχουν μονάδες αντίστροφες του χρόνου.

Επειδή οι τελεστές  $\hat{S}_i$  δεν είναι απαραίτητα ερμητιανοί, οι τελεστές Lindblad δεν αντιστοιχούν πάντα σε φυσικά παρατηρήσιμα μεγέθη. Αλλά αν οι τελεστές Lindblad είναι ερμητιανοί, τότε η εξίσωση (3.7) μπορεί να γραφτεί σε μια πιο συμπυκνωμένη μορφή:

$$\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = -i \left[ \hat{H}'_S, \hat{\rho}_S(t) \right] - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left[ \hat{A}_k, \left[ \hat{A}_k, \hat{\rho}_S(t) \right] \right] \quad (3.8)$$

Παρατηρούμε ότι ο όρος αποσυνοχής μηδενίζεται αν η  $\hat{\rho}_S(t)$  μετατίθεται με καθέναν από τους τελεστές Lindblad για όλους τους χρόνους  $t$ :

$$\left[ \hat{A}_k, \hat{\rho}_S(t) \right] = 0 \quad \forall k, t$$

και τότε το σύστημα εξελίσσεται μοναδιακά. Επίσης, επειδή οι τελεστές Lindblad είναι απλώς γραμμικοί συνδυασμοί των  $\hat{S}_i$ , από την παραπάνω σχέση μετάθεσης συνεπάγεται ότι:

$$\left[ \hat{S}_i, \hat{\rho}_S(t) \right] = 0 \quad \forall i, t$$

Η τελευταία σχέση είναι δίνει το κριτήριο για τις pointer καταστάσεις που είδαμε στο πρώτο κεφάλαιο. Αυτό σημαίνει ότι οι καταστάσεις του συστήματος  $\mathcal{S}$  που είναι ταυτόχρονα ιδιοκαταστάσεις όλων των τελεστών  $\hat{S}_i$  θα είναι immune στην αποσυνοχή.

Τέλος, ας δούμε ένα παράδειγμα εξίσωσης Lindblad. Στο προηγούμενο κεφάλαιο είδαμε την εξίσωση master (2.14) για αποσυνοχή λόγω σκέδασης σωματιδίων του περιβάλλοντος:

$$\frac{\partial \rho_S(x, x', t)}{\partial t} = -\frac{i}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x'^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \rho_S(x, x', t) - \Lambda (x - x')^2 \rho_S(x, x', t)$$

Η εξίσωση αυτή είναι σε μορφή Lindblad και για να το δούμε αυτό, αντικαθιστούμε στην (3.8) τα  $\hat{L} = \hat{x}$  και  $\hat{H}'_S = \hat{p}^2/2m$ :

$$\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = -\frac{i}{2m} \left[ \hat{p}^2, \hat{\rho}_S(t) \right] - \frac{1}{2} \gamma \left[ \hat{x}, \left[ \hat{x}, \hat{\rho}_S(t) \right] \right]$$

Εκφράζοντας την εξίσωση αυτή στην αναπαράσταση θέσης ( $\hat{p}^2 = -\partial^2/\partial x^2$ ), παίρνουμε:

$$\frac{\partial \rho_S(x, x', t)}{\partial t} = -\frac{i}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x'^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \rho_S(x, x', t) - \frac{\gamma}{2} (x - x')^2 \rho_S(x, x', t)$$

η οποία είναι ακριβώς η (2.14) για  $\Lambda = \gamma/2$ .



### 3.2.3 Προσέγγιση Born - Markov

Η εξίσωση master τύπου Born - Markov βασίζεται σε δύο βασικές υποθέσεις:

1. *Προσέγγιση Born*: Η αλληλεπίδραση του συστήματος με το περιβάλλον είναι αρκετά ασθενής και το περιβάλλον είναι αρκετά μεγάλο, ώστε η εξέλιξη της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του περιβάλλοντος να είναι αμελητέα συγκριτικά με την εξέλιξη της κατάστασης του συστήματος (δηλαδή να παραμένει προσεγγιστικά σταθερή για όλους τους χρόνους,  $\hat{\rho}_E(t) \approx \hat{\rho}_E$ ). Κατά συνέπεια η μήτρα πυκνότητας του συνολικού συστήματος  $\mathcal{SE}$  παραμένει για όλους τους χρόνους σε διαχωρίσιμη μορφή:

$$\hat{\rho}(t) \approx \hat{\rho}_S(t) \otimes \hat{\rho}_E \quad \forall t \geq 0$$

όπου  $\hat{\rho}_E = \hat{\rho}_E(0)$ .

2. *Προσέγγιση Markov*: Οι τυχόν κβαντικές (αύτο-)συσχετίσεις που δημιουργούνται στο περιβάλλον λόγω της αλληλεπίδρασης του με το σύστημα σβήνουν γρήγορα συγκριτικά με το χαρακτηριστικό χρονικό διάστημα στο οποίο η κατάσταση του συστήματος αλλάζει σημαντικά

$$\tau_{corr} \ll \tau_S$$

Με άλλα λόγια, η μνήμη του περιβάλλοντος δεν έχει καμία επίπτωση στην εξέλιξη του συστήματος και μπορεί να αγνοηθεί.

Με βάση τα παραπάνω, η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης  $\hat{H}_{int}$  μπορεί να γραφτεί σε διαγώνια μορφή:

$$\hat{H}_{int} = \sum_{\alpha} \hat{S}_{\alpha} \otimes \hat{E}_{\alpha}$$

όπου οι μοναδιαίοι (αλλά όχι απαραίτητα ερμητιανοί) τελεστές  $\hat{S}_{\alpha}$  δρουν αποκλειστικά στον χώρο Χίλμπερτ του συστήματος, ενώ οι  $\hat{E}_{\alpha}$  στον χώρο Χίλμπερτ του περιβάλλοντος. Αν οι τελεστές  $\hat{S}_{\alpha}$  είναι ερμητιανοί, τότε αντιστοιχούν σε φυσικές ποσότητες του συστήματος που "παρακολουθούνται" συνεχώς από το περιβάλλον. Τότε η εξίσωση master σε προσέγγιση Born - Markov είναι:

$$\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = -i \left[ \hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t) \right] - \sum_{\alpha} \left\{ \left[ \hat{S}_{\alpha}, \hat{B}_{\alpha} \hat{\rho}_S(t) \right] + \left[ \hat{\rho}_S(t) \hat{C}_{\alpha}, \hat{S}_{\alpha} \right] \right\} \quad (3.9)$$

Στην επόμενη ενότητα θα δούμε πως εξάγεται η εξίσωση αυτή και θα γίνει αμέσως ξεκάθαρη η σημασία όλων των άγνωστων όρων.

### 3.2.4 Εξαγωγή της εξίσωσης Born - Markov

Για την εξαγωγή της εξίσωσης master σε προσέγγιση Born - Markov (3.9) θα χρησιμοποιήσουμε τη θεωρία διαταραχών και για το σκοπό αυτό θα δουλέψουμε στην εικόνα αλληλεπίδρασης (στην οποία, σε αντίθεση με την εικόνα του Schrodinger, οι τελεστές είναι αυτοί που εξελίσσονται στον χρόνο και όχι η κατάσταση του συστήματος).

Η Χαμιλτονιανή του συνολικού συστήματος  $\mathcal{SE}$  γράφεται ως:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{int} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}$$

όπου  $\hat{H}_0 = \hat{H}_S + \hat{H}_E$  είναι η αδιατάρακτη (ελεύθερη) Χαμιλτονιανή του συστήματος  $\mathcal{SE}$  και η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης  $\hat{H}_{int}$  αναπαριστά τη διαταραχή. Στην εικόνα αλληλεπίδρασης λοιπόν, η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης και η μήτρα του συστήματος  $\mathcal{SE}$  είναι:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int}(t) &= e^{i\hat{H}_0 t} \hat{H}_{int} e^{-i\hat{H}_0 t} \\ \hat{\rho}^{(I)}(t) &= e^{i\hat{H}_0 t} \hat{\rho}(t) e^{-i\hat{H}_0 t} = e^{i\hat{H}_0 t} e^{-i\hat{H}t} \hat{\rho} e^{i\hat{H}t} e^{-i\hat{H}_0 t}\end{aligned}$$

Μιας και η ρητή εξάρτηση του τελεστή από το χρόνο υποδεικνύει ότι είναι εκφρασμένος στην εικόνα αλληλεπίδρασης, θα αγνοούμε τον δείκτη ( $I$ ) στους τελεστές και θα τον κρατήσουμε μόνο για τις μήτρες πυκνότητας επειδή αυτές και στις δυο εικόνες εξαρτώνται από τον χρόνο.

Η χρονική εξέλιξη της  $\hat{\rho}^{(I)}(t)$  δίνεται από την εξίσωση Liouville - von Neumann στην εικόνα αλληλεπίδρασης:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}^{(I)}(t) = -i \left[ \hat{H}_{int}(t), \hat{\rho}^{(I)}(t) \right] \quad (3.10)$$

Βλέπουμε ότι στην εικόνα αλληλεπίδρασης η χρονική εξέλιξη της συνολικής μήτρας πυκνότητας παράγεται μόνο από τη Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης και όχι τη συνολική Χαμιλτονιανή του συστήματος.

Ολοκληρώνοντας την εξίσωση (3.10) παίρνουμε:

$$\hat{\rho}^{(I)}(t) = \hat{\rho}(0) - i \int_0^t dt' \left[ \hat{H}_{int}(t'), \hat{\rho}^{(I)}(t') \right]$$

και εισάγοντας την έκφραση αυτή για την  $\hat{\rho}^{(I)}(t)$  στο δεύτερο μέλος της εξίσωσης (3.10) λαμβάνουμε:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \hat{\rho}^{(I)}(t) &= -i \left[ \hat{H}_{int}(t), \left\{ \hat{\rho}(0) - i \int_0^t dt' \left[ \hat{H}_{int}(t'), \hat{\rho}^{(I)}(t') \right] \right\} \right] \\ &= -i \left[ \hat{H}_{int}(t), \hat{\rho}(0) \right] - \int_0^t dt' \left[ \hat{H}_{int}(t), \left[ \hat{H}_{int}(t'), \hat{\rho}^{(I)}(t') \right] \right]\end{aligned}$$

Παίρνοντας το μερικό ίχνος ως προς το περιβάλλον και στα δύο μέλη της εξίσωσης αυτής και λαμβάνοντας υπόψιν ότι  $\hat{\rho}_S^{(I)}(t) = \text{Tr}_E \{ \hat{\rho}^{(I)}(t) \}$ , έχουμε:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_S^{(I)}(t) = -i \text{Tr}_E \left\{ \left[ \hat{H}_{int}(t), \hat{\rho}(0) \right] \right\} - \int_0^t dt' \text{Tr}_E \left\{ \left[ \hat{H}_{int}(t), \left[ \hat{H}_{int}(t'), \hat{\rho}^{(I)}(t') \right] \right] \right\}$$

Υπενθυμίζουμε ότι  $\text{Tr}(A + B) = \text{Tr}(A) + \text{Tr}(B)$ , κάτι που ισχύει και για το μερικό ίχνος.

Μπορούμε να υποθέσουμε χωρίς βλάβη της γενικότητας ότι:

$$\text{Tr}_E \left\{ \left[ \hat{H}_{int}(t), \hat{\rho}(0) \right] \right\} = 0$$

Η υπόθεση αυτή μας λέει ουσιαστικά ότι το σύστημα δεν είναι συζευγμένο με το περιβάλλον την αρχική στιγμή  $t = 0$ . Τότε η εξίσωση μας απλοποιείται σε:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_S^{(I)}(t) = - \int_0^t dt' \text{Tr}_E \left\{ \left[ \hat{H}_{int}(t), \left[ \hat{H}_{int}(t'), \hat{\rho}^{(I)}(t') \right] \right] \right\} \quad (3.11)$$

Όμως θέλουμε να εκφράσουμε την master εξίσωση αυτή μόνο με όρους  $\hat{\rho}_S^{(I)}(t)$  και όχι τη συνολική μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}^{(I)}(t)$  του συστήματος - περιβάλλον (να γίνει δηλαδή μια ολοκληροδιαφορική εξίσωση) και έπειτα να την κάνουμε τοπική στο χρόνο (ώστε να εξαρτάται μόνο από τη χρονική στιγμή  $t$  και όχι  $0 \leq t' \leq t$ ). Για το σκοπό αυτό θα χρησιμοποιήσουμε τις προσεγγίσεις Born και Markov.

Στην εικόνα αλληλεπίδρασης η προσέγγιση Born (ασθενής σύζευξη συστήματος - περιβάλλοντος και μεγάλο περιβάλλον σχετικά με το σύστημα) γίνεται:

$$\hat{\rho}^{(I)}(t) \approx \hat{\rho}_S^{(I)}(t) \otimes \hat{\rho}_E \quad \forall t \geq 0$$

όπου  $\hat{\rho}_E = \hat{\rho}_E(0)$ . Αυτό ισχύει διότι  $\hat{\rho}^{(I)}(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{\rho}(t) e^{-i\hat{H}_0 t}$  και η ελεύθερη Χαμιλτονιανή  $\hat{H}_0 = \hat{H}_S + \hat{H}_E$  δρα χωριστά στο σύστημα και στο περιβάλλον και επομένως δεν μπορεί να δημιουργήσει συσχετισμούς μεταξύ τους. Χρησιμοποιώντας την προσέγγιση αυτή, η εξίσωση master (3.11) γίνεται:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_S^{(I)}(t) = - \int_0^t dt' \text{Tr}_E \left\{ \left[ \hat{H}_{int}(t), \left[ \hat{H}_{int}(t'), \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \otimes \hat{\rho}_E \right] \right] \right\} \quad (3.12)$$

Αυτή η εξίσωση είναι ολοκληροδιαφορική καθώς πλέον και τα δύο μέλη της είναι εκφρασμένοι μόνο με όρους  $\hat{\rho}_S^{(I)}(t)$  (η  $\hat{\rho}_E$  είναι χρονοανεξάρτητη), και για να υπολογίσουμε την αλλαγή στην  $\hat{\rho}_S^{(I)}$  τη χρονική στιγμή  $t$ , απαιτείται η γνώση της  $\hat{\rho}_S^{(I)}$  σε όλους τους προηγούμενους χρόνους  $t' < t$ .

Για να γίνει η παραπάνω εξίσωση τοπική στο χρόνο, εφαρμόζουμε την προσέγγιση Markov. Η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης έχει τη διαγώνια μορφή  $\hat{H}_{int} = \sum_{\alpha} \hat{S}_{\alpha} \otimes \hat{E}_{\alpha}$  η οποία στην εικόνα αλληλεπίδρασης είναι:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int}(t) &= e^{i\hat{H}_0 t} \hat{H}_{int} e^{-i\hat{H}_0 t} \\ &= \sum_{\alpha} e^{i\hat{H}_S t} e^{i\hat{H}_E t} \left( \hat{S}_{\alpha} \otimes \hat{E}_{\alpha} \right) e^{-i\hat{H}_S t} e^{-i\hat{H}_E t} \\ &= \sum_{\alpha} \left( e^{i\hat{H}_S t} \hat{S}_{\alpha} e^{-i\hat{H}_S t} \right) \otimes \left( e^{i\hat{H}_E t} \hat{E}_{\alpha} e^{-i\hat{H}_E t} \right) \\ &= \sum_{\alpha} \hat{S}_{\alpha}(t) \otimes \hat{E}_{\alpha}(t) \end{aligned}$$

Εισάγουμε την  $\hat{H}_{int}(t)$  αυτή στην ολοκληροδιαφορική εξίσωση (3.12):

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_S^{(I)}(t) = - \int_0^t dt' \sum_{\alpha, \beta} \text{Tr}_E \left\{ \left[ \hat{S}_{\alpha}(t) \otimes \hat{E}_{\alpha}(t), \left[ \hat{S}_{\beta}(t') \otimes \hat{E}_{\beta}(t'), \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \otimes \hat{\rho}_E \right] \right] \right\} \quad (3.13)$$

Υπολογίζουμε πρώτα το μεταθέτη, χρησιμοποιώντας την παρακάτω σχέση:

$$[A, [B, C]] = A(BC - CB) - (BC - CB)A$$

$$\begin{aligned}
& \left[ \hat{S}_\alpha(t) \otimes \hat{E}_\alpha(t), \left[ \hat{S}_\beta(t') \otimes \hat{E}_\beta(t'), \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \otimes \hat{\rho}_\varepsilon \right] \right] = \\
& = \hat{S}_\alpha(t) \otimes \hat{E}_\alpha(t) \left\{ \hat{S}_\beta(t') \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \otimes \hat{E}_\beta(t') \hat{\rho}_\varepsilon - \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\beta(t') \otimes \hat{\rho}_\varepsilon \hat{E}_\beta(t') \right\} \\
& - \left\{ \hat{S}_\beta(t') \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \otimes \hat{E}_\beta(t') \hat{\rho}_\varepsilon - \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\beta(t') \otimes \hat{\rho}_\varepsilon \hat{E}_\beta(t') \right\} \hat{S}_\alpha(t) \otimes \hat{E}_\alpha(t) \\
& = \hat{S}_\alpha(t) \hat{S}_\beta(t') \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \otimes \hat{E}_\alpha(t) \hat{E}_\beta(t') \hat{\rho}_\varepsilon - \hat{S}_\alpha(t) \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\beta(t') \otimes \hat{E}_\alpha(t) \hat{\rho}_\varepsilon \hat{E}_\beta(t') \\
& - \hat{S}_\beta(t') \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\alpha(t) \otimes \hat{E}_\beta(t') \hat{\rho}_\varepsilon \hat{E}_\alpha(t) + \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\beta(t') \hat{S}_\alpha(t) \otimes \hat{\rho}_\varepsilon \hat{E}_\beta(t') \hat{E}_\alpha(t)
\end{aligned}$$

Οπότε το μερικό ίχνος  $\text{Tr}_\varepsilon$  της τελευταίας σχέσης είναι:

$$\begin{aligned}
& \text{Tr}_\varepsilon \left\{ \left[ \hat{S}_\alpha(t) \otimes \hat{E}_\alpha(t), \left[ \hat{S}_\beta(t') \otimes \hat{E}_\beta(t'), \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \otimes \hat{\rho}_\varepsilon \right] \right] \right\} \\
& = \hat{S}_\alpha(t) \hat{S}_\beta(t') \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \text{Tr} \left\{ \hat{E}_\alpha(t) \hat{E}_\beta(t') \hat{\rho}_\varepsilon \right\} - \hat{S}_\alpha(t) \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\beta(t') \text{Tr} \left\{ \hat{E}_\alpha(t) \hat{\rho}_\varepsilon \hat{E}_\beta(t') \right\} \\
& - \hat{S}_\beta(t') \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\alpha(t) \text{Tr} \left\{ \hat{E}_\beta(t') \hat{\rho}_\varepsilon \hat{E}_\alpha(t) \right\} + \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\beta(t') \hat{S}_\alpha(t) \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_\varepsilon \hat{E}_\beta(t') \hat{E}_\alpha(t) \right\}
\end{aligned}$$

Από την ιδιότητα της κυκλικότητας του ίχνους έχουμε ότι:

$$\begin{aligned}
& \text{Tr} \left\{ \hat{E}_\beta(t') \hat{\rho}_\varepsilon \hat{E}_\alpha(t) \right\} = \text{Tr} \left\{ \hat{E}_\alpha(t) \hat{E}_\beta(t') \hat{\rho}_\varepsilon \right\} \\
& \text{Tr} \left\{ \hat{E}_\alpha(t) \hat{\rho}_\varepsilon \hat{E}_\beta(t') \right\} = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_\varepsilon \hat{E}_\beta(t') \hat{E}_\alpha(t) \right\} = \text{Tr} \left\{ \hat{E}_\beta(t') \hat{E}_\alpha(t) \hat{\rho}_\varepsilon \right\}
\end{aligned}$$

Θέτουμε:

$$\mathcal{C}_{\alpha\beta}(t, t') \equiv \text{Tr} \left\{ \hat{E}_\alpha(t) \hat{E}_\beta(t') \hat{\rho}_\varepsilon \right\} = \left\langle \hat{E}_\alpha(t) \hat{E}_\beta(t') \right\rangle_{\rho_\varepsilon}$$

και κατά συνέπεια:

$$\mathcal{C}_{\beta\alpha}(t, t') \equiv \text{Tr} \left\{ \hat{E}_\beta(t') \hat{E}_\alpha(t) \hat{\rho}_\varepsilon \right\} = \left\langle \hat{E}_\beta(t') \hat{E}_\alpha(t) \right\rangle_{\rho_\varepsilon}$$

Υποθέτοντας ότι το περιβάλλον είναι στατικό (σε ισορροπία),  $[\bar{H}_\varepsilon, \rho_\varepsilon] = 0$ , μπορούμε να γράψουμε:

$$\mathcal{C}_{\alpha\beta}(t, t') = \mathcal{C}_{\alpha\beta}(t - t') = \text{Tr} \left\{ \hat{E}_\alpha(t - t') \hat{E}_\beta \hat{\rho}_\varepsilon \right\}$$

$$\mathcal{C}_{\beta\alpha}(t, t') = \mathcal{C}_{\beta\alpha}(t' - t) = \text{Tr} \left\{ \hat{E}_\beta(t' - t) \hat{E}_\alpha \hat{\rho}_\varepsilon \right\}$$

Οι συναρτήσεις  $\mathcal{C}_{\alpha\beta}(t - t')$  λέγονται περιβαλλοντικές συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης και μετρούν το βαθμό της κβαντικής συσχέτισης ανάμεσα στα αποτελέσματα των “μετρήσεων” (μέσω αλληλεπιδράσεων του περιβάλλοντος με το σύστημα  $\mathcal{S}$ ) ενός φυσικού μεγέθους  $\hat{E}$  του περιβάλλοντος τη χρονική στιγμή  $t'$  και μετά από χρόνο  $t - t'$ . Επομένως

$$\begin{aligned}
& \text{Tr}_\varepsilon \left\{ \left[ \hat{S}_\alpha(t) \otimes \hat{E}_\alpha(t), \left[ \hat{S}_\beta(t') \otimes \hat{E}_\beta(t'), \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \otimes \hat{\rho}_\varepsilon \right] \right] \right\} \\
& = \mathcal{C}_{\alpha\beta}(t - t') \left[ \hat{S}_\alpha(t) \hat{S}_\beta(t') \hat{\rho}_S^{(I)}(t') - \hat{S}_\beta(t') \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\alpha(t) \right] \\
& + \mathcal{C}_{\beta\alpha}(t' - t) \left[ \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\beta(t') \hat{S}_\alpha(t) - \hat{S}_\alpha(t) \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\beta(t') \right]
\end{aligned}$$

και η εξίσωση (3.13) γίνεται:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_S^{(I)}(t) = & - \int_0^t dt' \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \mathcal{C}_{\alpha\beta}(t-t') \left[ \hat{S}_\alpha(t) \hat{S}_\beta(t') \hat{\rho}_S^{(I)}(t') - \hat{S}_\beta(t') \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\alpha(t) \right] \right. \\ & \left. + \mathcal{C}_{\beta\alpha}(t'-t) \left[ \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\beta(t') \hat{S}_\alpha(t) - \hat{S}_\alpha(t) \hat{\rho}_S^{(I)}(t') \hat{S}_\beta(t') \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Ωστόσο, στην προσέγγιση Markov ( $\tau_{corr} \ll \tau_S$ ) οι κβαντικές αυτοσυσχετίσεις ανάμεσα στα τμήματα του περιβάλλοντος καταστρέφονται πολύ γρήγορα συγκριτικά με τη χαρακτηριστική χρονική κλίμακα της εξέλιξης του συστήματος  $\tau_S$  (στην οποία η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}_S^{(I)}(t)$  αλλάζει σημαντικά). Αυτό σημαίνει ότι οι συναρτήσεις αυτοσυσχετίσης  $\mathcal{C}_{\alpha\beta}(t-t')$  έχουν προσεγγιστικά μη μηδενικές τιμές μόνο γύρω από το  $\tau \equiv t-t' = 0$  και για μεγαλύτερους χρόνους  $t \gg t'$  μηδενίζονται. Αυτό έχει δύο επιπτώσεις: Πρώτον, μπορούμε να αντικαταστήσουμε την  $\hat{\rho}_S^{(I)}(t')$  με την  $\hat{\rho}_S^{(I)}(t)$  καθώς στην περιοχή  $\tau = 0$  η κατάσταση του συστήματος δεν αλλάζει σημαντικά (τότε η εξίσωση που προκύπτει ονομάζεται *Redfield εξίσωση*). Δεύτερον, για χρόνους  $t \gg \tau_{corr}$  μπορούμε να πάρουμε το κάτω όριο του ολοκληρώματος να είναι  $-\infty$  καθώς για  $t \gg t'$  το ολοκλήρωμα μηδενίζεται. Έτσι η εξίσωση master (3.14) γίνεται τοπική στο χρόνο:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_S^{(I)}(t) = & - \int_0^\infty d\tau \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \mathcal{C}_{\alpha\beta}(\tau) \left[ \hat{S}_\alpha(t) \hat{S}_\beta(t-\tau) \hat{\rho}_S^{(I)}(t) - \hat{S}_\beta(t-\tau) \hat{\rho}_S^{(I)}(t) \hat{S}_\alpha(t) \right] \right. \\ & \left. + \mathcal{C}_{\beta\alpha}(-\tau) \left[ \hat{\rho}_S^{(I)}(t) \hat{S}_\beta(t-\tau) \hat{S}_\alpha(t) - \hat{S}_\alpha(t) \hat{\rho}_S^{(I)}(t) \hat{S}_\beta(t-\tau) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Αυτό είναι το τελικό μας αποτέλεσμα για την εξίσωση master σε προσέγγιση Born - Markov. Ωστόσο θα θέλαμε να την εκφράσουμε στην εικόνα Schrodinger. Έχουμε ότι:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_S(t) &= e^{-i\hat{H}_S t} \hat{\rho}_S^{(I)}(t) e^{i\hat{H}_S t} \\ \frac{d}{dt} \hat{\rho}_S(t) &= -i \left[ \hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t) \right] + e^{-i\hat{H}_S t} \left( \frac{d}{dt} \hat{\rho}_S^{(I)}(t) \right) e^{i\hat{H}_S t} \end{aligned}$$

Θέλουμε τώρα να υπολογίσουμε το δεύτερο όρο στο δεύτερο μέλος της παραπάνω εξίσωσης. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιούμε την εξίσωση (3.15). Οπότε έχουμε να υπολογίσουμε τα παρακάτω:

$$\begin{aligned} & e^{-i\hat{H}_S t} \hat{S}_\alpha(t) \hat{S}_\beta(t-\tau) \hat{\rho}_S^{(I)}(t) e^{i\hat{H}_S t} \\ &= \left[ e^{-i\hat{H}_S t} \hat{S}_\alpha(t) e^{i\hat{H}_S t} \right] \left[ e^{-i\hat{H}_S t} \hat{S}_\beta(t-\tau) e^{i\hat{H}_S t} \right] \left[ e^{-i\hat{H}_S t} \hat{\rho}_S^{(I)}(t) e^{i\hat{H}_S t} \right] \\ &= \hat{S}_\alpha \left( e^{-i\hat{H}_S \tau} \hat{S}_\beta e^{i\hat{H}_S \tau} \right) \hat{\rho}_S(t) \\ &= \hat{S}_\alpha \hat{S}_\beta(-\tau) \hat{\rho}_S(t) \end{aligned}$$

Ομοίως βρίσκουμε και τα υπόλοιπα:

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{H}_S t} \hat{S}_\beta(t-\tau) \hat{\rho}_S^{(I)}(t) \hat{S}_\alpha(t) e^{i\hat{H}_S t} &= \hat{S}_\beta(-\tau) \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_\alpha \\ e^{-i\hat{H}_S t} \hat{\rho}_S^{(I)}(t) \hat{S}_\beta(t-\tau) \hat{S}_\alpha(t) e^{i\hat{H}_S t} &= \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_\beta(-\tau) \hat{S}_\alpha \end{aligned}$$

$$e^{-i\hat{H}_S t} \hat{S}_\alpha(t) \hat{\rho}_S^{(I)}(t) \hat{S}_\beta(t - \tau) e^{i\hat{H}_S t} = \hat{S}_\alpha \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_\beta(-\tau)$$

Επομένως

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_S(t) = & -i \left[ \hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t) \right] - \int_0^\infty d\tau \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \mathcal{C}_{\alpha\beta}(\tau) \left[ \hat{S}_\alpha, \hat{S}_\beta(-\tau) \hat{\rho}_S(t) \right] \right. \\ & \left. + \mathcal{C}_{\beta\alpha}(-\tau) \left[ \hat{\rho}_S(t) \hat{S}_\beta(-\tau), \hat{S}_\alpha \right] \right\} \end{aligned}$$

Θέτουμε:

$$\begin{aligned} \hat{B}_\alpha &\equiv \int_0^\infty d\tau \sum_\beta \mathcal{C}_{\alpha\beta}(\tau) \hat{S}_\beta(-\tau) \\ \hat{C}_\alpha &\equiv \int_0^\infty d\tau \sum_\beta \mathcal{C}_{\beta\alpha}(-\tau) \hat{S}_\beta(-\tau) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Επομένως η εξίσωση μας γίνεται:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_S(t) = -i \left[ \hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t) \right] - \sum_\alpha \left\{ \left[ \hat{S}_\alpha, \hat{B}_\alpha \hat{\rho}_S(t) \right] + \left[ \hat{\rho}_S(t) \hat{C}_\alpha, \hat{S}_\alpha \right] \right\}$$

Αυτή είναι ακριβώς η εξίσωση master σε προσέγγιση Born - Markov που είδαμε στο (3.9). Η εξίσωση αυτή σε πολλές περιπτώσεις απλοποιείται σημαντικά. Για παράδειγμα, στις περισσότερες περιπτώσεις θα υπάρχει μόνο ένας τελεστής συστήματος  $\hat{S}$  με αποτέλεσμα η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης να απλοποιείται σε  $\hat{H}_{int} = \hat{S} \otimes \hat{E}$ . Επίσης, η χρονική εξέλιξη των τελεστών  $\hat{S}_\alpha(\tau)$  και  $\hat{E}_\alpha(\tau)$  είναι συνήθως απλή, κάτι που διευκολύνει κατά πολύ τον υπολογισμό των  $\hat{B}_\alpha$  και  $\hat{C}_\alpha$ . Θα τα δούμε αυτά αργότερα όταν εφαρμόσουμε την εξίσωση Born - Markov σε συγκεκριμένα παραδείγματα.

Τέλος να αναφέρουμε ότι η εξίσωση master Born - Markov που μόλις εξάγαμε δεν είναι σε μορφή Lindblad (3.6), δηλαδή η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας που προκύπτει από την εξίσωση αυτή, δεν θα ικανοποιεί εν γένει τη συνθήκη θετικότητας. Ωστόσο είναι δυνατόν να την φέρουμε σε μορφή Lindblad χρησιμοποιώντας την προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (*rotating wave approximation*). Η προσέγγιση αυτή χρησιμοποιείται συνήθως στην κβαντική οπτική όταν η τυπική χρονική κλίμακα  $\tau_S$  για την εσωτερική εξέλιξη του συστήματος  $\mathcal{S}$  είναι μικρή συγκριτικά με την χρονική κλίμακα  $\tau_R$  (relaxation time) στην οποία το σύστημα παρουσιάζει μια αισθητή αλλαγή. Η διαδικασία αυτή περιγράφεται αναλυτικά στο βιβλίο [3], όπου η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης στην εικόνα αλληλεπίδρασης παίρνει τη μορφή:

$$\hat{H}_{int}(t) = \sum_{\alpha, \omega} e^{-i\omega t} \hat{S}_\alpha(\omega) \otimes \hat{E}_\alpha(t)$$

όπου  $\omega = \epsilon' - \epsilon$ , με  $\epsilon$  να είναι η ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής  $\hat{H}_S$ . Έπειτα ακολουθεί η ίδια διαδικασία που κάναμε εδώ για την εξαγωγή της εξίσωσης (3.6). Μετά στην εξίσωση που θα προκύψει, οι όροι με  $\omega' \neq \omega$  αγνοούνται λόγω της προσέγγισης περιστρεφόμενου κύματος. Τέλος, η διαγωνοποίηση δίνει την ζητούμενη μορφή Lindblad της εξίσωσης master Born - Markov.

### 3.3 Μη-Μαρκοβιανές κβαντικές διαδικασίες

Στα προηγούμενα είδαμε Μαρκοβιανές εξισώσεις master οι οποίες ισχύουν μόνο στην περίπτωση που τα φαινόμενα μνήμης του περιβάλλοντος μπορούν να αγνοηθούν. Όμως σε πολλές περιπτώσεις (πχ. σε περιβάλλον χαμηλής θερμοκρασίας) αυτή η υπόθεση δεν ικανοποιείται και θα υπάρχει έντονη εξάρτηση της εξέλιξης του συστήματος από την κατάσταση του στους παρελθοντικούς χρόνους. Τέτοιες μη-Μαρκοβιανές εξισώσεις master δεν είναι τοπικές στον χρόνο και γενικά είναι δύσκολο να επιλυθούν αναλυτικά.

Ωστόσο υπάρχουν πολλές άλλες περιπτώσεις που οι μη-Μαρκοβιανές εξισώσεις master είναι τοπικές στον χρόνο και έχουν τη μορφή των Μαρκοβιανών διαφορικών εξισώσεων:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_S(t) = \hat{K}(t) \hat{\rho}_S(t) \quad (3.17)$$

Όμως σε αντίθεση με τις Μαρκοβιανές εξισώσεις, ο υπερτελεστής  $\hat{K}(t)$  εξαρτάται ρητά από τον χρόνο (αλλά όχι από προηγούμενους χρόνους  $t' < t$ , κάτι που καθιστά την εξίσωση αυτή τοπική στον χρόνο). Στο επόμενο κεφάλαιο θα δούμε μια περίπτωση τέτοιας τοπικής στον χρόνο μη-Μαρκοβιανής εξίσωσης master (κβαντική κίνηση Brown).





# 4

## Κανονικά μοντέλα αποσυννοχής

Στη φύση υπάρχουν αμέτρητα φυσικά συστήματα για τα οποία η αποσυννοχή παίζει σημαντικό ρόλο. Ευτυχώς όμως στις περισσότερες περιπτώσεις δεν χρειάζεται κάθε φορά να φτιάχνουμε από την αρχή ένα καινούργιο μοντέλο για κάθε διαφορετικό σύστημα ώστε να προσδιορίσουμε τη δυναμική του. Υπάρχει ένα μικρό σύνολο *κανονικών μοντέλων* (*canonical models*) στα οποία μπορούν να αναχθούν τα περισσότερα φυσικά συστήματα που αλληλεπιδρούν με περιβάλλον. Συνολικά υπάρχουν τέσσερα τέτοια κανονικά μοντέλα αποσυννοχής στα οποία η κατάλληλη επιλογή παραμέτρων δίνει τη δυναμική του συστήματος που μας ενδιαφέρει.

Σε πολλές περιπτώσεις η δυναμική του κεντρικού συστήματος μπορεί να περιγραφεί με μια ή δύο συντεταγμένες που μας ενδιαφέρουν, ακόμα και όταν η μικροσκοπική δυναμική του συστήματος είναι αρκετά πολυπλοκότερη. Αυτές οι συντεταγμένες μπορούν να είναι είτε συνεχείς είτε διακριτές. Στην περίπτωση *συνεχών συντεταγμένων*, για τη μοντελοποίηση του κεντρικού συστήματος επιλέγεται μια σημειακή μάζα, με συντεταγμένες  $\hat{X}$  και  $\hat{P}$  στον χώρο των φάσεων, κινούμενη σε κάποιο δυναμικό  $V(\hat{X})$  (πχ. του αρμονικού ταλαντωτή,  $V(\hat{X}) = M\Omega\hat{X}^2/2$ ). Στην περίπτωση των *διακριτών συντεταγμένων*, το κεντρικό σύστημα μπορεί προσεγγιστικά να θεωρηθεί ως σύστημα δύο επιπέδων και να μοντελοποιηθεί με ένα σωματίδιο σπιν-1/2.

Όπως και για το κεντρικό σύστημα, έτσι και για το περιβάλλον διακρίνουμε δύο περιπτώσεις: *περιβάλλον από αρμονικούς ταλαντωτές* και *περιβάλλον από σωματίδια με σπιν-1/2*. Τα περιβάλλοντα που αποτελούνται από αρμονικούς ταλαντωτές παίζουν σημαντικό ρόλο στην μοντελοποίηση της αποσυννοχής λόγω της γενικότητάς τους. Τέτοια περιβάλλοντα αντιστοιχούν στην περίπτωση μη-εντοπισμένων κανονικών τρόπων ταλάντωσης (μποζονικών πεδίων). Μάλιστα έχει αποδειχτεί ([6], [9]) ότι η αλληλεπίδραση με οποιοδήποτε περιβάλλον μπορεί να απεικονιστεί σε σύστημα γραμμικά συζευγμένο με ένα περιβάλλον από αρμονικούς ταλαντωτές, σε περίπτωση που η αλληλεπίδραση είναι αρκετά ασθενής και η θεωρία διαταραχών δεύτερης τάξης μπορεί να εφαρμοστεί. Από την άλλη, τα σωματίδια με σπιν-1/2 είναι συνήθως κατάλληλα για περιβάλλοντα σε συνθήκες πολύ χαμηλής θερμοκρασίας που επιτυγχάνονται στα εργαστήρια και αντιστοιχούν στην

περίπτωση καλά εντοπισμένων κανονικών τρόπων ταλάντωσης του περιβάλλοντος.

## 4.1 Μοντέλο κβαντικής κίνησης Brown

Η κβαντική κίνηση Brown είναι ένα από τα πιο σημαντικά μοντέλα αποσυνοχής. Το μοντέλο αυτό αποτελείται από ένα σωματίδιο, κινούμενο σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή μιας χωρικής διάστασης, που αλληλεπιδρά γραμμικά με ένα περιβάλλον από ανεξάρτητους αρμονικούς ταλαντωτές σε θερμική ισορροπία σε θερμοκρασία  $T$ .

### 4.1.1 Εξαγωγή της εξίσωσης Born - Markov για την κβαντική κίνηση Brown

Κατά τα γνωστά, η Χαμιλτονιανή του συνολικού συστήματος είναι της μορφής  $\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{int}$ . Προς το παρόν δεν θα μας απασχολήσει η Χαμιλτονιανή του συστήματος  $S$  (θα τη συμπεριλάβουμε στην επόμενη ενότητα). Η Χαμιλτονιανή του περιβάλλοντος περιγράφει μια συλλογή ανεξάρτητων αρμονικών ταλαντωτών, οπότε θα είναι:

$$\hat{H}_E = \sum_i \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \hat{q}_i^2 \right)$$

όπου  $m_i$  και  $\omega_i$  είναι η μάζα και η φυσική συχνότητα αντίστοιχα, του  $i$ -οστού αρμονικού ταλαντωτή του περιβάλλοντος. Τα  $\hat{q}_i$  και  $\hat{p}_i$  είναι οι κανονικοί τελεστές θέσης και ορμής για τον κάθε ταλαντωτή.

Υποθέτουμε ότι η αλληλεπίδραση μεταξύ του συστήματος και του περιβάλλοντος είναι τέτοια ώστε ο τελεστής θέσης  $\hat{X}$  του συστήματος (σημειακού σωματιδίου) είναι συζευγμένος γραμμικά με τους τελεστές θέσης  $\hat{q}_i$  των αρμονικών ταλαντωτών του περιβάλλοντος, με σταθερές σύζευξης  $c_i$ . Το μοντέλο αυτό είναι γνωστό ως "γραμμική κβαντική κίνηση Brown":

$$\hat{H}_{int} = \hat{X} \otimes \sum_i c_i \hat{q}_i \equiv \hat{X} \otimes \hat{E}$$

Όπως είδαμε στο πρώτο κεφάλαιο, η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης τέτοια μορφής περιγράφει τη συνεχή "παρακολούθηση" του φυσικού μεγέθους του συστήματος  $S$  που αντιστοιχεί στον τελεστή  $\hat{X}$ , δηλαδή της θέσης του συστήματος. Επομένως η αλληλεπίδραση της μορφής αυτής οδηγεί στην αποσυνοχή του συστήματος στη βάση της θέσης.

Υπολογίζουμε τώρα την συνάρτηση της περιβαλλοντικής αυτοσυσχέτισης που ορίσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο:

$$C(\tau) = \left\langle \hat{E}(\tau) \hat{E} \right\rangle_{\rho_E} = \sum_{i,j} c_i c_j \langle \hat{q}_i(\tau) \hat{q}_j \rangle_{\rho_E} = \sum_i c_i^2 \langle \hat{q}_i(\tau) \hat{q}_i \rangle_{\rho_E}$$

Οι όροι για  $i \neq j$  μηδενίζονται επειδή οι ταλαντωτές δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους και επομένως δεν δημιουργούνται συσχετισμοί ανάμεσα τους. Δηλαδή

$$\langle \hat{q}_i(\tau) \hat{q}_j \rangle_{\rho_E} = \langle \hat{q}_i(\tau) \rangle_{\rho_E} \langle \hat{q}_j \rangle_{\rho_E} = 0$$

καθώς η αναμενόμενη τιμή του τελεστή θέσης του αρμονικού ταλαντωτή είναι μηδέν.

Εκφράζουμε τους τελεστές θέσης  $\hat{q}_i$  μέσω των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής  $\hat{a}_i^\dagger$  και  $\hat{a}_i$ :

$$\hat{q}_i = \sqrt{\frac{1}{2m_i\omega_i}} (\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger)$$

Στην εικόνα αλληλεπίδρασης είναι:

$$\hat{q}_i(\tau) = e^{i\hat{H}_E\tau} \hat{q}_i e^{-i\hat{H}_E\tau} = \sqrt{\frac{1}{2m_i\omega_i}} [\hat{a}_i(\tau) + \hat{a}_i^\dagger(\tau)] \quad (4.1)$$

όπου

$$\hat{a}_i(\tau) = e^{i\hat{H}_E\tau} \hat{a}_i e^{-i\hat{H}_E\tau}$$

$$\hat{a}_i^\dagger(\tau) = e^{i\hat{H}_E\tau} \hat{a}_i^\dagger e^{-i\hat{H}_E\tau}$$

Η χρονική παράγωγος του τελεστή  $\hat{a}_i(\tau)$  είναι:

$$\frac{d\hat{a}_i(\tau)}{d\tau} = (i\hat{H}_E) e^{i\hat{H}_E\tau} \hat{a}_i e^{-i\hat{H}_E\tau} + e^{i\hat{H}_E\tau} \hat{a}_i (-i\hat{H}_E) e^{-i\hat{H}_E\tau} = ie^{i\hat{H}_E\tau} [\hat{H}_E, \hat{a}_i] e^{-i\hat{H}_E\tau}$$

Η Χαμιλτονιανή  $\hat{H}_E$  μπορεί επίσης να γραφτεί με όρους τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής:<sup>1</sup>

$$\hat{H}_E = \sum_i \omega_i \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right)$$

Επομένως

$$[\hat{H}_E, \hat{a}_i] = \sum_j \omega_j [\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_i] = \sum_j \omega_j \delta_{ij} (-\hat{a}_i) = -\omega_i \hat{a}_i$$

$$\frac{d\hat{a}_i(\tau)}{d\tau} = -i\omega_i e^{i\hat{H}_E\tau} \hat{a}_i e^{-i\hat{H}_E\tau} = -i\omega_i \hat{a}_i(\tau)$$

Ολοκληρώνοντας παίρνουμε:

$$\hat{a}_i(\tau) = e^{-i\omega_i\tau} \hat{a}_i \quad (4.2)$$

$$\hat{a}_i^\dagger(\tau) = e^{i\omega_i\tau} \hat{a}_i^\dagger \quad (4.3)$$

Επομένως οι τελεστές θέσεις στην εικόνα αλληλεπίδρασης (4.1) γίνονται:

$$\hat{q}_i(\tau) = \sqrt{\frac{1}{2m_i\omega_i}} (\hat{a}_i e^{-i\omega_i\tau} + \hat{a}_i^\dagger e^{i\omega_i\tau}) \quad (4.4)$$

Με την παραπάνω έκφραση για τους τελεστές θέσεις υπολογίζουμε τη μέση τιμή:

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}_i(\tau) \hat{q}_i \rangle_{\hat{\rho}_E} &= \frac{1}{2m_i\omega_i} \left\langle \left( \hat{a}_i e^{-i\omega_i\tau} + \hat{a}_i^\dagger e^{i\omega_i\tau} \right) \left( \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \right) \right\rangle_{\hat{\rho}_E} \\ &= \frac{1}{2m_i\omega_i} \left( \left\langle \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \right\rangle_{\hat{\rho}_E} e^{-i\omega_i\tau} + \left\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \right\rangle_{\hat{\rho}_E} e^{i\omega_i\tau} \right) \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Οι τελεστές ορμής είναι  $\hat{p}_i = i\sqrt{\frac{m_i\omega_i}{2}} (\hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i)$ , οπότε  $\hat{H}_E = \sum_i \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2 \hat{q}_i^2 \right) = \sum_i \frac{\omega_i}{4} \left[ -(\hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i)^2 + (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i)^2 \right] = \sum_i \frac{\omega_i}{2} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger) = \sum_i \omega_i \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right)$ , καθώς  $[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] = 1 \Rightarrow \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger = 2\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + 1$

όπου οι μέσες τιμές  $\langle \hat{a}_i^2 \rangle_{\hat{\rho}_E} = 0$  και  $\langle \hat{a}_i^{\dagger 2} \rangle_{\hat{\rho}_E} = 0$  μηδενίζονται επειδή οι καταστάσεις του περιβάλλοντος είναι ορθογώνιες. Η ποσότητα  $N_i = \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle_{\hat{\rho}_E}$  είναι απλώς ο μέσος αριθμός κατάληψης του  $i$ -οστού ταλαντωτή του περιβάλλοντος, και λόγω της υπόθεσης ότι το περιβάλλον είναι σε θερμική ισορροπία, έχουμε:

$$N_i \equiv N_i(T) = \frac{1}{e^{\omega_i/k_B T} - 1}$$

Οπότε

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}_i(\tau) \hat{q}_i \rangle_{\hat{\rho}_E} &= \frac{1}{2m_i\omega_i} \{ [1 + N_i(T)] e^{-i\omega_i\tau} + N_i(T) e^{i\omega_i\tau} \} \\ &= \frac{1}{2m_i\omega_i} \{ [1 + 2N_i(T)] \cos(\omega_i\tau) - i \sin(\omega_i\tau) \} \end{aligned}$$

Όμως

$$1 + 2N_i(T) = 1 + \frac{2}{e^{\omega_i/k_B T} - 1} = \frac{e^{\omega_i/k_B T} + 1}{e^{\omega_i/k_B T} - 1} = \coth\left(\frac{\omega_i}{2k_B T}\right)$$

Επομένως, η συνάρτηση περιβαλλοντικής αυτοσυσχέτισης γίνεται:

$$\mathcal{C}(\tau) = \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i\omega_i} \left\{ \coth\left(\frac{\omega_i}{2k_B T}\right) \cos(\omega_i\tau) - i \sin(\omega_i\tau) \right\} \equiv \nu(\tau) - i\eta(\tau)$$

όπου θέσαμε τις συναρτήσεις:

$$\begin{aligned} \nu(\tau) &= \frac{1}{2} \sum_i c_i^2 \langle \{\hat{q}_i(\tau), \hat{q}_i\} \rangle_{\hat{\rho}_E} = \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i\omega_i} \coth\left(\frac{\omega_i}{2k_B T}\right) \cos(\omega_i\tau) \\ &\equiv \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\omega}{2k_B T}\right) \cos(\omega\tau) \\ \eta(\tau) &= \frac{i}{2} \sum_i c_i^2 \langle [\hat{q}_i(\tau), \hat{q}_i] \rangle_{\hat{\rho}_E} = \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i\omega_i} \sin(\omega_i\tau) \\ &\equiv \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin(\omega\tau) \end{aligned}$$

Η πρώτη συνάρτηση είναι γνωστή ως *noise kernel* ενώ η δεύτερη ως *dissipation kernel*. Η συνάρτηση  $J(\omega)$  ορίζεται ως:

$$J(\omega) \equiv \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i\omega_i} \delta(\omega - \omega_i) \quad (4.5)$$

και ονομάζεται *φασματική πυκνότητα* (spectral density) του περιβάλλοντος.

Στο επόμενο βήμα υπολογίζουμε τους τελεστές  $\hat{B}$  και  $\hat{C}$  που είδαμε στο (3.16):

$$\begin{aligned} \hat{B}_\alpha &= \int_0^\infty d\tau \mathcal{C}(\tau) \hat{X}(-\tau) \\ \hat{C}_\alpha &= \int_0^\infty d\tau \mathcal{C}(-\tau) \hat{X}(-\tau) \end{aligned}$$

όπου  $\hat{X}(\tau) = e^{i\hat{H}_S\tau} \hat{X} e^{-i\hat{H}_S\tau}$ . Εισάγοντας τους τελεστές αυτούς στη γενική έκφραση για την εξίσωση master Born - Markov (3.9), παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} &= -i [\hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t)] - \int_0^\infty d\tau \left\{ \mathcal{C}(\tau) [\hat{X}, \hat{X}(-\tau)\hat{\rho}_S(t)] + \mathcal{C}(-\tau) [\hat{\rho}_S(t)\hat{X}(-\tau), \hat{X}] \right\} \\ &= -i [\hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t)] - \int_0^\infty d\tau \left\{ \nu(\tau) [\hat{X}, [\hat{X}(-\tau), \hat{\rho}_S(t)]] - i\eta(\tau) [\hat{X}, \{\hat{X}(-\tau), \hat{\rho}_S(t)\}] \right\} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Παρατηρούμε ότι η αποσυνολή (και το dissipation) περιγράφεται πλήρως από τα ολοκληρώματα των noise kernel και dissipation kernel πολλαπλασιασμένων με γινόμενα των τελεστών θέσης του συστήματος.

#### 4.1.2 Κεντρικό σύστημα - αρμονικός ταλαντωτής

Υποθέτουμε ότι το κεντρικό σύστημά μας είναι ένας αρμονικός ταλαντωτής με Χαμιλτονιανή

$$\hat{H}_S = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2 \hat{X}^2$$

Ο τελεστής θέσης του συστήματος στην εικόνα αλληλεπίδρασης, κατ' αναλογία με τη σχέση (4.4), είναι:

$$\begin{aligned} \hat{X}(\tau) &= \sqrt{\frac{1}{2M\Omega}} \left( \hat{A} e^{-i\Omega\tau} + \hat{A}^\dagger e^{i\Omega\tau} \right) \\ &= \sqrt{\frac{1}{2M\Omega}} \left[ (\hat{A} + \hat{A}^\dagger) \cos(\Omega\tau) + (\hat{A}^\dagger - \hat{A}) i \sin(\Omega\tau) \right] \\ &= \hat{X} \cos(\Omega\tau) + \frac{1}{M\Omega} \hat{P} \sin(\Omega\tau) \end{aligned} \quad (4.7)$$

όπου οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής είναι:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \sqrt{\frac{M\Omega}{2}} \left( \hat{X} + \frac{i}{M\Omega} \hat{P} \right) \\ \hat{A}^\dagger &= \sqrt{\frac{M\Omega}{2}} \left( \hat{X} - \frac{i}{M\Omega} \hat{P} \right) \end{aligned}$$

Εισάγοντας την έκφραση αυτή για το  $\hat{X}(\tau)$  στην εξίσωση (4.6) παίρνουμε την εξίσωση master Born - Markov που περιγράφει τη δυναμική ενός αρμονικού ταλαντωτή ασθενώς συζευγμένου με θερμικό περιβάλλον από αρμονικούς ταλαντωτές:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} &= -i [\hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t)] - \int_0^\infty d\tau \left\{ \nu(\tau) \cos(\Omega\tau) [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{\rho}_S(t)]] \right. \\ &\quad - \frac{1}{M\Omega} \nu(\tau) \sin(\Omega\tau) [\hat{X}, [\hat{P}, \hat{\rho}_S(t)]] - i\eta(\tau) \cos(\Omega\tau) [\hat{X}^2, \hat{\rho}_S(t)] \\ &\quad \left. + \frac{i}{M\Omega} \eta(\tau) \sin(\Omega\tau) [\hat{X}, \{\hat{P}, \hat{\rho}_S(t)\}] \right\} \end{aligned}$$

Θέτουμε:

$$\begin{aligned}
\tilde{\Omega}^2 &\equiv -\frac{2}{M} \int_0^\infty d\tau \eta(\tau) \cos(\Omega\tau) \\
\gamma &\equiv \frac{1}{M\Omega} \int_0^\infty d\tau \eta(\tau) \sin(\Omega\tau) \\
D &\equiv \int_0^\infty d\tau \nu(\tau) \cos(\Omega\tau) \\
f &\equiv -\frac{1}{M\Omega} \int_0^\infty d\tau \nu(\tau) \sin(\Omega\tau)
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Αυτό μας επιτρέπει να γράψουμε την εξίσωση master ως:

$$\begin{aligned}
\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} &= -i \left[ \hat{H}_S + \frac{1}{2} M \tilde{\Omega}^2 \hat{X}^2, \hat{\rho}_S(t) \right] - i\gamma \left[ \hat{X}, \left\{ \hat{P}, \hat{\rho}_S(t) \right\} \right] \\
&\quad - D \left[ \hat{X}, \left[ \hat{X}, \hat{\rho}_S(t) \right] \right] - f \left[ \hat{X}, \left[ \hat{P}, \hat{\rho}_S(t) \right] \right]
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Είναι πιο πρακτικό να εκφράσουμε την παραπάνω εξίσωση στην αναπαράσταση θέσης, στην οποία:

$$\begin{aligned}
\langle X | \hat{\rho}_S(t) | X' \rangle &= \rho_S(X, X', t) \\
\langle X | \hat{P} \hat{\rho}_S(t) | X' \rangle &= -i \frac{\partial}{\partial X} \langle X | \hat{\rho}_S(t) | X' \rangle = -i \frac{\partial}{\partial X} \rho_S(X, X', t)
\end{aligned}$$

Οπότε

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \rho_S(X, X', t) &= \left[ -\frac{i}{2M} \left( \frac{\partial^2}{\partial X'^2} - \frac{\partial^2}{\partial X^2} \right) - \frac{i}{2} M \left( \Omega^2 + \tilde{\Omega}^2 \right) (X^2 - X'^2) \right. \\
&\quad \left. + \gamma (X - X') \left( \frac{\partial}{\partial X'} - \frac{\partial}{\partial X} \right) - D (X - X')^2 \right. \\
&\quad \left. + if (X - X') \left( \frac{\partial}{\partial X'} + \frac{\partial}{\partial X} \right) \right] \rho_S(X, X', t)
\end{aligned}$$

Η εξίσωση (4.9) μπορεί επίσης να εκφραστεί στην αναπαράσταση Wigner (1.7) (για περισσότερα [6]):

$$\begin{aligned}
W(X, P, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dY e^{iPY} \rho(X + Y/2, X - Y/2) \\
\frac{\partial}{\partial t} W(X, P, t) &= \left[ -\frac{P}{M} \frac{\partial}{\partial X} + M \left( \Omega^2 + \tilde{\Omega}^2 \right) X \frac{\partial}{\partial P} + \gamma \frac{\partial}{\partial P} P \right. \\
&\quad \left. + D \frac{\partial^2}{\partial P^2} - f \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial}{\partial P} \right] W(X, P, t)
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Αυτές οι εκφράσεις της εξίσωσης master (4.9) μας επιτρέπουν να ερμηνεύσουμε άμεσα τους διάφορους όρους της.

Ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους της εξίσωσης master (4.9) περιγράφει τη μοναδιακή χρονική εξέλιξη ενός αρμονικού τελεστή φυσικής συχνότητας  $(\Omega^2 + \tilde{\Omega}^2)^{1/2}$ . Βλέπουμε επομένως ότι το  $\tilde{\Omega}$  προκαλεί μια μετατόπιση, ανεξάρτητη από τη θερμοκρασία

του περιβάλλοντος, στην φυσική συχνότητα  $\Omega$  του κεντρικού αρμονικού ταλαντωτή (η Χαμιλτονιανή  $\hat{H}'_S = \hat{H}_S + \frac{1}{2}M\tilde{\Omega}^2\hat{X}^2$  είναι ένα παράδειγμα της μετατόπισης Lamb που συζητήσαμε στην εξαγωγή των εξισώσεων master).

Ο δεύτερος όρος του δεξιού μέλους της (4.9) περιγράφει την απόσβεση (και επομένως το dissipation) στην ορμή λόγω της αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον. Για να το δούμε αυτό, παίρνουμε την χρονική παράγωγο της αναμενόμενης τιμής της ορμής:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{P}\rangle_t = \text{Tr}_S \left\{ \frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} \hat{P} \right\}$$

Λόγω της κυκλικότητας του ίχνους και της σχέσης μετάθεσης  $[\hat{X}, \hat{P}] = i$ , προκύπτει ότι:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{P}\rangle_t = -M(\Omega^2 + \tilde{\Omega}^2)\langle\hat{X}\rangle_t - 2\gamma\langle\hat{P}\rangle_t$$

Ο όρος  $-M(\Omega^2 + \tilde{\Omega}^2)\langle\hat{X}\rangle_t$  οφείλεται στην μοναδιακή χρονική εξέλιξη στο Lamb-μετατοπισμένο δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή. Αγνοώντας τον όρο αυτό, έχουμε ότι  $\langle\hat{P}\rangle_t \propto e^{-2\gamma t}\langle\hat{P}\rangle_0$ , δηλαδή η αναμενόμενη τιμή της ορμής μειώνεται εκθετικά με ρυθμό  $2\gamma$ . Επομένως πράγματι, ο δεύτερος όρος της εξίσωσης master περιγράφει την απόσβεση στην ορμή με ρυθμό ανάλογο του  $\gamma$ . Σημειώνουμε ότι ο ρυθμός αυτός εξαρτάται μόνο από τη φασματική πυκνότητα  $J(\omega)$  του περιβάλλοντος και όχι τη θερμοκρασία του.

Η σημασία του τρίτου όρου,  $-D[\hat{X}, [\hat{X}, \hat{\rho}_S(t)]]$ , φαίνεται αμέσως αν τον ξαναγράψουμε στην αναπαράσταση θέσης:

$$D[\hat{X}, [\hat{X}, \hat{\rho}_S(t)]] \rightarrow D(X - X')^2 \rho_S(X, X', t)$$

Αν συγκρίνουμε με τη σχέση (2.15) του μοντέλου σκέδασης, συμπεραίνουμε ότι ο συντελεστής  $D$  παίζει τον ρόλο του ρυθμού αποσυνοχής. Οπότε

$$\tau_{|X-X'|} = \frac{1}{D(X - X')^2}$$

και είναι η χρονική κλίμακα στην οποία η χωρική συνοχή σε απόσταση  $|X - X'|$  μειώνεται κατά παράγοντα  $e$ . Ο συντελεστής  $D$  επίσης περιγράφει απόσβεση στην ορμή. Αυτό φαίνεται αν πάρουμε τη χρονική παράγωγο της αναμενόμενης τιμής του τετραγώνου της ορμής:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{P}^2\rangle_t = -M(\Omega^2 + \tilde{\Omega}^2)\langle\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}\rangle_t - 4\gamma\langle\hat{P}^2\rangle_t + 2D$$

Οπότε η χρονική εξέλιξη του  $\langle\hat{P}^2\rangle_t$  λόγω του  $D$  δίνει  $\langle\hat{P}^2\rangle_t \propto Dt$ , κάτι που δείχνει ότι το  $D$  πράγματι περιγράφει απόσβεση στην ορμή. Ο συντελεστής  $D$  είναι γνωστός ως *normal-diffusion συντελεστής*. Αποδεικνύεται ότι η αβεβαιότητα στη θέση είναι  $\Delta X^2(t) = \frac{D}{2m^2\gamma^2}t$ , που σημαίνει ότι το πλάτος στατιστικής συλλογής είναι  $\Delta X(t) \propto \sqrt{t}$ , όπως ακριβώς στην κλασική κίνηση Brown.

Ο ρόλος του  $D$  ως συντελεστή απόσβεσης στην ορμή μπορεί να ειπωθεί επίσης και από την εξίσωση master στην αναπαράσταση Wigner (4.10). Επικεντρώνοντας την προσοχή μας στην εξέλιξη που οφείλεται στον όρο με συντελεστή  $D$ , έχουμε:

$$\frac{\partial}{\partial t}W(X, P, t) = D\frac{\partial^2}{\partial P^2}W(X, P, t)$$

Αυτή η εξίσωση είναι μια εξίσωση διάχυσης στη μεταβλητή  $P$  για την περίπτωση σταθερού συντελεστή διάχυσης  $D$ .

Ο τελευταίος όρος  $-f \left[ \hat{X}, \left[ \hat{P}, \hat{\rho}_S(t) \right] \right]$  επίσης περιγράφει την αποσυννοχή αλλά και το dissipation. Η εξίσωση master στην αναπαράσταση Wigner το επιβεβαιώνει. Επικεντρώνοντας τη προσοχή μας στην εξέλιξη μόνο λόγω του όρου με συντελεστή  $f$ , έχουμε:

$$\frac{\partial}{\partial t} W(X, P, t) = -f \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial}{\partial P} W(X, P, t)$$

Η εξίσωση αυτή μοιάζει με την προηγούμενη κανονική εξίσωση διάχυσης, με τη διαφορά ότι αυτή τη φορά έχουμε παράγωγο δεύτερης τάξης ως προς δυο διαφορετικές μεταβλητές  $X$  και  $P$ . Για το λόγο αυτό, το  $f$  είναι γνωστό ως *anomalous-diffusion συντελεστής*. Ωστόσο, όπως θα δούμε παρακάτω, σε πολλές περιπτώσεις η συνεισφορά του όρου αυτού στην δυναμική του συστήματος είναι αμελητέα σε σχέση με τη συνεισφορά του normal-diffusion συντελεστή  $D$  και έτσι μπορεί να αγνοηθεί από την εξίσωση master. Τέλος σημειώνουμε ότι οι δυο συντελεστές  $D$  και  $f$  εξαρτώνται, εκτός από την φασματική πυκνότητα, και από τη θερμοκρασία του περιβάλλοντος.

Τέλος να αναφέρουμε ότι αν στους Μαρκοβιανούς συντελεστές (4.8) αλλάξουμε τα όρια της ολοκλήρωσης από  $\int_0^\infty$  σε  $\int_0^t$ , παίρνουμε μια εξίσωση master σε μορφή Redfield που είδαμε στην εξαγωγή της εξίσωσης Born-Markov και η οποία βασίζεται στην προσέγγιση Born και μερικώς στην προσέγγιση Markov. Μια τέτοια εξίσωση master είναι πιο ρεαλιστική και έχει εφαρμογές σε περιπτώσεις που η προσέγγιση Markov δεν ικανοποιείται ακριβώς (πχ. σε περιβάλλοντα χαμηλής θερμοκρασίας). Οι συντελεστές αυτοί,  $\tilde{\Omega}^2(t)$ ,  $\gamma(t)$ ,  $D(t)$  και  $f(t)$ , συγκλίνουν ασυμπτωτικά στους Μαρκοβιανούς συντελεστές (4.8) στο όριο  $t \rightarrow \infty$ . Μάλιστα έχει αποδειχτεί [11] ότι η ακριβής, μη-Μαρκοβιανή (αλλά τοπική στο χρόνο), εξίσωση master της κβαντικής κίνησης Brown έχει ακριβώς την ίδια μορφή με την εξίσωση master Born-Markov (4.9), με τη διαφορά ότι οι συντελεστές  $\tilde{\Omega}^2(t)$ ,  $\gamma(t)$ ,  $D(t)$  και  $f(t)$  εξαρτώνται ρητά από το χρόνο και είναι αρκετά πολύπλοκες συναρτήσεις άλλων χρονικά εξαρτώμενων συντελεστών που περιέχουν διάφορα ολοκληρώματα των noise και dissipation kernels. Αυτή η ρητή εξάρτηση των συντελεστών από το χρόνο επιβάλλει τη θετικότητα της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας, παρόλο που η ακριβής εξίσωση master δεν μπορεί να γραφτεί στη μορφή Lindblad.

### 4.1.3 Ωμική φασματική πυκνότητα

Ας δούμε τώρα μια συγκεκριμένη περίπτωση φασματικής πυκνότητας  $J(\omega)$  (4.5) ώστε να υπολογίσουμε τους Μαρκοβιανούς συντελεστές (4.8). Περνάμε από τη διακριτή μορφή της φασματικής πυκνότητας σε συνεχή αντικαθιστώντας το άθροισμα από μια κατάλληλη συνεχή συνάρτηση του  $\omega$ . Συνήθως έχουμε  $J(\omega) \propto \omega^a$  και η πιο συνηθισμένη επιλογή είναι  $a = 1$  ώστε να έχουμε γραμμική εξάρτηση από τη συχνότητα  $\omega$  του περιβάλλοντος. Η φασματική πυκνότητα αυτή λέγεται *ωμική* και γράφεται ως:

$$J(\omega) = \frac{2M\gamma_0}{\pi} \omega \quad (4.11)$$

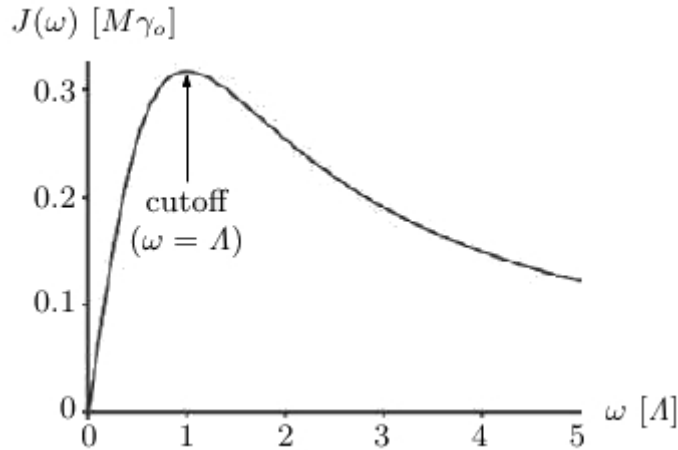
όπου η σταθερά  $\gamma_0$  περιγράφει την αποτελεσματική δύναμη αλληλεπίδρασης ανάμεσα στο σύστημα και το περιβάλλον (και όπως θα δούμε μετά, παίζει το ρόλο της σταθεράς απόσβεσης, ανεξάρτητης από τη συχνότητα του περιβάλλοντος). Τυπικά, η εξάρτηση



της φασματικής πυκνότητας από το  $\omega$  ισχύει μόνο για μικρές τιμές του  $\omega$ , οπότε κανείς συνήθως επιλέγει μια συχνότητα αποκοπής  $\Lambda$  για υψηλές συχνότητες και τροποποιεί την (4.11) ώστε να συμπεριλάβει τον όρο που αποσβένει το  $J(\omega)$  για  $\omega > \Lambda$ . Μια κοινή επιλογή είναι η παρακάτω:

$$J(\omega) = \frac{2M\gamma_0}{\pi} \omega \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + \omega^2}$$

Αυτή η μορφή της φασματικής πυκνότητας είναι γνωστή ως *Lorentz-Drude* και το γράφημα της φαίνεται παρακάτω:



Υπολογίζουμε τον συντελεστή απόσβεσης  $\gamma$  (4.8):

$$\gamma = \frac{1}{M\Omega} \int_0^\infty d\tau \eta(\tau) \sin(\Omega\tau) = \frac{1}{M\Omega} \int_0^\infty d\tau \sin(\Omega\tau) \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin(\omega\tau)$$

Παραπάνω έχουμε έναν διπλό ημιτονικό μετασχηματισμό Fourier<sup>2</sup> της περιττής συνάρτησης  $J(\omega)$  (δηλαδή  $J(-\omega) = -J(\omega)$ ), οπότε:

$$\gamma = \frac{1}{M\Omega} \int_0^\infty d\tau \sin(\Omega\tau) \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin(\omega\tau) = \frac{\pi}{2M\Omega} J(\Omega) = \gamma_0 \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + \Omega^2} \quad (4.12)$$

Παρατηρούμε ότι χωρίς τη συχνότητα αποκοπής στη φασματική πυκνότητα ( $\Lambda \rightarrow \infty$ ), είναι  $\gamma = \gamma_0$ .

Για τον υπολογισμό του normal-diffusion συντελεστή  $D$  ακολουθούμε την ίδια μέθοδο. Έχουμε:

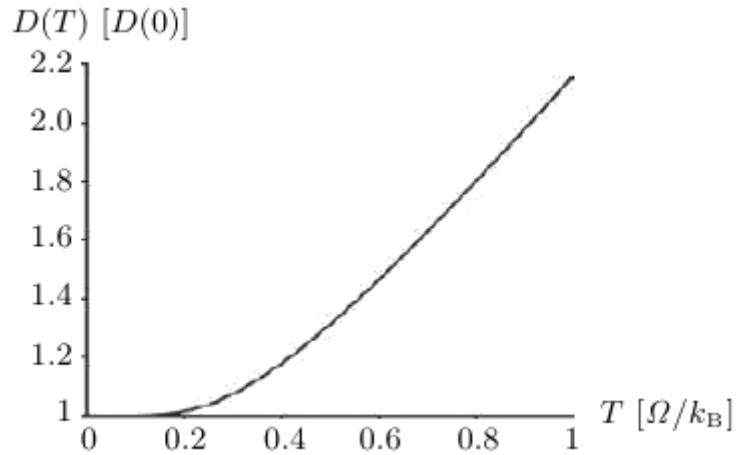
$$D = \int_0^\infty d\tau \nu(\tau) \cos(\Omega\tau) = \int_0^\infty d\tau \cos(\Omega\tau) \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\omega}{2k_B T}\right) \cos(\omega\tau)$$

Η συνάρτηση  $J(\omega) \coth\left(\frac{\omega}{2k_B T}\right)$  είναι άρτια καθώς  $J(-\omega) = -J(\omega)$  και  $\coth(-\omega) = -\coth(\omega)$ , επομένως έχουμε έναν διπλό συνημιτονικό μετασχηματισμό Fourier. Οπότε:

$$D = \frac{\pi}{2} J(\Omega) \coth\left(\frac{\Omega}{2k_B T}\right) = M\gamma_0 \Omega \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + \Omega^2} \coth\left(\frac{\Omega}{2k_B T}\right) \quad (4.13)$$

<sup>2</sup>Υπενθυμίζουμε ότι για τις περιττές συναρτήσεις  $f(-x) = -f(x)$  ορίζεται ο ημιτονικός μετασχηματισμός Fourier ως  $\hat{f}_s(u) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx f(x) \sin(ux)$ , ενώ για τις άρτιες συναρτήσεις  $f(-x) = f(x)$  ορίζεται ο συνημιτονικός μετασχηματισμός Fourier:  $\hat{f}_c(u) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx f(x) \cos(ux)$

Η θερμοκρασιακή εξάρτηση του normal-diffusion συντελεστή  $D$  φαίνεται στο παρακάτω γράφημα:



Παρατηρούμε ότι το  $D$  αυξάνεται με τη αύξηση της θερμοκρασίας (για υψηλές θερμοκρασίες,  $k_B T \gg \Omega$ , η αύξηση είναι προσεγγιστικά γραμμική), που σημαίνει ότι η αποσυνοχή γίνεται πιο έντονη αν η θερμοκρασία του περιβάλλοντος αυξηθεί.

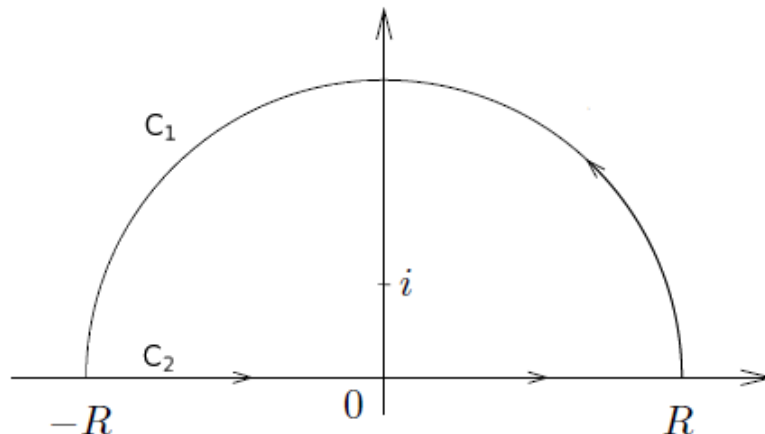
Τέλος, υπολογίζουμε την επανακανονικοποίηση συχνότητας  $\tilde{\Omega}^2$ . Έχουμε:

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}^2 &= -\frac{2}{M} \int_0^\infty d\tau \eta(\tau) \cos(\Omega\tau) = -\frac{2}{M} \int_0^\infty d\tau \cos(\Omega\tau) \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin(\omega\tau) \\ &= -\frac{4\gamma_0\Lambda^2}{\pi} \int_0^\infty d\tau \cos(\Omega\tau) \int_0^\infty d\omega \frac{\omega}{\Lambda^2 + \omega^2} \sin(\omega\tau) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Ας δούμε πρώτα πως υπολογίζεται το ολοκλήρωμα της μορφής:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x \sin(x)}{1+x^2} = 2 \int_0^{\infty} dx \frac{x \sin(x)}{1+x^2}$$

Η ισότητα αυτή ισχύει διότι η ολοκληρωτέα συνάρτηση είναι άρτια. Θεωρούμε τη μιγαδική συνάρτηση  $f(z) = \frac{ze^{iz}}{1+z^2}$  και την ολοκληρώνουμε πάνω σε μια κλειστή και θετικά προσανατολισμένο καμπύλη  $C = C_1 + C_2$  που φαίνεται παρακάτω



Το ολοκλήρωμα αυτό σπάει σε δύο κομμάτια:

$$\oint_C dz \frac{ze^{iz}}{1+z^2} = \int_{C_1} dz \frac{ze^{iz}}{1+z^2} + \int_{-R}^R dz \frac{ze^{iz}}{1+z^2}$$

Θα αποδείξουμε ότι στο όριο  $R \rightarrow \infty$  το ολοκλήρωμα πάνω στο ημικύκλιο  $C_1$  είναι μηδέν, χρησιμοποιώντας τη γνωστή ανισότητα  $|\int f| \leq \int |f|$ . Έχουμε:

$$\left| \int_{C_1} dz \frac{ze^{iz}}{1+z^2} \right| = \left| \int_0^\pi d\theta \frac{iR^2 e^{2i\theta} e^{iRe^{i\theta}}}{R^2 e^{2i\theta} + 1} \right| \leq \int_0^\pi d\theta \frac{R^2 e^{-R \sin(\theta)}}{R^2 - 1}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι  $|e^{ig(\theta)}| = 1$  για οποιαδήποτε συνεχή συνάρτηση  $g$  του  $\theta$ . Επίσης από την τριγωνική ανισότητα προέκυψε ότι  $|R^2 e^{2i\theta}| = |R^2 e^{2i\theta} + 1 - 1| \leq |R^2 e^{2i\theta} + 1| + 1 \Rightarrow |R^2 e^{2i\theta} + 1| \geq |R^2 e^{2i\theta}| - 1 = R^2 - 1$ . Συνεχίζουμε τον υπολογισμό μας, χρησιμοποιώντας την ανισότητα  $\sin(\theta) \geq \frac{2\theta}{\pi}$ :

$$\int_0^\pi d\theta \frac{R^2 e^{-R \sin(\theta)}}{R^2 - 1} \leq \frac{R^2}{R^2 - 1} \int_0^\pi d\theta e^{-2R\theta/\pi} = \frac{\pi R}{2(R^2 - 1)} (1 - e^{-2R}) \leq \frac{\pi R}{R^2 - 1}$$

Επομένως

$$\left| \int_{C_1} dz \frac{ze^{iz}}{1+z^2} \right| \leq \frac{\pi R}{R^2 - 1}$$

Όμως  $\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\pi R}{R^2 - 1} = 0$ , οπότε στο όριο  $R \rightarrow \infty$  το ολοκλήρωμα  $\int_{C_1} dz \frac{ze^{iz}}{1+z^2}$  είναι μηδέν. Το επικαμπύλιο μιγαδικό ολοκλήρωμα πάνω στην καμπύλη  $C$  υπολογίζεται με τη βοήθεια του θεωρήματος ολοκληρωτικών υπολοίπων:

$$\oint_C dz \frac{ze^{iz}}{1+z^2} = 2\pi i \operatorname{Res}(f, i) = 2\pi i \lim_{z \rightarrow i} (z - i) \frac{ze^{iz}}{1+z^2} = 2i\pi \lim_{z \rightarrow i} \frac{ze^{iz}}{z+i} = 2i\pi \frac{ie^{-1}}{2i} = \frac{i\pi}{e}$$

Επομένως θα είναι:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{ze^{iz}}{1+z^2} = \lim_{R \rightarrow \infty} \oint_C dz \frac{ze^{iz}}{1+z^2} = \frac{i\pi}{e}$$

Το μισό του φανταστικού μέρους του παραπάνω ολοκληρώματος ισούται με το αρχικό μας ολοκλήρωμα, οπότε:

$$\int_0^\infty dx \frac{x \sin(x)}{1+x^2} = \frac{\pi}{2e}$$

Επιστρέφοντας στην (4.14), έχουμε

$$\int_0^\infty d\omega \frac{\omega}{\Lambda^2 + \omega^2} \sin(\omega\tau) = \frac{\pi}{2e^{\Lambda\tau}}$$

Επομένως

$$\tilde{\Omega}^2 = -2\gamma_0 \Lambda^2 \int_0^\infty d\tau \cos(\Omega\tau) e^{-\Lambda\tau} = -2\gamma_0 \frac{\Lambda^3}{\Lambda^2 + \Omega^2} \quad (4.15)$$

Ο υπολογισμός του anomalous-diffusion συντελεστή  $f$  είναι πιο δύσκολος λόγω του όρου  $\coth(\omega/2k_B T)$ . Ωστόσο, στο όριο των υψηλών θερμοκρασιών  $k_B T \gg \Omega$ , όπως θα δούμε στην επόμενη ενότητα, η συνεισφορά του  $f$  στην εξίσωση master είναι πολύ μικρή και μπορεί να αγνοηθεί.

#### 4.1.4 Εξίσωση master στο όριο υψηλών θερμοκρασιών (Caldeira-Leggett)

Θεωρούμε τώρα την περίπτωση που το περιβάλλον έχει υψηλή θερμοκρασία, ή με άλλα λόγια η θερμική ενέργεια  $k_B T$  του είναι πολύ μεγαλύτερη από την ενέργεια που αντιστοιχεί στη φυσική συχνότητα  $\Omega$  του συστήματος, δηλαδή  $k_B T \gg \Omega$ . Στο όριο αυτό, ο όρος  $\coth(\Omega/2k_B T)$  μπορεί να αντικατασταθεί προσεγγιστικά από το  $2k_B T/\Omega$  (που είναι ο πρώτος όρος του αναπτύγματος Taylor του  $\coth(\Omega/2k_B T)$  γύρω από το  $\Omega/2k_B T = 0$ ). Επομένως, ο normal-diffusion συντελεστής  $D$  (4.13) γίνεται:

$$D \xrightarrow{k_B T \gg \Omega} 2M\gamma_0 k_B T \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + \Omega^2}$$

Επιπλέον θεωρούμε ότι η συχνότητα αποκοπής  $\Lambda$  είναι πολύ μεγαλύτερη από τη χαρακτηριστική συχνότητα  $\Omega$  του συστήματος,  $\Lambda \gg \Omega$ . Στο όριο αυτό θα είναι:

$$D \xrightarrow[\Lambda \gg \Omega]{k_B T \gg \Omega} 2M\gamma_0 k_B T$$

Ομοίως, στο όριο  $\Lambda \gg \Omega$  τα  $\gamma$  (4.12) και  $\tilde{\Omega}^2$  (4.15) είναι:

$$\gamma \xrightarrow{\Lambda \gg \Omega} \gamma_0$$

$$\tilde{\Omega}^2 \xrightarrow{\Lambda \gg \Omega} -2\gamma_0 \Lambda$$

Τέλος, στο όριο  $k_B T \gg \Omega$  και  $\Lambda \gg \Omega$  ο anomalous-diffusion συντελεστής  $f$  είναι:

$$f \xrightarrow[\Lambda \gg \Omega]{k_B T \gg \Omega} \frac{2\gamma_0 k_B T}{\Lambda}$$

Στο όριο  $\Lambda \gg \Omega$  η συνεισφορά του όρου  $f[\hat{X}, [\hat{P}, \hat{\rho}_S(t)]]$  είναι αμελητέα συγκριτικά με τη συνεισφορά του όρου  $D[\hat{X}, [\hat{X}, \hat{\rho}_S(t)]]$ . Αυτό φαίνεται από τα παρακάτω:

$$DX^2 \sim 2M\gamma_0 k_B T X^2$$

$$fXP \sim fXM\Omega X \sim \frac{2\gamma_0 k_B T}{\Lambda} M\Omega X^2 = \frac{\Omega}{\Lambda} DX^2$$

Οπότε στο όριο  $\Lambda \gg \Omega$  θα είναι  $fXP \ll DX^2$  και η συνεισφορά του όρου  $f[\hat{X}, [\hat{P}, \hat{\rho}_S(t)]]$  στην εξίσωση master (4.9) μπορεί πράγματι να αγνοηθεί.

Εισάγοντας τις εκφράσεις αυτές για τους συντελεστές  $D$ ,  $\gamma$ ,  $\tilde{\Omega}^2$  στην εξίσωση master (4.9) και αγνοώντας τον συντελεστή  $f$ , παίρνουμε την εξίσωση master Caldeira-Leggett:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_S(t) = -i \left[ \hat{H}'_S, \hat{\rho}_S(t) \right] - i\gamma_0 \left[ \hat{X}, \left\{ \hat{P}, \hat{\rho}_S(t) \right\} \right] - 2M\gamma_0 k_B T \left[ \hat{X}, \left[ \hat{X}, \hat{\rho}_S(t) \right] \right] \quad (4.16)$$

όπου η μετατοπισμένη Χαμιλτονιανή  $\hat{H}'_S$  του συστήματος είναι:

$$\hat{H}'_S = \hat{H}_S + \frac{1}{2} M \tilde{\Omega}^2 \hat{X}^2 = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2} M (\Omega^2 - 2\gamma_0 \Lambda) \hat{X}^2$$

Ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους της (4.16) περιγράφει τη μοναδιακή χρονική εξέλιξη του συστήματος με μετατοπισμένη στη συχνότητα Χαμιλτονιανή, ο δεύτερος όρος περιγράφει την απόσβεση στην ορμή με χαρακτηριστικό ρυθμό ανάλογο με το  $\gamma_0$ , και ο τρίτος όρος περιγράφει την αποσυνοχή στη θέση (με επακόλουθη απόσβεση στην ορμή) με χαρακτηριστικό ρυθμό που εξαρτάται γραμμικά από τη θερμοκρασία του περιβάλλοντος:

$$\frac{1}{\tau_{|X-X'|}} = 2M\gamma_0 k_B T (X - X')^2 = \gamma_0 \left( \frac{X - X'}{\lambda_{dB}} \right)^2$$

όπου  $\lambda_{dB} = \frac{1}{\sqrt{2Mk_B T}}$  είναι το θερμικό μήκος κύματος de Broglie για σωματίδιο μάζας  $M$  σε θερμοκρασία  $T$ . Παρατηρούμε ότι για μακροσκοπικά αντικείμενα σε χωρική υπέρθεση σε μακροσκοπικές αποστάσεις  $|X - X'|$ , η ποσότητα  $\left( \frac{X-X'}{\lambda_{dB}} \right)^2$  είναι πολύ μεγάλη με αποτέλεσμα ο ρυθμός της αποσυνοχής  $\tau_{|X-X'|}^{-1}$  να είναι πολύ μεγαλύτερος από τον ρυθμό του diffusion  $\gamma_0$ .

Επομένως, στη χρονική κλίμακα του χρόνου αποσυνοχής μπορούμε να αγνοήσουμε τον όρο του dissipation στην εξίσωση master (4.16). Έτσι παίρνουμε την παρακάτω απλοποιημένη εξίσωση master που περιγράφει τη χωρική αποσυνοχή:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_S(t) = -i \left[ \hat{H}'_S, \hat{\rho}_S(t) \right] - 2M\gamma_0 k_B T \left[ \hat{X}, \left[ \hat{X}, \hat{\rho}_S(t) \right] \right]$$

η οποία στην αναπαράσταση θέσης γράφεται:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_S(X, X', t) = & \left[ -\frac{i}{2M} \left( \frac{\partial^2}{\partial X'^2} - \frac{\partial^2}{\partial X^2} \right) - \frac{i}{2} M (\Omega^2 - 2\gamma_0 \Lambda) (X^2 - X'^2) \right. \\ & \left. - \gamma_0 \left( \frac{X - X'}{\lambda_{dB}} \right)^2 \right] \rho_S(X, X', t) \quad (4.17) \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι η εξίσωση αυτή μοιάζει με την εξίσωση master (2.14) του μοντέλου σκέδασης, με σταθερά σκέδασης  $\gamma_0/\lambda_{dB}^2$ . Η διαφορά είναι στο δεύτερο όρο του δεξιού μέλος της (4.17), που οφείλεται στο ότι το κεντρικό σύστημα δεν είναι ελεύθερο όπως στο μοντέλο σκέδασης, αλλά βρίσκεται σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή.

Ας ανακεφαλαιώσουμε τις υποθέσεις που κάναμε για την εξαγωγή της εξίσωσης master Caldeira-Leggett (4.16):

- Προσέγγιση Born-Markov
- Το περιβάλλον, που αποτελείται από αρμονικούς ταλαντωτές, έχει μια ομική φασματική πυκνότητα  $J(\omega) \propto \omega$  με συχνότητα αποκοπής  $\Lambda$
- Το περιβάλλον βρίσκεται σε υψηλή θερμοκρασία, τέτοια ώστε η θερμική ενέργεια του  $k_B T$  να είναι πολύ μεγαλύτερη από την ενέργεια που αντιστοιχεί στη φυσική συχνότητα  $\Omega$  του συστήματος ( $k_B T \gg \Omega$ )
- Η φυσική συχνότητα  $\Omega$  του συστήματος είναι πολύ μικρότερη από τη συχνότητα αποκοπής  $\Lambda$  του περιβάλλοντος ( $\Lambda \gg \Omega$ )

Επομένως δεν πρέπει να ξεχνάμε ότι τα διάφορα αποτελέσματα και συμπεράσματα που βγάλαμε ισχύουν μόνο για το συγκεκριμένο μοντέλο που βασίζεται στις υποθέσεις αυτές.

#### 4.1.5 Δυναμική της κβαντικής κίνησης Brown

Θα παρουσιάσουμε τώρα τη χρονική εξέλιξη του κεντρικού συστήματος (αρμονικός ταλαντωτής), που παράγεται από την εξίσωση master (4.9). Θεωρούμε ότι η αρχική κυματοσυνάρτηση του συστήματος είναι μια υπέρθεση, στον χώρο των φάσεων, δύο Γκαουσιανών κυματοπακέτων που αρχικά είναι συμμετρικά τοποθετημένοι στις θέσεις  $\pm X_0$  και ορμές  $\mp P_0$ . Δηλαδή:

$$\begin{aligned}\Psi(X, t = 0) &= \Psi_1(X) + \Psi_2(X) \\ &= N \left\{ \exp \left[ -\frac{(X - X_0)^2}{2\delta^2} \right] \exp(iP_0X) + \exp \left[ -\frac{(X + X_0)^2}{2\delta^2} \right] \exp(-iP_0X) \right\}\end{aligned}$$

όπου  $\delta$  είναι το πλάτος του Γκαουσιανού κυματοπακέτου στο χώρο των θέσεων και  $N$  είναι η σταθερά κανονικοποίησης:

$$N^2 = \frac{\tilde{N}^2}{\sqrt{\pi}\delta} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}\delta} \left[ 1 + \exp \left( -\frac{X_0^2}{\delta^2} - \delta^2 P_0^2 \right) \right]^{-1}$$

Θα δούμε ότι η αποσυνοχή στο μοντέλο της κβαντικής κίνησης Brown επηρεάζει τις υπερθέσεις όχι μόνο στη θέση, αλλά και στην ορμή. Για το σκοπό αυτό θεωρούμε δύο οριακές περιπτώσεις: Στην πρώτη περίπτωση έχουμε υπέρθεση μόνο στο χώρο των θέσεων ( $X_0 > \delta$ ,  $P_0 = 0$ ):

$$\begin{aligned}\Psi_{pos}(X, t = 0) &= \Psi_{pos_1}(X) + \Psi_{pos_2}(X) \\ &= N \exp \left[ -\frac{(X - X_0)^2}{2\delta^2} \right] + N \exp \left[ -\frac{(X + X_0)^2}{2\delta^2} \right]\end{aligned}$$

ενώ στη δεύτερη περίπτωση έχουμε υπέρθεση μόνο στο χώρο των ορμών ( $X_0 = 0$ ,  $P_0 > 1/\delta$ ):

$$\begin{aligned}\Psi_{mom}(X, t = 0) &= \Psi_{mom_1}(X) + \Psi_{mom_2}(X) \\ &= N \exp \left( -\frac{X^2}{2\delta^2} \right) \exp(iP_0X) + N \exp \left( -\frac{X^2}{2\delta^2} \right) \exp(-iP_0X) \\ &= 2N \exp \left( -\frac{X^2}{2\delta^2} \right) \cos(P_0X)\end{aligned}$$

Είναι πιο αποτελεσματικό να περάσουμε στην αναπαράσταση Wigner  $W(X, P)$  της μήτρας πυκνότητας  $\rho_S(X, X') = \Psi(X)\Psi^*(X')$  μιας και θέλουμε να μελετήσουμε τη δυνα-

μική του συστήματος στο χώρο των φάσεων. Οπότε

$$\begin{aligned}
W(X, P, t = 0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \rho_S(X + Y/2, X - Y/2) \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \Psi(X + Y/2) \Psi^*(X - Y/2) \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \Psi_1(X + Y/2) \Psi_1^*(X - Y/2) \\
&\quad + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \Psi_2(X + Y/2) \Psi_2^*(X - Y/2) \\
&\quad + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \left[ \Psi_1(X + Y/2) \Psi_2^*(X - Y/2) \right. \\
&\quad \left. + \Psi_2(X + Y/2) \Psi_1^*(X - Y/2) \right]
\end{aligned}$$

$$W(X, P, t = 0) = W_1(X, P, t = 0) + W_2(X, P, t = 0) + W_{int}(X, P, t = 0)$$

Η χρονική εξέλιξη της συνάρτησης Wigner  $W(X, P, t)$  θα δίνεται από την εξίσωση master (4.10).

Για την αρχική κυματοσυνάρτηση  $\Psi_{pos}(X, t = 0)$  έχουμε:

$$\begin{aligned}
W_{pos,1,2}(X, P, 0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \Psi_{1,2}(X + Y/2) \Psi_{1,2}^*(X - Y/2) \\
&= N^2 \exp \left[ -\frac{(X \mp X_0)^2}{\delta^2} \right] \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \exp \left( -\frac{Y^2}{4\delta^2} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{pos,int}(X, P, 0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \left[ \Psi_1(X + Y/2) \Psi_2^*(X - Y/2) \right. \\
&\quad \left. + \Psi_2(X + Y/2) \Psi_1^*(X - Y/2) \right] \\
&= N^2 \exp \left[ -\frac{X^2 + X_0^2}{\delta^2} \right] \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \exp \left( -\frac{Y^2 - 4X_0 Y}{4\delta^2} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \exp \left( -\frac{Y^2 + 4X_0 Y}{4\delta^2} \right) \right\}
\end{aligned}$$

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier της συνάρτησης  $\exp \left( -\frac{Y^2}{4\delta^2} \right)$  είναι:<sup>3</sup>

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \exp \left( -\frac{Y^2}{4\delta^2} \right) = \mathcal{F}_Y^{-1} \left\{ \exp \left( -\frac{Y^2}{4\delta^2} \right) \right\} (P) = \sqrt{2} \delta \exp(-\delta^2 P^2)$$

<sup>3</sup>Παραγωγίζοντας την  $F(P) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \exp \left( -\frac{Y^2}{4\delta^2} \right)$  και ολοκληρώνοντας κατά παράγοντες, παίρνουμε τη διαφορική εξίσωση  $\frac{dF(P)}{dP} = -2\delta^2 P F(P)$  με αρχική τιμή  $F(0) = \sqrt{2} \delta$ . Λύνοντας την βρίσκουμε  $F(P) = \sqrt{2} \delta e^{-\delta^2 P^2}$ .

ενώ της  $\exp\left(-\frac{Y^2 \pm 4X_0 Y}{4\delta^2}\right)$  είναι:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dY e^{iPY} \exp\left(-\frac{Y^2 \pm 4X_0 Y}{4\delta^2}\right) &= \mathcal{F}_Y^{-1} \left\{ \exp\left(-\frac{Y^2 \pm 4X_0 Y}{4\delta^2}\right) \right\} (P) \\ &= \sqrt{2} \delta \exp\left[\frac{(X_0 \pm i\delta^2 P)^2}{\delta^2}\right] \end{aligned}$$

Επομένως

$$\begin{aligned} W_{pos_{1,2}}(X, P, 0) &= \frac{N^2 \delta}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(X \mp X_0)^2}{\delta^2}\right] \exp(-\delta^2 P^2) \\ &= \frac{\tilde{N}^2}{\pi} \exp\left[-\frac{(X \mp X_0)^2}{\delta^2}\right] \exp(-\delta^2 P^2) \end{aligned}$$

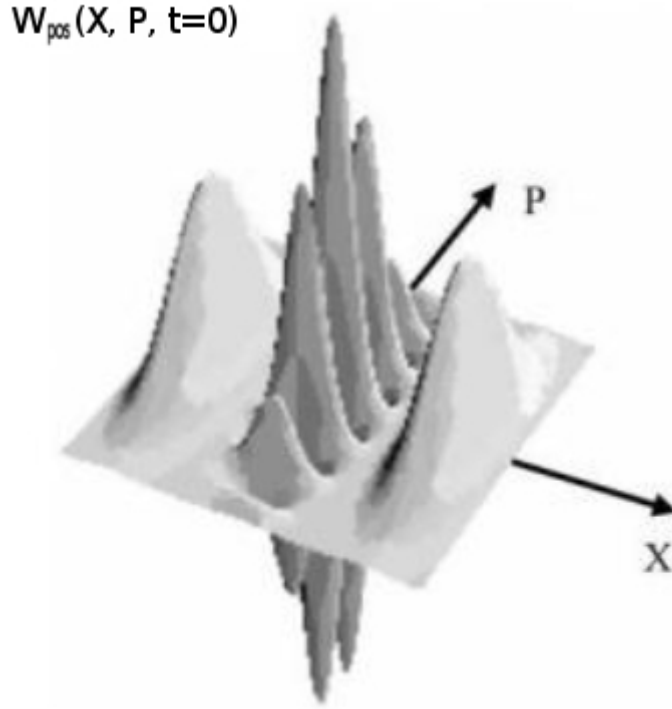
$$\begin{aligned} W_{pos_{int}}(X, P, 0) &= \frac{N^2 \delta}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{X^2 + X_0^2}{\delta^2}\right) \exp\left(\frac{X_0^2}{\delta^2} - \delta^2 P^2\right) \\ &\quad \times \{\exp(2iX_0 P) + \exp(-2iX_0 P)\} \\ &= \frac{2N^2 \delta}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{X^2}{\delta^2} - \delta^2 P^2\right) \cos(2X_0 P) \\ &= \frac{2\tilde{N}^2}{\pi} \exp\left(-\frac{X^2}{\delta^2} - \delta^2 P^2\right) \cos(2X_0 P) \end{aligned}$$

Επομένως η αρχική συνάρτηση Wigner  $W_{pos}(X, P, 0)$  για δυο Γκαουσιανά κυματοπακέτα διαχωρισμένα μόνο στο χώρο είναι:

$$\begin{aligned} W_{pos}(X, P, 0) &= W_{pos_1}(X, P, 0) + W_{pos_2}(X, P, 0) + W_{pos_{int}}(X, P, 0) \\ &= \frac{2\tilde{N}^2}{\pi} \exp\left(-\frac{X^2 + X_0^2}{\delta^2} - \delta^2 P^2\right) \left[ \coth\left(\frac{2XX_0}{\delta^2}\right) + \exp\left(\frac{X_0^2}{\delta^2}\right) \cos(2X_0 P) \right] \end{aligned}$$

Το γράφημα της συνάρτησης αυτής φαίνεται παρακάτω:





Παρατηρούμε ότι δύο κορυφές ( $W_{pos_1}(X, P, 0)$  και  $W_{pos_2}(X, P, 0)$ ) στον άξονα  $X$  σε απόσταση  $X_0$  ή μια από την άλλη, αντιστοιχούν σε δύο κλασικά εντοπισμένα κυματοπακέτα, ενώ οι ταλαντώσεις ( $W_{pos_{int}}(X, P, 0)$ ) στον άξονα  $P$  αντιστοιχούν στη συμβολή των δύο κυματοπακέτων  $\Psi_{pos_1}$  και  $\Psi_{pos_2}$ .

Ομοίως βρίσκουμε την αρχική συνάρτηση Wigner  $W_{mom}(X, P, 0)$  για δυο Γκαουσιανά κυματοπακέτα διαχωρισμένα μόνο στην ορμή:

$$W_{mom_{1,2}}(X, P, 0) = \frac{\tilde{N}^2}{\pi} \exp\left(-\frac{X^2}{\delta^2}\right) \exp[-\delta^2(P \mp P_0)^2]$$

$$W_{mom_{int}}(X, P, 0) = \frac{2\tilde{N}^2}{\pi} \exp\left(-\frac{X^2}{\delta^2} - \delta^2 P^2\right) \cos(2P_0 X)$$

$$W_{mom}(X, P, 0) = W_{mom_1}(X, P, 0) + W_{mom_2}(X, P, 0) + W_{mom_{int}}(X, P, 0)$$

$$= \frac{2\tilde{N}^2}{\pi} \exp\left[-\frac{X^2}{\delta^2} - \delta^2(P^2 + P_0^2)\right] [\coth(2\delta^2 P P_0) + \exp(\delta^2 P_0^2) \cos(2P_0 X)]$$

Το γράφημα της  $W_{mom}(X, P, 0)$  είναι το γράφημα της  $W_{pos}(X, P, 0)$  που έχει περιστραφεί κατά  $\pi/2$  στον άξονα  $XP$ .

Η χρονική εξέλιξη της  $W(X, P, t = 0)$  δίνεται από την εξίσωση master Born-Markov στην αναπαράσταση Wigner (4.10). Αποδεικνύεται ότι [18]:

$$W(X, P, t) = W_1(X, P, t) + W_2(X, P, t) + W_{int}(X, P, t)$$

$$W_{1,2}(X, P, t) = \frac{\tilde{N}^2}{\pi} \frac{\delta_2}{\delta_1} \exp\left[-\frac{(X \mp X_c)^2}{\delta_1^2}\right]$$

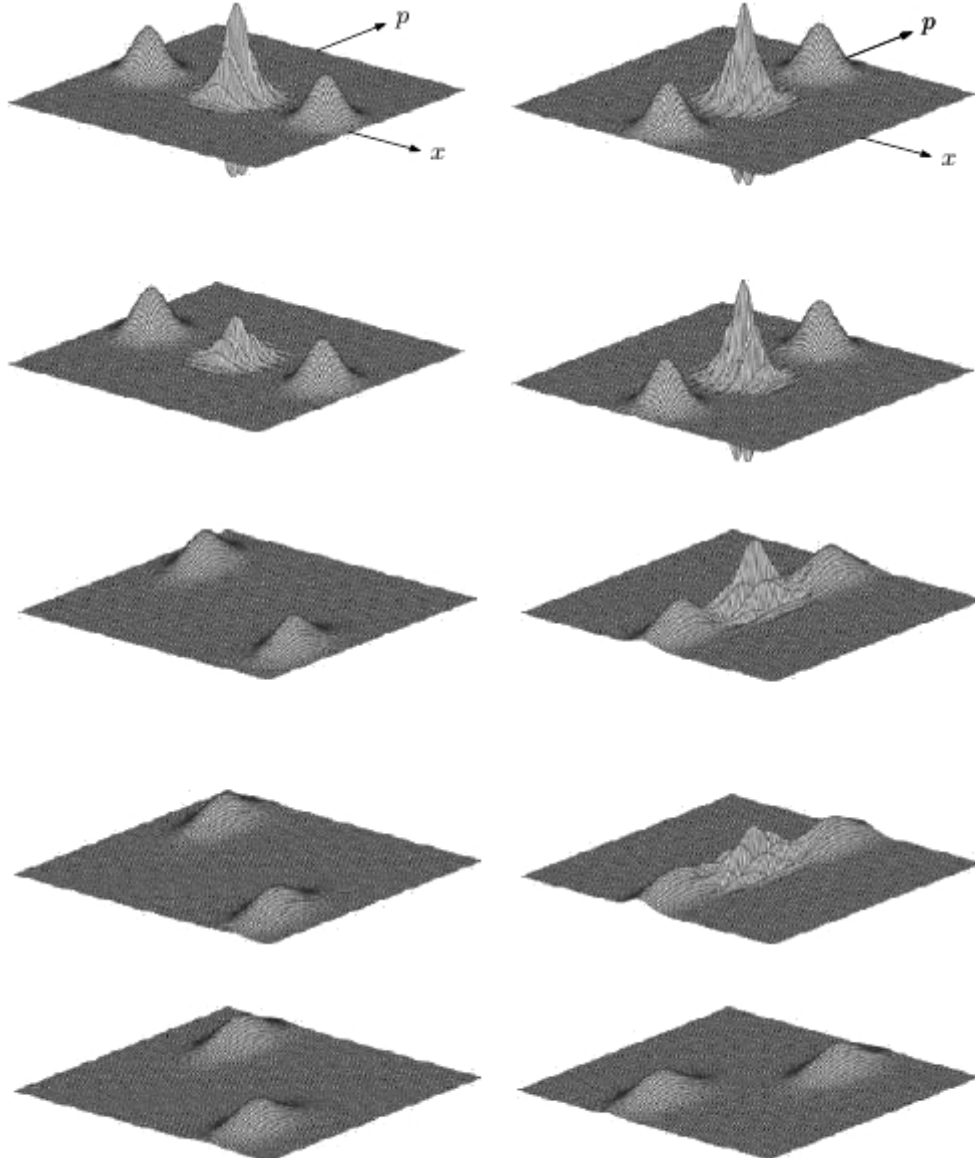
$$\times \exp\{-\delta_2^2[P \mp P_c - \beta(X \mp X_c)]^2\}$$

$$W_{int}(X, P, t) = \frac{2\tilde{N}^2 \delta_2}{\pi \delta_1} \exp(-A_{int}) \exp\left[-\frac{X^2}{\delta_1^2} - \delta_2^2 (P - \beta X)^2\right] \\ \times \cos[2\kappa_p P + 2(\kappa_x - \beta\kappa_p)X]$$

όπου οι συντελεστές  $\delta_1$ ,  $\delta_2$ ,  $X_c$ ,  $P_c$ ,  $\beta$ ,  $A_{int}$ ,  $\kappa_x$  και  $\kappa_p$  είναι εν γένει χρονοεξαρτώμενοι με αρχικές τιμές ( $\tau=0$ ):

$$\delta_1^2 = \delta_2^2 = \delta^2 \\ \kappa_x = P_c = P_0, \quad \kappa_p = X_c = X_0 \\ A_{int} = 0$$

Η ακριβής μορφή των συντελεστών αυτών για αυθαίρετες επιλογές φασματικής πυκνότητας δίνεται στο [18], Ωστόσο εδώ ενδιαφερόμαστε να αποκτήσουμε μια ποιοτική εικόνα της χρονικής εξέλιξης της συνάρτησης Wigner. Η χρονική εξέλιξη αυτή φαίνεται παρακάτω, όπου στα αριστερά έχουμε την  $W_{pos}(X, P, t)$  και στα δεξιά την  $W_{mom}(X, P, t)$ :



Παρατηρούμε ότι λόγω της αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον, οι κροσσοί συμβολής σβήνουν με το χρόνο και στις δύο οριακές περιπτώσεις “*pos*” και “*tom*”. Ωστόσο, στην περίπτωση αρχικής υπέρθεσης μόνο στο χώρο, η αποσυνοχή γίνεται πολύ πιο γρήγορα από ότι στην περίπτωση αρχικής υπέρθεσης μόνο στη ορμή. Μάλιστα, η χρονική κλίμακα στην πρώτη περίπτωση είναι ουσιαστικά ανεξάρτητη από την εσωτερική δυναμική του συστήματος, σε αντίθεση με τη δεύτερη περίπτωση στην οποία η χρονική κλίμακα της απόσβεσης της συμβολής καθορίζεται από την Χαμιλτονιανή  $H'_S$  του συστήματος.

Αυτή η διαφορά στην χρονική κλίμακα της αποσυνοχής στις δύο περιπτώσεις οφείλεται στο ότι η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης  $H_{int}$  εξαρτάται ρητά από τη θέση του συστήματος και καθόλου από την ορμή του. Επομένως το περιβάλλον “παρακολουθεί” άμεσα τη θέση του συστήματος, κάτι που οδηγεί στη γρήγορη και δυνατή αποσυνοχή στη βάση θέσης. Από την άλλη, η αποσυνοχή στην ορμή δημιουργείται έμμεσα, ως αποτέλεσμα της εσωτερικής δυναμικής του συστήματος που οδηγεί στη δημιουργία υπέρθεσης στη θέση, η αποσυνοχή της οποίας λόγω της  $H_{int}$  οδηγεί με τη σειρά της στην αποσυνοχή στην ορμή. Η χρονική κλίμακα στην οποία δημιουργείται αυτή η υπέρθεση στη θέση λόγω της εσωτερικής δυναμικής είναι πολύ μεγαλύτερη από την χρονική κλίμακα της αποσυνοχής στη θέση λόγω της αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον, και ως εκ τούτου, η χρονική κλίμακα της αποσυνοχής στην ορμή ουσιαστικά καθορίζεται από τη χαρακτηριστική κλίμακα της εσωτερικής δυναμικής του συστήματος η οποία είναι πολύ πιο αργή από την αποσυνοχή στη θέση.

Ας δούμε πιο αναλυτικά τα όσα είπαμε προηγουμένως. Οι Γκαουσιανές κορυφές  $W_{1,2}(X, P, t)$  ακολουθούν τις “κλασσικές” τροχιές  $X(t) = \pm X_c(t)$  και  $P(t) = \pm P_c(t)$  που εξαρτώνται από την επιλογή της φασματικής πυκνότητας, αλλά όχι από τη θερμοκρασία του. Τα πλάτη των Γκαουσιανών κορυφών αυτών,  $\delta_1$  (στη θέση) και  $\delta_2$  (στην ορμή), αλλάζουν με το χρόνο λόγω της αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον. Επίσης, το περιβάλλον οδηγεί στην παραμόρφωση του σχήματος των Γκαουσιανών, ποσοτικοποιημένα από τον συντελεστή  $\beta$ . Οι συντελεστές  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  και  $\beta$  εξαρτώνται από τη φασματική πυκνότητα του περιβάλλοντος και, επιπλέον, από τη θερμοκρασία του.

Η απόσβεση των κροσσών συμβολής (και επομένως η αποσυνοχή) παράγεται από τον όρο  $\exp(-A_{int})$  στην  $W_{int}$ , ο οποίος ερμηνεύεται ως:

$$\exp(-A_{int}) = \frac{1}{2} \frac{W_{int}(X=0, P=0)}{[W_1(X=X_c, P=P_c)W_2(X=-X_c, P=-P_c)]^{1/2}}$$

Αποδεικνύεται στο [18] ότι η ποσότητα  $A_{int}$  δίνεται από τη σχέση:

$$A_{int} = \frac{X_0^2}{\delta^2} + \delta^2 P_0^2 - \frac{\kappa_p^2}{\delta_2^2} - \delta_1^2 \kappa_x^2 \leq A_{int}^{max} = \frac{X_0^2}{\delta^2} + \delta^2 P_0^2$$

Για  $t = 0$  έχουμε  $\delta_1 = \delta_2 = \delta$ ,  $\kappa_x = P_0$ ,  $\kappa_p = X_0$ , επομένως  $A_{int}(t=0) = 0$ . Για  $t > 0$  το  $A_{int}$  αυξάνει μέχρι τη μέγιστη τιμή  $A_{int}^{max}$ , σύμφωνα με τη διαφορική εξίσωση:

$$\frac{d}{dt} A_{int} = 4D\kappa_p^2 - 4f\kappa_p(\kappa_x - \beta\kappa_p) \quad (4.18)$$

όπου  $D$  και  $f$  είναι οι normal-diffusion και anomalous-diffusion συντελεστές, αντίστοιχα. Από την εξίσωση κίνησης αυτή για το  $A_{int}$  βλέπουμε τη ρητή εξάρτηση από τους diffusion συντελεστές  $D$  και  $f$ , αλλά όχι από τον συντελεστή απόσβεσης  $\gamma$  στην ορμή,

ούτε από τη Χαμιλτονιανή  $H'_S$ . Ωστόσο υπάρχει μια έμμεση εξάρτηση από τα  $\gamma$  και  $H'_S$ , καθώς η δυναμική των  $\kappa_x$  και  $\kappa_p$  (που αντιστοιχούν στους κυματάριθμους των ταλαντώσεων Wigner κατά μήκος του άξονα  $X$  και  $P$  αντίστοιχα) εξαρτάται από αυτά. Αλλά, όπως θα δούμε παρακάτω, η έμμεση εξάρτηση αυτή από τα  $\gamma$  και  $H'_S$  είναι πολύ μικρή σχετικά από την εξάρτηση από τους diffusion τελεστές.

Ας μελετήσουμε τη χρονική εξέλιξη του  $A_{int}$ , που δίνεται από την εξίσωση (4.18), στην περίπτωση ωμικού περιβάλλοντος υψηλής θερμοκρασίας (Caldeira-Leggett), για δυο Γκαουσιανά κυματοπακέτα αρχικά διαχωρισμένα μόνο στη θέση κατά  $X_0$ . Εδώ, η συνεισφορά του συντελεστή  $f$  είναι αμελητέα σε σχέση με του  $D$ , και ο  $D$  ισούται προσεγγιστικά με  $2M\gamma_0 k_B T$  (δες την προηγούμενη ενότητα). Επιπλέον υποθέτουμε ότι οι κροσσοί συμβολής δεν μεταβάλλονται πολύ στο χρόνο, δηλαδή μπορούμε να αγνοήσουμε τη χρονική εξάρτηση του  $\kappa_p$  και να το αντικαταστήσουμε με την αρχική τιμή του,  $\kappa_x = X_0$ . Με τις υποθέσεις αυτές έχουμε:

$$\frac{d}{dt} A_{int} = 8M\gamma_0 k_B T X_0^2$$

με λύση:

$$A_{int} = 8M\gamma_0 k_B T X_0^2 t = \gamma_0 \frac{(2X_0)^2}{\lambda_{dB}^2} t$$

όπου  $\lambda_{dB} = 1/\sqrt{2Mk_B T}$  είναι το μήκος κύματος de Broglie. Επομένως οι ταλαντώσεις στη συνάρτηση Wigner αποσβένουν εκθετικά με ρυθμό:

$$\tau_{\Delta X}^{-1} = \gamma_0 \frac{(\Delta X)^2}{\lambda_{dB}^2}$$

Για δυο Γκαουσιανά κυματοπακέτα αρχικά διαχωρισμένα μόνο στην ορμή κατά  $P_0$  (με  $X_0 = 0$ ), θα είναι  $\kappa_p = X_0 = 0$  και επομένως αρχικά θα έχουμε  $dA_{int}/dt = 0$ . Αυτό σημαίνει ότι το  $A_{int}$  θα παραμένει στην αρχική τιμή του,  $A_{int} = 0$ , μέχρι το  $\kappa_p$  αρχίσει να παίρνει τιμές διάφορες του μηδενός, και επομένως δεν θα υπάρχει καθόλου αποσυνοχή. Στην περίπτωση συστήματος με ασθενή απόσβεση, αποδεικνύεται στο [18] ότι  $\kappa_p(t) \propto X_c(t)$ , δηλαδή η τιμή του ακολουθεί τη τροχιά των κλασικών Γκαουσιανών κορυφών. Το  $X_c$  αρχικά είναι  $X_c(0) = X_0 = 0$  και αποκτά τιμές διάφορες του μηδενός στη χρονική κλίμακα της εσωτερικής δυναμικής του συστήματος. Έπειτα, σύμφωνα με τη διαφορική εξίσωση (4.18), το  $A_{int}$  αποκτά θετικές τιμές. Αυτό με τη σειρά του οδηγεί στην απόσβεση των ταλαντώσεων στον όρο συμβολής  $W_{int}(X, P, t)$ . Επομένως, στην περίπτωση της αρχικής υπέρθεσης στην ορμή μόνο, η αποσυνοχή εξαρτάται, πρώτον, από τη σχετικά αργή δυναμική χρονική κλίμακα η οποία οδηγεί στη δημιουργία υπέρθεσης στη θέση, και δεύτερον, από τη χωρική αποσυνοχή στη σύντομη χρονική κλίμακα  $\tau_{\Delta X}$ . Αυτό εξηγεί γιατί ο ρυθμός της αποσυνοχής στην περίπτωση της αρχικής υπέρθεσης δύο Γκαουσιανών κυματοπακέτων μόνο στην ορμή, είναι πολύ μικρότερος από τον ρυθμό αποσυνοχής στην περίπτωση αρχικής υπέρθεσης μόνο στη θέση.

Ποιες θα είναι όμως οι pointer καταστάσεις, δηλαδή καταστάσεις που προβάλλουν τη μέγιστη αντίσταση στην αποσυνοχή (με την έννοια ότι γίνονται ελάχιστα εναγκαλισμένες με το περιβάλλον); Για να απαντηθεί το ερώτημα αυτό πρέπει να υπολογιστεί η μεταβολή στην καθαρότητα (purity) της κατάστασης του συστήματος,  $\varsigma = \text{Tr}(\hat{\rho}_S^2)$ . Αγνοώντας τον συντελεστή απόσβεσης της ορμής  $\gamma$  (ασθενής απόσβεση), τον anomalous-

diffusion συντελεστή  $f$  (όριο των υψηλών θερμοκρασιών) και τη μεταβολή λόγω εσωτερικής δυναμικής του συστήματος, από την εξίσωση master (4.9) προκύπτει ότι η στιγμιαία μεταβολή στη καθαρότητα της κατάστασης είναι:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \varsigma(t) &= \text{Tr} \left( \frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} \hat{\rho}_S(t) + \hat{\rho}_S(t) \frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} \right) = -D \text{Tr} \left\{ \left[ \hat{X}, \left[ \hat{X}, \hat{\rho}_S(t) \right] \right] \hat{\rho}_S(t) \right. \\ &\quad \left. + \hat{\rho}_S(t) \left[ \hat{X}, \left[ \hat{X}, \hat{\rho}_S(t) \right] \right] \right\} = -2D \text{Tr} \left\{ \left[ \hat{X}, \left[ \hat{X}, \hat{\rho}_S(t) \right] \right] \hat{\rho}_S(t) \right\} \\ &= -4D \text{Tr} \left( \hat{X}^2 \hat{\rho}_S^2(t) - \hat{\rho}_S(t) \hat{X} \hat{\rho}_S(t) \hat{X} \right) = -4D \Delta X^2(t) \end{aligned}$$

όπου  $\Delta X^2(t) = \langle \hat{X}^2 \rangle_t - \langle \hat{X} \rangle_t^2$ . Βλέπουμε ότι η στιγμιαία μείωση της καθαρότητας (και επομένως ο βαθμός της αποσυνοχής) ελαχιστοποιείται για ελάχιστη τιμή του  $\Delta X^2(t)$ . Επομένως συμπεραίνουμε ότι οι στιγμιαίες pointer καταστάσεις (που επιλέγονται από το περιβάλλον λαμβάνοντας υπόψιν μόνο τη Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης) θα ήταν οι καταστάσεις που είναι πλήρως εντοπισμένες στη θέση (ιδιοκαταστάσεις θέσεις). Αυτό το περιμέναμε καθώς, όπως είδαμε στα προηγούμενα, η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης εξαρτάται μόνο από τη θέση του συστήματος με αποτέλεσμα το περιβάλλον να "παρακολουθεί" άμεσα τη θέση του συστήματος.

Ωστόσο, οι ιδιοκαταστάσεις θέσεις δεν μπορούν να θεωρηθούν ως pointer καταστάσεις, διότι πρέπει να ληφθεί υπόψιν και η εσωτερική δυναμική του συστήματος η οποία έχει μία έμμεση, αλλά σημαντική, επίπτωση. Ως γνωστόν, η Χαμιλτονιανή του αρμονικού ταλαντωτή περιστρέφει τη κατάστασή του στο χώρο των φάσεων, με αποτέλεσμα σε μια περίοδο ταλάντωσης  $\mathcal{T} = 2\pi/\Omega$ , η θέση και η ορμή να εναλλάσσουν τους ρόλους τους και η εξάπλωση στη μία μεταβλητή να μετατρέπεται σε εξάπλωση στην άλλη (δηλαδή η κατάσταση του συστήματος μεταβάλλεται έντονα). Οπότε, αντί να για τη στιγμιαία μεταβολή της καθαρότητας της κατάστασης του συστήματος, θεωρούμε τη μέση τιμή της μεταβολής της καθαρότητας σε μια περίοδο  $T$  ([28]):

$$\begin{aligned} \langle \varsigma(\mathcal{T}) - \varsigma(0) \rangle_{\mathcal{T}} &= -4D \frac{1}{\mathcal{T}} \int_0^{\mathcal{T}} dt \Delta X^2(t) = -4D \frac{1}{\mathcal{T}} \int_0^{\mathcal{T}} dt \left( \langle \hat{X}^2 \rangle_t - \langle \hat{X} \rangle_t^2 \right) \\ &= -4D \frac{1}{\mathcal{T}} \int_0^{\mathcal{T}} dt \left\langle \left( \hat{X} - \langle \hat{X} \rangle_t \right)^2 \right\rangle_t \end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση (4.7) που δίνει το  $\hat{X}$  στην εικόνα αλληλεπίδρασης:

$$\hat{X}(\tau) = \hat{X} \cos(\Omega\tau) + \frac{1}{M\Omega} \hat{P} \sin(\Omega\tau)$$

θα έχουμε:

$$\begin{aligned} \langle \varsigma(\mathcal{T}) - \varsigma(0) \rangle_{\mathcal{T}} &= -4D \frac{1}{\mathcal{T}} \int_0^{\mathcal{T}} dt \left\langle \left[ \left( \hat{X} - \langle \hat{X} \rangle \right) \cos(\Omega t) + \frac{1}{M\Omega} \left( \hat{P} - \langle \hat{P} \rangle \right) \sin(\Omega t) \right]^2 \right\rangle_0 \\ &= -4D \left\{ \underbrace{\left\langle \left( \hat{X} - \langle \hat{X} \rangle \right)^2 \right\rangle_0}_{\Delta X_0^2} \underbrace{\frac{1}{\mathcal{T}} \int_0^{\mathcal{T}} dt \cos^2(\Omega t)}_{1/2} + \frac{1}{M^2\Omega^2} \underbrace{\left\langle \left( \hat{P} - \langle \hat{P} \rangle \right)^2 \right\rangle_0}_{\Delta P_0^2} \underbrace{\frac{1}{\mathcal{T}} \int_0^{\mathcal{T}} dt \sin^2(\Omega t)}_{1/2} \right\} \end{aligned}$$

Επομένως

$$\varsigma(\mathcal{T}) - \varsigma(0) = -2D \left( \Delta X_0^2 + \frac{\Delta P_0^2}{M^2 \Omega^2} \right)$$

όπου  $\Delta X_0^2 = \Delta X^2(t=0)$  και  $\Delta P_0^2 = \Delta P^2(t=0)$ . Από την εξίσωση αυτή βλέπουμε ότι η μέση μείωση της καθαρότητας (και ως εκ τούτου ο βαθμός της αποσυνοχής) ελαχιστοποιείται για  $\Delta X_0^2$  και  $\Delta P_0^2$  τέτοια που να ελαχιστοποιούν την ποσότητα στην παρένθεση, λαμβάνοντας υπόψιν τη σχέση αβεβαιότητας  $\Delta X_0^2 \Delta P_0^2 \geq 1/4$ . Προκύπτει ότι η κατάλληλη επιλογή είναι:

$$\Delta X_0^2 = \frac{1}{2M\Omega}, \quad \Delta P_0^2 = \frac{M\Omega}{2} \quad (4.19)$$

Επομένως οι υπερεπιλεγμένες (superselected) από το περιβάλλον pointer καταστάσεις στη χβαντική κίνηση Brown είναι Γκαουσιανές συνεκτικές καταστάσεις ελάχιστης αβεβαιότητας, με  $\Delta X_0^2$  και  $\Delta P_0^2$  που δίνονται από την (4.19), δηλαδή καταστάσεις που είναι εντοπισμένες στον χώρο των φάσεων (δεν μιλάμε βέβαια για τέλειο εντοπισμό ταυτόχρονα στη θέση και ορμή, καθώς αυτό δεν επιτρέπεται από τους νόμους της χβαντομηχανικής). Αλλά δεν πρέπει να ξεχνάμε ότι τα διάφορα συμπεράσματα που βγάλαμε, ισχύουν για τη συγκεκριμένη περίπτωση και για τις υποθέσεις που κάναμε.

## 4.2 Μοντέλο σπιν-μποζόνιο

Ένα σύστημα που έχει δύο ενεργειακά ελάχιστα διαχωρισμένα με ένα φράγμα (διπλό πηγάδι δυναμικού) και η ενέργεια του είναι αρκετά χαμηλή σχετικά με το ύψος του ενεργειακού φράγματος, ανήκει στην κατηγορία συστημάτων δύο επιπέδων. Σε πολλές περιπτώσεις ένα τέτοιο σύστημα καταλαμβάνει την κατάσταση χαμηλότερης ενέργειας  $|0\rangle$  ή  $|1\rangle$ , που αντιστοιχούν στον εντοπισμό του στο αριστερό ή στο δεξί πηγάδι αντίστοιχα, και η εσωτερική δυναμική του οφείλεται στο χβαντικό φαινόμενο σήραγγας που προκαλεί μετάβαση ανάμεσα στα δύο πηγάδια. Αν η ενεργειακή διαφορά ανάμεσα στις καταστάσεις  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$  είναι μικρή σχετικά με την ενεργειακή απόσταση μεταξύ των ενεργειακών επιπέδων σε κάθε πηγάδι, η μετάβαση από ένα πηγάδι στο άλλο γίνεται αποκλειστικά ανάμεσα στις καταστάσεις  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$ . Επομένως ένα τέτοιο σύστημα μπορεί αποτελεσματικά να περιγραφεί από τις δύο καταστάσεις βάσης  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$ . Τέτοια συστήματα δύο επιπέδων (γνωστά ως qubits) παίζουν σημαντικό ρόλο στην χβαντική θεωρία πληροφορίας.

Στο μοντέλο σπιν-μποζόνιο έχουμε ένα qubits που αλληλεπιδρά με μια μεγάλη δεξαμενή από κανονικούς τρόπους ταλάντωσης μποζονικού πεδίου, ή πιο συγκεκριμένα, ένα σωματίδιο με σπιν 1/2 που είναι συζευγμένο με ένα περιβάλλον από αρμονικούς ταλαντωτές. Αρχικά θα μελετήσουμε ένα απλοποιημένο μοντέλο στο οποίο η Χαμιλιτονιανή του συστήματος δεν περιλαμβάνει τον όρο "tunneling", υπεύθυνο για το χβαντικό φαινόμενο σήραγγας (quantum tunneling). Έπειτα θα γενικεύσουμε το απλοποιημένο μοντέλο αυτό σε ένα πλήρες μοντέλο σπιν-μποζόνιο, προσθέτοντας στη Χαμιλιτονιανή τον όρο αυτό.

### 4.2.1 Απλοποιημένο μοντέλο σπιν-μποζόνιο

Όπως είπαμε, το μοντέλο σπιν-μποζόνιο αποτελείται από ένα σωματίδιο με σπιν-1/2 συζευγμένο με περιβάλλον από αρμονικούς ταλαντωτές. Επομένως η συνολική Χαμιλτονιανή θα είναι της μορφής:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{int}$$

Η Χαμιλτονιανή του σωματιδίου με σπιν-1/2 είναι:

$$\hat{H}_S = \frac{1}{2} \omega_0 \hat{\sigma}_z - \frac{1}{2} \Delta_0 \hat{\sigma}_x$$

όπου  $\omega_0$  είναι η ενεργειακή διαφορά ανάμεσα στις καταστάσεις βάσεις  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$  (ιδιοκαταστάσεις του  $\hat{\sigma}_z$ ). Ο δεύτερος όρος της Χαμιλτονιανής αυτής είναι ο όρος tunneling:

$$\hat{H}_S^{tunnel} = -\frac{1}{2} \Delta_0 \hat{\sigma}_x = -\frac{1}{2} \Delta_0 (|0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|)$$

όπου το  $\Delta_0$  είναι στοιχείο πίνακα για το tunneling. Από τη μορφή αυτή φαίνεται ότι η  $\hat{H}_S^{tunnel}$  είναι υπεύθυνη για την εσωτερική δυναμική του συστήματος, δηλαδή για τη μετάβαση ανάμεσα στις καταστάσεις  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$  (φαινόμενο σήραγγας). Ωστόσο για το απλοποιημένο μοντέλο σπιν-μποζόνιο αγνοούμε τον όρο tunneling  $\hat{H}_S^{tunnel}$ , οπότε η Χαμιλτονιανή του συστήματος θα είναι διαγώνια στη βάση των ιδιοκαταστάσεων του  $\hat{\sigma}_z$ :

$$\hat{H}'_S = \frac{1}{2} \omega_0 \hat{\sigma}_z$$

Η Χαμιλτονιανή του περιβάλλοντος αποτελούμενου από αρμονικούς ταλαντωτές, κατά τα γνωστά, είναι:

$$\hat{H}_E = \sum_i \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \hat{q}_i^2 \right)$$

Τέλος, η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης του σωματιδίου σπιν-1/2 με το περιβάλλον αυτό είναι:

$$\hat{H}_{int} = \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i c_i \hat{q}_i$$

Επομένως η συνολική Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \omega_0 \hat{\sigma}_z + \sum_i \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \hat{q}_i^2 \right) + \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i c_i \hat{q}_i$$

Ισοδύναμα, μπορούμε να γράψουμε τη συνολική Χαμιλτονιανή σε μια πιο συμπυκνωμένη μορφή με τη βοήθεια των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής  $\hat{a}_i^\dagger$  και  $\hat{a}_i$  για τον κάθε τρόπο ταλάντωσης. Έχουμε:

$$\hat{q}_i = \sqrt{\frac{1}{2m_i\omega_i}} (\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger)$$

$$\hat{p}_i = -i\sqrt{\frac{m_i\omega_i}{2}} (\hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger)$$

Έτσι, η Χαμιλτονιανή του περιβάλλοντος, αγνοώντας τον όρο της ενέργειας του κενού  $\sum_i \omega_i/2$ , γίνεται:

$$\hat{H}_E = \sum_i \omega_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$$

και η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης:

$$\hat{H}_{int} = \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i \left( g_i \hat{a}_i^\dagger + g_i^* \hat{a}_i \right)$$

όπου  $g_i = \sqrt{\frac{1}{2m_i\omega_i}} c_i$ . Επομένως η συνολική Χαμιλτονιανή γίνεται:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \omega_0 \hat{\sigma}_z + \sum_i \omega_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i \left( g_i \hat{a}_i^\dagger + g_i^* \hat{a}_i \right) \quad (4.20)$$

Λόγω της απουσίας του τελεστή  $\hat{\sigma}_x$ , υπεύθυνου για τη μετάβαση μεταξύ των καταστάσεων  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$ , ο πληθυσμός των δύο επιπέδων του συστήματος είναι διατηρήσιμη ποσότητα. Επίσης, δεν υπάρχει ανταλλαγή ενέργειας μεταξύ του συστήματος και του περιβάλλοντος, που σημαίνει ότι έχουμε ένα μοντέλο αποσυνοχής χωρίς dissipation. Παρόλο που στα ρεαλιστικά συστήματα υπάρχει το dissipation, η χρονική κλίμακα για την αποσυνοχή είναι συνήθως πολλές τάξεις μεγέθους μικρότερη από τη χρονική κλίμακα για το dissipation, επομένως το μοντέλο αυτό μπορεί να θεωρηθεί καλό για διαδικασίες γρήγορης αποσυνοχής κατά την οποία το dissipation είναι αμελητέο.

Για την επίλυση του μοντέλου με Χαμιλτονιανή (4.20), περνάμε στην εικόνα αλληλεπίδρασης. Στην εικόνα αυτή η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδραση είναι:

$$\hat{H}_{int}(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{H}_{int} e^{-i\hat{H}_0 t} = \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i \left( g_i \hat{a}_i^\dagger e^{i\omega_i t} + g_i^* \hat{a}_i e^{-i\omega_i t} \right)$$

καθώς, όπως αποδείξαμε στο (4.2) και (4.3) ισχύει:

$$\hat{a}_i(t) = \hat{a}_i e^{-i\omega_i t}$$

$$\hat{a}_i^\dagger(t) = \hat{a}_i^\dagger e^{i\omega_i t}$$

και

$$\frac{d\hat{\sigma}_z(t)}{dt} = ie^{i\hat{H}_0 t} [\hat{H}_0, \hat{\sigma}_z] e^{-i\hat{H}_0 t} = 0$$

$$\Rightarrow \hat{\sigma}_z(t) = \hat{\sigma}_z$$

όπου  $\hat{H}_0$  είναι η ελεύθερη Χαμιλτονιανή  $\hat{H}_0 = \hat{H}_S + \hat{H}_E$ .

Ο τελεστής χρονικής εξέλιξης  $\hat{U} = e^{-i\hat{H}_{int} t}$  της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος  $\mathcal{S}$ , στην εικόνα αλληλεπίδρασης (γνωστός ως τελεστής Dyson) είναι:

$$\hat{U}(t) = \mathcal{T}_\leftarrow \exp \left[ -i \int_0^t dt' \hat{H}_{int}(t') \right]$$



όπου  $\mathcal{T}_\leftarrow$  είναι ο τελεστής χρονικής διάταξης (time-ordering operator). Ο τελεστής Dyson μπορεί να αναπτυχθεί σε σειρά Dyson ως:

$$\hat{U}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \\ \times \int_0^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{T}_\leftarrow \left\{ \hat{H}_{int}(t_1) \hat{H}_{int}(t_2) \cdots \hat{H}_{int}(t_n) \right\}$$

Αποδεικνύεται στο [20] ότι με τη βοήθεια του μεταθέτη:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_{int}(t), \hat{H}_{int}(t')] &= \sum_{i,j} \left\{ \left( g_i \hat{a}_i^\dagger e^{i\omega_i t} + g_i^* \hat{a}_i e^{-i\omega_i t} \right) \left( g_j \hat{a}_j^\dagger e^{i\omega_j t'} + g_j^* \hat{a}_j e^{-i\omega_j t'} \right) \right. \\ &\quad \left. - \left( g_j \hat{a}_j^\dagger e^{i\omega_j t'} + g_j^* \hat{a}_j e^{-i\omega_j t'} \right) \left( g_i \hat{a}_i^\dagger e^{i\omega_i t} + g_i^* \hat{a}_i e^{-i\omega_i t} \right) \right\} \\ &= \sum_{i,j} \left\{ g_i g_j^* e^{i(\omega_i t - \omega_j t')} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + g_i^* g_j e^{i(\omega_j t' - \omega_i t)} \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \right. \\ &\quad \left. - g_i^* g_j e^{i(\omega_j t' - \omega_i t)} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i - g_i g_j^* e^{i(\omega_i t - \omega_j t')} \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger \right\} \\ &= \sum_{i,j} \delta_{ij} \left\{ g_i^* g_j e^{i(\omega_j t' - \omega_i t)} - g_i g_j^* e^{i(\omega_i t - \omega_j t')} \right\} \\ &= \sum_i |g_i|^2 \left\{ e^{-i\omega_i(t-t')} - e^{i\omega_i(t-t')} \right\} \\ &= -2i \sum_i |g_i|^2 \sin \omega_i(t-t') \end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι  $\hat{\sigma}_z^2 = I$ ,  $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$  και  $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0$ , μπορούμε να γράψουμε τον τελεστή  $\hat{U}(t)$  ως:

$$\hat{U}(t) = e^{i\phi(t)} \exp \left[ -i \int_0^t dt' \hat{H}_{int}(t') \right] \equiv e^{i\phi(t)} \hat{V}(t)$$

όπου  $e^{i\phi(t)}$  είναι απλώς ο ολικός χρονοεξαρτώμενος παράγοντας φάσης τον οποίο θα αγνοούμε στα επόμενα. Υπολογίζοντας το ολοκλήρωμα στο εκθετικό:

$$\begin{aligned} -i \int_0^t dt' \hat{H}_{int}(t') &= -i \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i \left( g_i \hat{a}_i^\dagger \int_0^t dt' e^{i\omega_i t'} + g_i^* \hat{a}_i \int_0^t dt' e^{-i\omega_i t'} \right) \\ &= \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i \left[ \frac{g_i}{\omega_i} \hat{a}_i^\dagger (1 - e^{i\omega_i t}) - \frac{g_i^*}{\omega_i} \hat{a}_i (1 - e^{-i\omega_i t}) \right] \end{aligned}$$

παίρνουμε:

$$\hat{V}(t) = \exp \left\{ \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i \left[ \lambda_i(t) \hat{a}_i^\dagger - \lambda_i^*(t) \hat{a}_i \right] \right\} \quad (4.21)$$

όπου θέσαμε:

$$\lambda_i(t) \equiv \frac{2g_i}{\omega_i} (1 - e^{i\omega_i t}) \quad (4.22)$$

Θεωρούμε ότι η αρχική κατάσταση του συνολικού συστήματος  $\mathcal{S} + \mathcal{E}$  είναι:

$$|\Psi(0)\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle) |\Phi_{\mathcal{E}}\rangle$$

όπου  $(a|0\rangle + b|1\rangle)$  είναι η αρχική κατάσταση του συστήματος, ενώ  $|\Phi_{\mathcal{E}}\rangle$  είναι η αρχική κατάσταση του περιβάλλοντος, και γράφοντας  $|\psi\rangle|\phi\rangle$  εννοούμε  $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$ . Υποθέσαμε δηλαδή ότι αρχικά (για  $t = 0$ ) δεν υπάρχουν κβαντικοί συσχετισμοί ανάμεσα στο σύστημα  $\mathcal{S}$  και το περιβάλλον  $\mathcal{E}$ . Η χρονική εξέλιξη δίνεται από τη δράση του τελεστή  $\hat{V}(t)$  (4.21) στην  $|\Psi(0)\rangle$ :

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \hat{V}(t) |\Psi(0)\rangle = \exp \left\{ \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i [\lambda_i(t) \hat{a}_i^\dagger - \lambda_i^*(t) \hat{a}_i] \right\} (a|0\rangle + b|1\rangle) |\Phi_{\mathcal{E}}\rangle \\ &= a \exp \left\{ \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i [\lambda_i(t) \hat{a}_i^\dagger - \lambda_i^*(t) \hat{a}_i] \right\} |0\rangle |\Phi_{\mathcal{E}}\rangle \\ &\quad + b \exp \left\{ \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i [\lambda_i(t) \hat{a}_i^\dagger - \lambda_i^*(t) \hat{a}_i] \right\} |1\rangle |\Phi_{\mathcal{E}}\rangle \end{aligned} \quad (4.23)$$

Προτού προχωρήσουμε, ας δούμε ποιο είναι το αποτέλεσμα της παρακάτω πράξης:

$$\exp \left( \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i \hat{A}_i \right) |\psi_{\pm}\rangle |\phi\rangle$$

όπου  $|\psi_+\rangle = |0\rangle$  και  $|\psi_-\rangle = |1\rangle$ , με αποτέλεσμα  $\hat{\sigma}_z |\psi_{\pm}\rangle = \pm |\psi_{\pm}\rangle$ . Αναπτύσσοντας το εκθετικό σε σειρά Taylor παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i \hat{A}_i \right\} |\psi_{\pm}\rangle |\phi\rangle &= |\psi_{\pm}\rangle |\phi\rangle + \left( \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i \hat{A}_i \right) |\psi_{\pm}\rangle |\phi\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2!} \left[ (\hat{\sigma}_z)^2 \otimes \left( \sum_i \hat{A}_i \right)^2 \right] |\psi_{\pm}\rangle |\phi\rangle + \dots = |\psi_{\pm}\rangle |\phi\rangle + |\psi_{\pm}\rangle \otimes \sum_i (\pm \hat{A}_i) |\phi\rangle \\ &\quad + |\psi_{\pm}\rangle \otimes \frac{1}{2!} \left[ \sum_i (\pm \hat{A}_i) \right]^2 |\phi\rangle + \dots = |\psi_{\pm}\rangle \otimes \exp \left[ \sum_i (\pm \hat{A}_i) \right] |\phi\rangle \\ &= |\psi_{\pm}\rangle \otimes \prod_i \exp (\pm \hat{A}_i) |\phi\rangle \end{aligned} \quad (4.24)$$

Επομένως η (4.23) γίνεται:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= a|0\rangle \prod_i \hat{D}[\lambda_i(t)/2] |\Phi_{\mathcal{E}}\rangle + b|1\rangle \prod_i \hat{D}[-\lambda_i(t)/2] |\Phi_{\mathcal{E}}\rangle \\ &\equiv a|0\rangle |\mathcal{E}_+(t)\rangle + b|1\rangle |\mathcal{E}_-(t)\rangle \end{aligned} \quad (4.25)$$

όπου

$$\hat{D}[\lambda_i(t)] \equiv \exp [\lambda_i(t) \hat{a}_i^\dagger - \lambda_i^*(t) \hat{a}_i] \quad (4.26)$$

είναι ο τελεστής μετατόπισης (displacement operator) και παράγει τη χρονική εξέλιξη του  $i$ -οστού περιβάλλοντικού ταλαντωτή. Οι καταστάσεις  $|\mathcal{E}_\pm(t)\rangle$  είναι οι σχετικές καταστάσεις του περιβάλλοντος που εξαρτώνται από την αρχική κατάσταση του  $|\Phi_\mathcal{E}\rangle$ . Παρακάτω μελετάμε δύο περιπτώσεις της αρχικής κατάστασης του περιβάλλοντος: 1) περιβάλλον στη θεμελιώδη ενεργειακή κατάσταση (energy ground state), και 2) περιβάλλον σε θερμική ισορροπία.

### Περιβάλλον στη θεμελιώδη κατάσταση

Στην περίπτωση αυτή, κάθε αρμονικός ταλαντωτής του περιβάλλοντος βρίσκεται αρχικά στη θεμελιώδη ενεργειακή κατάσταση  $|E_0\rangle$ . Οπότε

$$|\Phi_\mathcal{E}\rangle = \prod_i |E_0\rangle_i$$

Η δράση του τελεστή μετατόπισης  $\hat{D}(\lambda)$  (4.26) στη θεμελιώδη κατάσταση  $|E_0\rangle$  την μετατοπίζει στη συνεκτική κατάσταση πλάτους  $\lambda$  (εξ ορισμού είναι η ιδιοκατάσταση του τελεστή καταστροφής  $\hat{a}$  με ιδιοτιμή  $\lambda$ ,  $\hat{a}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ ), και αποτελεί το ανάλογο της κατάστασης του κλασικού αρμονικού ταλαντωτή):

$$\hat{D}(\lambda)|E_0\rangle = \exp(\lambda\hat{a}^\dagger - \lambda^*\hat{a})|E_0\rangle \equiv |\lambda\rangle$$

Επομένως

$$|\mathcal{E}_\pm(t)\rangle = \prod_i \hat{D}[\pm\lambda_i(t)/2]|\Phi_\mathcal{E}\rangle = \prod_i \exp\left[\lambda_i(t)\hat{a}_i^\dagger/2 \pm \lambda_i^*(t)\hat{a}_i/2\right]|E_0\rangle_i = \prod_i |\pm\lambda_i(t)/2\rangle$$

Η ερμηνεία της κατάστασης (4.25) είναι η εξής: αν το σύστημα  $\mathcal{S}$  βρίσκεται αρχικά στην κατάσταση  $|0\rangle$  (ή  $|1\rangle$ ), η κατάσταση του περιβάλλοντος μετατοπίζεται στην  $|\mathcal{E}_+(t)\rangle$  (ή  $|\mathcal{E}_-(t)\rangle$ ), και αν οι καταστάσεις  $|\mathcal{E}_\pm(t)\rangle$  είναι αρκετά διαχωρίσιμες (η υπερκάλυψη  $\langle\mathcal{E}_-(t)|\mathcal{E}_+(t)\rangle$  είναι μικρή), τότε η κβαντική συνοχή ανάμεσα στις  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$  χάνεται. Αυτό φαίνεται αμέσως αν γράψουμε την ανοιγμένη μήτρα πυκνότητας του  $\mathcal{S}$ :

$$\hat{\rho}_\mathcal{S} = \text{Tr}_\mathcal{E}(\hat{\rho}) = |a|^2|0\rangle\langle 0| + |b|^2|1\rangle\langle 1| + ab^*|0\rangle\langle 1| + \langle\mathcal{E}_-(t)|\mathcal{E}_+(t)\rangle + a^*b|1\rangle\langle 0| + \langle\mathcal{E}_+(t)|\mathcal{E}_-(t)\rangle$$

Για μικρή υπερκάλυψη  $\langle\mathcal{E}_-(t)|\mathcal{E}_+(t)\rangle \approx 0$  οι όροι συμβολής εξαφανίζονται. Για να ποσοτικοποιήσουμε τη διαδικασία αποσυνοχής αυτής, υπολογίζουμε τη χρονική εξέλιξη της υπερκάλυψης  $r(t) \equiv \langle\mathcal{E}_-(t)|\mathcal{E}_+(t)\rangle$  που παίζει τον ρόλο του παράγοντα αποσυνοχής. Για δύο συνεκτικές καταστάσεις  $|\lambda\rangle$  και  $|\mu\rangle$  έχουμε:

$$\langle\lambda|\mu\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2 - \frac{1}{2}|\mu|^2 + \lambda^*\mu\right)$$

Επομένως

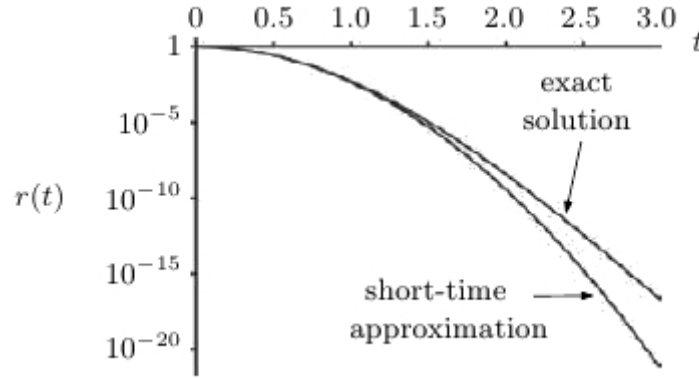
$$r(t) = \langle\mathcal{E}_-(t)|\mathcal{E}_+(t)\rangle = \prod_i \exp\left[-\frac{1}{2}|\lambda_i(t)|^2\right] = \exp\left[-\sum_i \frac{4|g_i|^2}{\omega_i^2}(1 - \cos\omega_i t)\right] \quad (4.27)$$

Για χρόνους πολύ μικρότερους από τη δυναμική χρονική κλίμακα  $\omega_i^{-1}$ ,  $\omega_i t \ll 1$ , ισχύει προσεγγιστικά:

$$\cos \omega_i t \approx 1 - \frac{1}{2} \omega_i^2 t^2$$

$$r(t) \approx \exp \left( - \sum_i 2|g_i|^2 t^2 \right) \quad (4.28)$$

Παρακάτω φαίνεται το γράφημα των παραγόντων αποσυνοχής (4.27) και (4.28) για περιβάλλον αποτελούμενο από  $N = 20$  αρμονικούς ταλαντωτές και για τυχαία επιλεγμένες τιμές των  $g_i$  και  $\omega_i$  από το διάστημα  $[0, 1]$ :



Σημειώνουμε ότι για πεπερασμένο αριθμό αρμονικών ταλαντωτών  $N$ , η  $r(t)$  θα επιστρέψει στην αρχική της τιμή μετά από ένα πεπερασμένο χρόνο (που για μεγάλο περιβάλλον είναι πολύ μεγάλος). Αυτό οφείλεται στο ότι η συνάρτηση (4.27) είναι περιοδική στον χρόνο.

### Περιβάλλον σε θερμική ισορροπία

Στην γενική περίπτωση αυτή, κάθε αρμονικός ταλαντωτής του περιβάλλοντος βρίσκεται αρχικά στη θερμική κατάσταση:

$$\hat{\rho}_{\mathcal{E}_i} = \frac{1}{Z_i} \exp \left( - \frac{\omega_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i}{k_B T} \right) \equiv \frac{1}{Z_i} \exp \left( - \frac{\hat{H}_{\mathcal{E}_i}}{k_B T} \right)$$

όπου

$$Z_i = \text{Tr}_{\mathcal{E}_i} \left[ \exp \left( - \frac{\hat{H}_{\mathcal{E}_i}}{k_B T} \right) \right]$$

είναι η συνάρτηση επιμερισμού για τον  $i$ -οστό τρόπο ταλάντωσης. Επομένως, η αρχική κατάσταση του συνολικού συστήματος  $\mathcal{S}\mathcal{E}$  είναι:

$$\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_{\mathcal{S}}(0) \otimes_i \hat{\rho}_{\mathcal{E}_i} = \hat{\rho}_{\mathcal{S}}(0) \otimes_i \frac{1}{Z_i} \exp \left( - \frac{\hat{H}_{\mathcal{E}_i}}{k_B T} \right)$$

Η χρονική εξέλιξη δίνεται από τη σχέση:

$$\hat{\rho}_{\mathcal{S}}(t) = \text{Tr}_{\mathcal{E}} \left[ \hat{V}(t) \hat{\rho}(0) \hat{V}^{-1}(t) \right]$$

όπου ο τελεστής  $\hat{V}(t)$  δίνεται από τη σχέση (4.21). Επειδή ισχύει η μεταθετική σχέση  $[\hat{H}, \hat{\sigma}_z] = 0$ , οι διαγώνιοι όροι  $\rho_S^{(i,i)}(t)$  της  $\hat{\rho}_S(t)$  στην βάση  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  θα είναι σταθεροί στο χρόνο:

$$\rho_S^{(i,i)}(t) = \rho_S^{(i,i)}(0), \quad i = 0, 1$$

Οπότε χρειάζεται να υπολογίσουμε μόνο τους μη-διαγώνιους όρους  $\rho_S^{(0,1)}(t) = [\rho_S^{(1,0)}(t)]^*$ . Με τη βοήθεια της (4.24) παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \rho_S^{(0,1)}(t) &= \langle 0 | \hat{\rho}_S(t) | 1 \rangle = \langle 0 | \text{Tr}_{\mathcal{E}} [\hat{V}(t) \hat{\rho}(0) \hat{V}^{-1}(t)] | 1 \rangle \\ &= \rho_S^{(0,1)}(0) \text{Tr}_{\mathcal{E}} \left\{ \prod_i \hat{D}[\lambda_i(t)] \otimes \hat{\rho}_{\mathcal{E}_i} \right\} \\ &= \rho_S^{(0,1)}(0) \prod_i \text{Tr}_{\mathcal{E}_i} \left\{ \hat{D}[\lambda_i(t)] \hat{\rho}_{\mathcal{E}_i} \right\} = \rho_S^{(0,1)}(0) \prod_i \left\langle \hat{D}[\lambda_i(t)] \right\rangle_{\hat{\rho}_{\mathcal{E}_i}} \end{aligned}$$

όπου

$$r(t) = \prod_i \left\langle \hat{D}[\lambda_i(t)] \right\rangle_{\hat{\rho}_{\mathcal{E}_i}} = \prod_i \left\langle \exp [\lambda_i(t) \hat{a}_i^\dagger - \lambda_i^*(t) \hat{a}_i] \right\rangle_{\hat{\rho}_{\mathcal{E}_i}}$$

είναι ο παράγοντας αποσυνσχής. Η αναμενόμενη τιμή:

$$\chi(\lambda_i, t) \equiv \left\langle \hat{D}[\lambda_i(t)] \right\rangle_{\hat{\rho}_{\mathcal{E}_i}} = \left\langle \exp [\lambda_i(t) \hat{a}_i^\dagger - \lambda_i^*(t) \hat{a}_i] \right\rangle_{\hat{\rho}_{\mathcal{E}_i}}$$

είναι η χαρακτηριστική συνάρτηση Wigner του  $i$ -οστού τρόπου ταλάντωσης. Παρατηρώντας ότι η  $\chi(\lambda_i, t)$  αναπαριστά μια Γκαουσιανή συνάρτηση, προκύπτει ότι [3]:

$$\chi(\lambda_i, t) = \exp \left[ -\frac{1}{2} |\lambda_i(t)|^2 \left\langle \{ \hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger \} \right\rangle_{\hat{\rho}_{\mathcal{E}_i}} \right] = \exp \left[ -\frac{1}{2} |\lambda_i(t)|^2 \coth(\omega_i/2k_B T) \right]$$

Επομένως, αντικαταστήσουμε και χρησιμοποιώντας τη σχέση (4.22) που δίνει το  $\lambda_i(t)$ , λαμβάνουμε:

$$\begin{aligned} r(t) &= \prod_i \exp \left[ -\frac{1}{2} |\lambda_i(t)|^2 \coth(\omega_i/2k_B T) \right] \\ &= \exp \left[ -4 \sum_i \frac{|g_i|^2}{\omega_i^2} (1 - \cos \omega_i t) \coth(\omega_i/2k_B T) \right] \equiv e^{\Gamma(t)} \end{aligned}$$

όπου θέσαμε:

$$\Gamma(t) = -4 \sum_i \frac{|g_i|^2}{\omega_i^2} (1 - \cos \omega_i t) \coth(\omega_i/2k_B T) \quad (4.29)$$

Υποθέτουμε τώρα ότι το περιβάλλον  $\mathcal{E}$  είναι αρκετά μεγάλο ώστε να μπορούμε να περάσουμε στο συνεχές όριο, αντικαθιστώντας το άθροισμα πάνω στις διακριτές σταθερές σύζευξης  $g_i$  με το ολοκλήρωμα της φασματικής πυκνότητας  $J(\omega)$ :

$$\sum_i |g_i|^2 \rightarrow \int_0^\infty d\omega J(\omega)$$

Έτσι η συνάρτηση  $\Gamma(t)$  γίνεται:

$$\Gamma(t) = - \int_0^\infty d\omega \frac{4J(\omega)}{\omega^2} (1 - \cos \omega t) \coth(\omega/2k_B T) \quad (4.30)$$

Προφανώς, η φασματική συνάρτηση:

$$J(\omega) = \sum_i |g_i|^2 \delta(\omega - \omega_i)$$

μας δίνει πίσω την (4.29).

Όπως και στην κβαντική κίνηση Brown, θεωρούμε ότι η φασματική συνάρτηση είναι ωμική για μικρές συχνότητες ( $J(\omega) \propto \omega$ ), με συχνότητα αποκοπής  $\Lambda$  στις υψηλές συχνότητες. Ωστόσο αυτή τη φορά επιλέγουμε μια εκθετική μορφή αποκοπής  $e^{-\omega/\Lambda}$ . Οπότε

$$J(\omega) = \frac{J_0}{4} \omega e^{-\omega/\Lambda}$$

όπου  $J_0$  είναι μια αδιάστατη σταθερά και μπορούμε να θέσουμε  $J_0 = 0$ . Με τη φασματική πυκνότητα αυτή, η (4.30) γίνεται:

$$\Gamma(t) = - \int_0^\infty d\omega e^{-\omega/\Lambda} \frac{1 - \cos \omega t}{\omega} \coth(\omega/2k_B T)$$

Είναι χρήσιμο να τη σπάσουμε σε δύο τμήματα,  $\Gamma_{vac}(t)$  για τις κβαντικές διακυμάνσεις του κενού, και  $\Gamma_{th}(t)$  για τις θερμικές διακυμάνσεις στη θερμική δεξαμενή:

$$\Gamma(t) = \Gamma_{vac}(t) + \Gamma_{th}(t)$$

Η συνεισφορά του κενού μπορεί να υπολογιστεί ακριβώς:

$$\Gamma_{vac}(t) \equiv - \int_0^\infty d\omega e^{-\omega/\Lambda} \frac{1 - \cos \omega t}{\omega} = -\frac{1}{2} \ln(1 + \Lambda^2 t^2)$$

Είναι ανεξάρτητη από τη θερμοκρασία και περιγράφει πως οι κβαντικές διακυμάνσεις του κενού επηρεάζουν τη συνοχή ανοιχτού συστήματος. Η θερμική συνεισφορά στην συνάρτηση  $\Gamma(t)$  είναι:

$$\begin{aligned} \Gamma_{th}(t) &\equiv - \int_0^\infty d\omega e^{-\omega/\Lambda} \frac{1 - \cos \omega t}{\omega} [\coth(\omega/2k_B T) - 1] \\ &= -\frac{1}{\beta} \int_0^t ds \int_0^\infty dx e^{-k_B T x/\Lambda} [\coth(x/2) - 1] \sin(sx/\beta) \end{aligned}$$

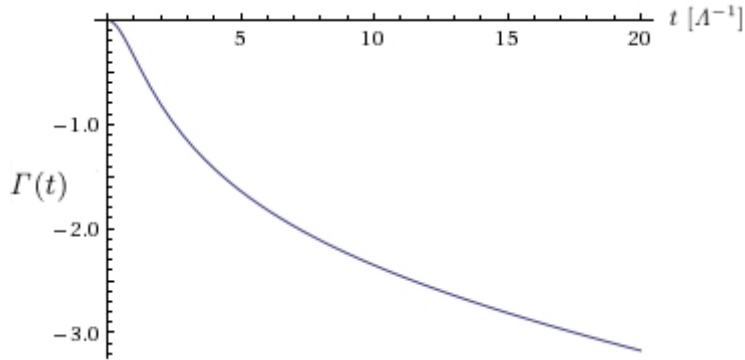
όπου  $\beta = 1/k_B T$ . Αν υποθέσουμε ότι η θερμική ενέργεια  $k_B T$  του περιβάλλοντος είναι πολύ μικρότερη από τη συχνότητα αποκοπής  $\Lambda$ ,  $k_B T \ll \Lambda$ , τότε:

$$\begin{aligned} \Gamma_{th}(t) &\approx -\frac{1}{\beta} \int_0^t ds \int_0^\infty dx [\coth(x/2) - 1] \sin(sx/\beta) \\ &= -\ln \left[ \frac{\sinh(t/\tau_B)}{t/\tau_B} \right] \end{aligned}$$

όπου  $\tau_B = \beta/\pi$ . Επομένως

$$\Gamma(t) = -\frac{1}{2} \ln(1 + \Lambda^2 t^2) - \ln \left[ \frac{\sinh(t/\tau_B)}{t/\tau_B} \right] = \ln \left[ \frac{\pi t}{\beta \sqrt{1 + \Lambda^2 t^2} \sinh(t/\tau_B)} \right]$$

Παρακάτω φαίνεται η γραφική παράσταση της  $\Gamma(t)$  για  $k_B T = \Lambda/60$ .



Παρατηρούμε ότι η  $\Gamma(t)$  μειώνεται με τον χρόνο, επομένως ο παράγοντας αποσυνοχής  $r(t) = e^{\Gamma(t)}$  μειώνεται επίσης, με αποτέλεσμα να καταστρέφεται η συνοχή του συστήματος.

Διακρίνουμε τρεις χαρακτηριστικές χρονικές κλίμακες:

1.  $t \ll \Lambda^{-1}$  και  $t \ll \tau_B$  (κλίμακα μικρών χρόνων):

$$\Gamma(t) \approx \Gamma_{vac}(t) \approx -\frac{1}{2}\Lambda^2 t^2$$

Στη χρονική κλίμακα αυτή η συνεισφορά της  $\Gamma_{th}(t)$  είναι μηδενική και συνεισφέρει ελάχιστα μόνο η  $\Gamma_{vac}(t) \ll 1$ . Επομένως ο παράγοντας αποσυνοχής είναι κοντά στη μονάδα με αποτέλεσμα η αποσυνοχή, που στην περίπτωση αυτή οφείλεται αποκλειστικά στις διακυμάνσεις κβαντικού κενού, είναι πολύ ασθενής.

2.  $\Lambda^{-1} \ll t \ll \tau_B$  (κλίμακα κενού):

$$\Gamma(t) \approx \Gamma_{vac}(t) \approx -\frac{1}{2}\ln(\Lambda^2 t^2) = -\ln(\Lambda t)$$

Στη χρονική κλίμακα αυτή η συνεισφορά της  $\Gamma_{th}(t)$  είναι πάλι μηδέν και συνεισφέρει μόνο η  $\Gamma_{vac}(t)$ , σε μεγαλύτερο βαθμό αυτή τη φορά.

3.  $t \gg \tau_B$  (θερμική κλίμακα):

$$\Gamma(t) \approx \Gamma_{th}(t) \approx -\frac{t}{\tau_B}$$

Στη χρονική κλίμακα αυτή συνεισφέρει κυρίως η  $\Gamma_{th}(t)$  και ο παράγοντας αποσυνοχής είναι  $r(t) = e^{-t/\tau_B}$ . Επομένως στην περίπτωση αυτή οι μη-διαγώνιοι όροι της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος  $\mathcal{S}$  σβήνουν εκθετικά με ρυθμό των θερμικών διακυμάνσεων του περιβάλλοντος  $\tau_B^{-1}$ .

#### 4.2.2 Εξίσωση master Born-Markov για το μοντέλο σπιν-μποζόνιο

Στην προηγούμενη ενότητα είδαμε ένα απλοποιημένο μοντέλο σπιν-μποζόνιο, στο οποίο αγνοήσαμε την εσωτερική δυναμική του συστήματος  $\mathcal{S}$  (τον όρο tunneling  $\hat{H}_S^{tunnel}$ ), και για να προσδιορίσουμε τον παράγοντα αποσυνοχής δεν χρειάστηκε να λύσουμε εξίσωση

master. Τώρα θα γενικεύσουμε το μοντέλο αυτό λαμβάνοντας υπόψιν την εσωτερική δυναμική του συστήματος. Η πλήρης Χαμιλτονιανή του μοντέλου σπιν-μποζόνιο είναι:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \omega_0 \hat{\sigma}_z - \frac{1}{2} \Delta_0 \hat{\sigma}_x + \sum_i \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \hat{q}_i^2 \right) + \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i c_i \hat{q}_i$$

Για την εξαγωγή της εξίσωσης master θα χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση Born-Markov, σύμφωνα με την οποία το κεντρικό σύστημα είναι ασθενώς συζευγμένο με ένα μεγάλο περιβάλλον. Θα κάνουμε μια επιπλέον υπόθεση ότι η ενεργειακή διαφορά  $\omega_0$  είναι μηδέν, που αντιστοιχεί σε ένα κεντρικό σύστημα κινούμενο σε ένα συμμετρικό διπλό πηγάδι δυναμικού. Οπότε η Χαμιλτονιανή του μοντέλου μας απλοποιείται σε:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \Delta_0 \hat{\sigma}_x + \sum_i \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \hat{q}_i^2 \right) + \hat{\sigma}_z \otimes \sum_i c_i \hat{q}_i$$

Το μοντέλο αυτό παρουσιάζει μεγάλη ομοιότητα με το μοντέλο της κβαντικής κίνησης Brown. Μάλιστα, επειδή το περιβάλλον και η μορφή της Χαμιλτονιανής αλληλεπίδρασης του με το κεντρικό σύστημα είναι ακριβώς ίδια, μπορούμε κατευθείαν να πάρουμε έτοιμη την εξίσωση master (4.6) που εξάγαμε για το μοντέλο της κβαντικής κίνησης Brown για ένα αυθαίρετο κεντρικό σύστημα. Απλώς χρειάζεται να αντικαταστήσουμε τον τελεστή  $\hat{X}$  με τον  $\hat{\sigma}_z$ :

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = -i \left[ \hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t) \right] - \int_0^\infty d\tau \left\{ \nu(\tau) [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_z(-\tau), \hat{\rho}_S(t)]] \right. \\ \left. - i\eta(\tau) [\hat{\sigma}_z, \{\hat{\sigma}_z(-\tau), \hat{\rho}_S(t)\}] \right\} \end{aligned} \quad (4.31)$$

όπου τα *noise* και *dissipation kernels* είναι ακριβώς ίδια όπως στον μοντέλο της κβαντικής κίνησης Brown:

$$\begin{aligned} \nu(\tau) &= \frac{1}{2} \sum_i c_i^2 \langle \{\hat{q}_i(\tau), \hat{q}_i\} \rangle_{\hat{\rho}_E} \equiv \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\omega}{2k_B T}\right) \cos(\omega\tau) \\ \eta(\tau) &= \frac{i}{2} \sum_i c_i^2 \langle [\hat{q}_i(\tau), \hat{q}_i] \rangle_{\hat{\rho}_E} \equiv \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin(\omega\tau) \end{aligned}$$

Ο τελεστής  $\hat{\sigma}_z$  στην εικόνα αλληλεπίδρασης προκύπτει υπολογίζοντας την εξίσωση κίνησης Heisenberg για τον τελεστή  $\hat{\sigma}_+ \equiv \hat{\sigma}_z + i\hat{\sigma}_y$ :

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\hat{\sigma}_+(\tau)}{d\tau} &= i e^{i\hat{H}_S \tau} \left[ \hat{H}_S, \hat{\sigma}_+ \right] e^{-i\hat{H}_S \tau} \\ \left[ \hat{H}_S, \hat{\sigma}_+ \right] &= -\frac{\Delta_0}{2} [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z + i\hat{\sigma}_y] = \Delta_0 \hat{\sigma}_+ \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{d\hat{\sigma}_+(\tau)}{d\tau} = i\Delta_0 \hat{\sigma}_+(\tau)$$

Επομένως

$$\hat{\sigma}_+(\tau) = e^{i\Delta_0 \tau} \hat{\sigma}_+ \Rightarrow \hat{\sigma}_z(\tau) + i\hat{\sigma}_y(\tau) = [\cos(\Delta_0 \tau) + i \sin(\Delta_0 \tau)] (\hat{\sigma}_z + i\hat{\sigma}_y)$$

Εξισώνοντας τα πραγματικά και φανταστικά μέρη, παίρνουμε:

$$\hat{\sigma}_z(\tau) = \hat{\sigma}_z \cos(\Delta_0 \tau) - \hat{\sigma}_y \sin(\Delta_0 \tau)$$



$$\hat{\sigma}_y(\tau) = \hat{\sigma}_z \sin(\Delta_0 \tau) + \hat{\sigma}_y \cos(\Delta_0 \tau)$$

Με την έκφραση αυτή για τον τελεστή  $\hat{\sigma}_z(\tau)$ , η ολοκληρωτέα ποσότητα στο δεξί μέλος της εξίσωσης master (4.31) γίνεται:

$$\begin{aligned} \nu(\tau) [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_z(-\tau), \hat{\rho}_S(t)]] - i\eta(\tau) [\hat{\sigma}_z, \{\hat{\sigma}_z(-\tau), \hat{\rho}_S(t)\}] &= \nu(\tau) \cos(\Delta_0 t) [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_S(t)]] \\ + \nu(\tau) \sin(\Delta_0 t) [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_y, \hat{\rho}_S(t)]] - i\eta(\tau) \sin(\Delta_0 t) [\hat{\sigma}_z, \{\hat{\sigma}_y, \hat{\rho}_S(t)\}] &\quad (4.32) \end{aligned}$$

όπου ο όρος  $[\hat{\sigma}_z, \{\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_S(t)\}] = 0$  παραλήφθηκε. Θέτοντας:

$$\begin{aligned} \tilde{D} &= \int_0^\infty d\tau \nu(\tau) \cos(\Delta_0 t) \\ \zeta &= \int_0^\infty d\tau [\nu(\tau) - i\eta(\tau)] \sin(\Delta_0 t) = \tilde{f} - i\tilde{\gamma} \\ \tilde{f} &= \int_0^\infty d\tau \nu(\tau) \sin(\Delta_0 t) \\ \tilde{\gamma} &= \int_0^\infty d\tau \eta(\tau) \sin(\Delta_0 t) \end{aligned}$$

το ολοκλήρωμα του πρώτου όρου του δεξιού μέλους της (4.32) γίνεται:

$$\tilde{D} [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_S(t)]]$$

ενώ το ολοκλήρωμα του αθροίσματος των δύο τελευταίων όρων του δεξιού μέλους της (4.32) γίνεται:

$$\begin{aligned} \zeta [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t)] - \zeta^* [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y] &= \zeta [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_y] \hat{\rho}_S(t) - \zeta^* \hat{\rho}_S(t) [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_y] \\ + \zeta \hat{\sigma}_y [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_S(t)] - \zeta^* [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_S(t)] \hat{\sigma}_y &= \zeta \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) + \zeta^* \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z \\ - \zeta \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z - \zeta^* \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y &= -i\zeta \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_S(t) + i\zeta^* \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_x \\ - \zeta \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z - \zeta^* \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y &= -i\zeta^* [\hat{\sigma}_x, \hat{\rho}_S(t)] - 2\tilde{\gamma} \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_S(t) \\ - \left( \zeta \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z + \zeta^* \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y \right) &\quad \end{aligned}$$

όπου στην τελευταία ισότητα χρησιμοποιήσαμε τη σχέση  $i\zeta = i\zeta^* + 2\tilde{\gamma}$ . Συνεχίζουμε τον υπολογισμό του τελευταίου όρου:

$$\begin{aligned} \zeta \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z + \zeta^* \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y &= \tilde{f} \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z - i\tilde{\gamma} \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z \\ + \tilde{f} \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y + i\tilde{\gamma} \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y &= \tilde{f} \left( \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y \right) \\ + i\tilde{\gamma} \left( \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z \right) &\quad \end{aligned}$$

Τελικά ο δεύτερος όρος του δεξιού μέλους της εξίσωσης master (4.31) γίνεται:

$$\begin{aligned} - \int_0^\infty d\tau \left\{ \nu(\tau) [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_z(-\tau), \hat{\rho}_S(t)]] - i\eta(\tau) [\hat{\sigma}_z, \{\hat{\sigma}_z(-\tau), \hat{\rho}_S(t)\}] \right\} \\ = -\tilde{D} [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_S(t)]] + i\zeta^* [\hat{\sigma}_x, \hat{\rho}_S(t)] + 2\tilde{\gamma} \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_S(t) \\ + \tilde{f} \left( \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y \right) + i\tilde{\gamma} \left( \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z \right) \end{aligned}$$

Επομένως η τελική έκφραση για την εξίσωση master Born-Markov του μοντέλου σπιν-μποζόνιο είναι:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = & -i \left[ \hat{H}'_S, \hat{\rho}_S(t) \right] + 2\tilde{\gamma} \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_S(t) - \tilde{D} [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_S(t)]] \\ & + \underbrace{\tilde{f} \left( \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y \right)}_{\zeta \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z + \zeta^* \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y} + i\tilde{\gamma} \left( \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z \right) \end{aligned} \quad (4.33)$$

όπου

$$\hat{H}'_S = \hat{H}_S - \zeta^* \hat{\sigma}_x = \left( -\frac{\Delta_0}{2} - \zeta^* \right) \hat{\sigma}_x$$

είναι η επανακανονικοποιημένη Χαμιλτονιανή του συστήματος.

Η ερμηνεία των διαφόρων όρων της εξίσωσης αυτής είναι παρόμοια με την περίπτωση της κβαντικής κίνησης Brown (4.9). Οι δύο τελευταίοι όροι περιγράφουν κυρίως το dissipation. Όμως ο όρος με το περισσότερο ενδιαφέρον για μας είναι ο όρος που δίνει την αποσυνοχή (χωρίς dissipation):

$$\tilde{D} [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_S(t)]] = 2\tilde{D} [\hat{\rho}_S(t) - \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z] \quad (4.34)$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις:

$$\langle i | [\hat{\rho}_S(t) - \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z] | j \rangle = \hat{\rho}_S^{(i,j)}(t) - \langle i | \hat{\sigma}_z \hat{\rho}_S(t) \hat{\sigma}_z | j \rangle = \hat{\rho}_S^{(i,j)}(t) \pm \hat{\rho}_S^{(i,j)}(t)$$

όπου έχουμε + για  $i \neq j$  και - για  $i = j$ ,  $i, j = 0, 1$ , μπορούμε να εκφράσουμε την παραπάνω σχέση σε μορφή πίνακα στη βάση  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  των ιδιοκαταστάσεων του τελεστή  $\hat{\sigma}_z$ :

$$\tilde{D} [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_S(t)]] = 4\tilde{D} \begin{bmatrix} 0 & \hat{\rho}_S^{(0,1)}(t) \\ \hat{\rho}_S^{(1,0)}(t) & 0 \end{bmatrix}$$

Αγνοώντας τους υπόλοιπους όρους της εξίσωσης master, η χρονική εξέλιξη των μη-διαγώνιων όρων της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος είναι:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_S^{(0,1)}(t)}{dt} &= -4\tilde{D} \hat{\rho}_S^{(0,1)}(t) \\ \frac{d\hat{\rho}_S^{(1,0)}(t)}{dt} &= -4\tilde{D} \hat{\rho}_S^{(1,0)}(t) \end{aligned}$$

Βλέπουμε ότι οι μη-διαγώνιοι όροι της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας του συστήματος αποσβένουν εκθετικά με ρυθμό ανάλογο του  $\tilde{D}$ , ενώ οι διαγώνιοι όροι δεν επηρεάζονται από τον όρο (4.34) της εξίσωσης master (που σημαίνει ότι ο όρος αυτός, πράγματι, δημιουργεί μόνο απόσβεση χωρίς dissipation).

Σημειώνουμε ότι στην περίπτωση που ο όρος tunneling  $\Delta_0$  είναι μηδέν, θα είναι μηδέν και το  $\zeta$ , και επομένως η εξίσωση master (4.33) γίνεται:

$$\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = -i \left[ \hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t) \right] - \tilde{D} [\hat{\sigma}_z, [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_S(t)]]$$

η οποία είναι εξίσωση master σε μορφή Lindblad με  $\hat{L} = \hat{\sigma}_z$ , που περιγράφει την "πα-ρακολούθηση" από το περιβάλλον της τιμής του  $z$ -σπιν του συστήματος.

### 4.3 Μοντέλα με σπιν-περιβάλλοντα

Στην προηγούμενη ενότητα το περιβάλλον του μοντέλου αποτελούνταν από ασύζευκτους αρμονικούς ταλαντωτές. Τώρα θα μελετήσουμε μοντέλα στα οποία το περιβάλλον αποτελείται από  $N$  σωματίδια με σπιν-1/2 (δηλαδή συστήματα δυο επιπέδων). Ως κεντρικό σύστημα επιλέγουμε και πάλι ένα σωματίδιο με σπιν-1/2. Υπάρχουν δύο τέτοια ακριβώς επιλύσιμα μοντέλα: στο πρώτο η εσωτερική δυναμική του κεντρικού συστήματος δεν λαμβάνεται υπόψη (ο όρος tunneling είναι μηδέν,  $\Delta_0 = 0$ ), ενώ στο δεύτερο λαμβάνεται. Οι δύο περιπτώσεις αυτές διαφέρουν ριζικά ως προς τα αποτελέσματα τους.

#### 4.3.1 Στατικό μοντέλο σπιν-σπιν

Στο απλοποιημένο μοντέλο αυτό θεωρούμε ότι η εξέλιξη του συνολικού συστήματος  $\mathcal{SE}$  δίνεται από τη Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης του κεντρικού συστήματος σπιν-1/2 με περιβάλλον αποτελούμενο από  $N$  ανεξάρτητα σπιν-1/2, δηλαδή αγνοούμε την εσωτερική δυναμική του κεντρικού συστήματος και του περιβάλλοντος. Επομένως η Χαμιλτονιανή του συνολικού συστήματος είναι:

$$\hat{H} = \hat{H}_{int} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \otimes \sum_{k=1}^N g_k \hat{\sigma}_z^{(k)} \equiv \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \otimes \hat{E} \quad (4.35)$$

Η Χαμιλτονιανή αυτή είναι σε διαγώνια μορφή στη βάση  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  των ιδιοκαταστάσεων του τελεστή  $\hat{\sigma}_z$  του κεντρικού συστήματος  $\mathcal{S}$ , επομένως μπορούμε αμέσως να συμπεράνουμε ότι οι καταστάσεις pointer θα είναι οι ιδιοτιμές αυτές – οι καταστάσεις αυτές δεν διαταράσσονται από την αλληλεπίδραση με το περιβάλλον, ενώ οι υπερθέσεις τους,  $a|0\rangle + b|1\rangle$ , θα μετατρέπονται σε στατιστικά μίγματα των  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$  (λόγω της αποσυνοχής). Σημειώνουμε επίσης ότι επειδή η Χαμιλτονιανή του συνολικού συστήματος μετατίθεται με τον τελεστή  $\hat{\sigma}_z$  του κεντρικού συστήματος, δεν υπάρχει ανταλλαγή ενέργειας ανάμεσα στο κεντρικό σύστημα και το περιβάλλον (no dissipation).

Επιπλέον, η Χαμιλτονιανή (4.35) είναι διαγώνια στη βάση  $\{|\uparrow\rangle_k, |\downarrow\rangle_k\}$  των περιβαλλοντικών σπιν. Επομένως οι ενεργειακές ιδιοκαταστάσεις  $|n\rangle$  του περιβαλλοντικού τελεστή  $\hat{E}$  θα δίνονται από γινόμενα της μορφής:

$$|n\rangle = |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 \cdots |\uparrow\rangle_N, \text{ κτλ.}$$

όπου  $0 \leq n \leq 2^N - 1$  και οι ενέργειες  $\epsilon_n$  που αντιστοιχούν σε κάθε τέτοια κατάσταση  $|n\rangle$  είναι:

$$\epsilon_n = \sum_{k=1}^N (-1)^{n_k} g_k$$

όπου  $n_k = 0$  αν το  $k$ -οστό περιβαλλοντικό σπιν είναι  $|\uparrow\rangle_k$ , και  $n_k = 1$  όταν είναι  $|\downarrow\rangle_k$ .

Οι ιδιοκαταστάσεις της συνολικής Χαμιλτονιανής (4.35) είναι της μορφής  $|0\rangle |n\rangle$  και  $|1\rangle |n\rangle$  και αποτελούν μια βάση του συνολικού συστήματος  $\mathcal{SE}$ . Οπότε οποιαδήποτε κατάσταση του  $\mathcal{SE}$  μπορεί να γραφτεί ως γραμμικός συνδυασμός:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{2^N-1} (c_n |0\rangle |n\rangle + d_n |1\rangle |n\rangle)$$

Υποθέτουμε ότι αρχικά ( $t = 0$ ), πριν το σύστημα αρχίσει να αλληλεπιδρά με το περιβάλλον, το  $\mathcal{S}$  και το  $\mathcal{E}$  είναι ασυσχέτιστα, δηλαδή η αρχική κατάσταση  $|\Psi(0)\rangle$  μπορεί να γραφτεί ως τανυστικό γινόμενο της μορφής:

$$|\Psi(0)\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle) \sum_{n=0}^{2^N-1} c_n |n\rangle$$

Η χρονική εξέλιξη της κατάστασης αυτής δίνεται από τη δράση του τελεστή  $e^{-i\hat{H}t}$  πάνω στην  $|\Psi(0)\rangle$ :

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Psi(0)\rangle = a|0\rangle |\mathcal{E}_0(t)\rangle + b|1\rangle |\mathcal{E}_1(t)\rangle$$

όπου

$$|\mathcal{E}_0(t)\rangle = |\mathcal{E}_1(-t)\rangle = \sum_{n=0}^{2^N-1} c_n e^{-i\epsilon_n t/2} |n\rangle$$

Η ανηγμένη μήτρα πυκνότητας του  $\mathcal{S}$  είναι:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{\mathcal{S}}(t) &= \text{Tr}_{\mathcal{E}} |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| = |a|^2 |0\rangle \langle 0| + |b|^2 |1\rangle \langle 1| \\ &+ ab^* r(t) |0\rangle \langle 1| + a^* b r^*(t) |1\rangle \langle 0| \end{aligned}$$

όπου  $r(t)$  είναι ο παράγοντας αποσυνοχής:

$$r(t) = \langle \mathcal{E}_1(t) | \mathcal{E}_0(t) \rangle = \sum_{n=0}^{2^N-1} |c_n|^2 e^{-i\epsilon_n t} \quad (4.36)$$

με  $|c_n|^2 \leq 1$  και  $\sum_{n=0}^{2^N-1} |c_n|^2 = 1$ .

Αποδεικνύεται στο [7] ότι για αρκετά μεγάλο  $N$  και μεγάλη κατηγορία κατανομών των σταθερών σύζευξης  $g_k$ , ο παράγοντας αποσυνοχής  $r(t)$  είναι προσεγγιστικά Γκαουσιανός στον χρόνο:

$$r(t) \approx e^{-\Gamma^2 t^2}$$

που η ακριβής τιμή της σταθεράς  $\Gamma$  προσδιορίζεται από την αρχική κατάσταση του περιβάλλοντος και από την κατανομή των σταθερών σύζευξης  $g_i$ . Για να το δείξουμε αυτό, θεωρούμε ότι η αρχική κατάσταση του συνολικού συστήματος είναι:

$$|\Psi(0)\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle) \prod_{k=1}^N (\alpha_k |\uparrow\rangle_k + \beta_k |\downarrow\rangle_k)$$

Η χρονική εξέλιξη της, δίνει:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{2}\hat{\sigma}_z \otimes \sum_{k=1}^N g_k \hat{\sigma}_z^{(k)} t\right) |\Psi(0)\rangle = \prod_{k=1}^N \exp\left(-\frac{i}{2}\hat{\sigma}_z \otimes g_k \hat{\sigma}_z^{(k)} t\right) |\Psi(0)\rangle \\ &= \prod_{k=1}^N \left[ a|0\rangle e^{-\frac{i}{2}g_k \hat{\sigma}_z^{(k)} t} (\alpha_k |\uparrow\rangle_k + \beta_k |\downarrow\rangle_k) + b|1\rangle e^{\frac{i}{2}g_k \hat{\sigma}_z^{(k)} t} (\alpha_k |\uparrow\rangle_k + \beta_k |\downarrow\rangle_k) \right] \\ &= \prod_{k=1}^N \left[ a|0\rangle (\alpha_k e^{-ig_k t/2} |\uparrow\rangle_k + \beta_k e^{ig_k t/2} |\downarrow\rangle_k) + b|1\rangle (\alpha_k e^{ig_k t/2} |\uparrow\rangle_k + \beta_k e^{-ig_k t/2} |\downarrow\rangle_k) \right] \\ &= a|0\rangle |\mathcal{E}_0(t)\rangle + b|1\rangle |\mathcal{E}_1(t)\rangle \end{aligned}$$

όπου

$$|\mathcal{E}_0(t)\rangle = |\mathcal{E}_1(-t)\rangle = \prod_{k=1}^N (\alpha_k e^{-ig_k t/2} |\uparrow\rangle_k + \beta_k e^{ig_k t/2} |\downarrow\rangle_k)$$

Επομένως ο παράγοντας αποσυνοχής είναι:

$$\begin{aligned} r(t) &= \langle \mathcal{E}_1(t) | \mathcal{E}_0(t) \rangle = \prod_{k=1}^N (\alpha_k^* e^{-ig_k t/2} \langle \uparrow |_k + \beta_k^* e^{ig_k t/2} \langle \downarrow |_k) (\alpha_k e^{-ig_k t/2} |\uparrow\rangle_k + \beta_k e^{ig_k t/2} |\downarrow\rangle_k) \\ &= \prod_{k=1}^N (|\alpha_k|^2 e^{-ig_k t} + |\beta_k|^2 e^{ig_k t}) \end{aligned}$$

Βλέπουμε ότι  $r(0) = 1$ , ενώ για  $t > 0$  και μεγάλο  $N$  ο παράγοντας αποσυνοχής φθίνει στο μηδέν, καθώς:

$$\langle |r(t)|^2 \rangle = 2^{-N} \prod_{k=1}^N [1 + (|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2)^2]$$

όπου  $\langle \dots \rangle$  συμβολίζει το long time average [26]. Είναι ξεκάθαρο ότι στο όριο  $N \rightarrow \infty$ , το  $\langle |r(t)|^2 \rangle$  τείνει στο μηδέν.

Για να δούμε ένα παράδειγμα στο οποίο ο παράγοντας αποσυνοχής είναι προσεγγιστικά Γκαουσιανός υπό ορισμένες συνθήκες, απλοποιήσουμε λίγο τα πράγματα θεωρώντας ότι  $\alpha_k = \alpha$  και  $\beta_k = \beta \forall k$  (που σημαίνει ότι όλα τα σπιν του περιβάλλοντος αρχικά βρίσκονται στην ίδια κατάσταση  $\alpha |\uparrow\rangle_k + \beta |\downarrow\rangle_k$ ), και επιπλέον ότι  $g_k = g \forall k$ . Τότε, ο παράγοντας αποσυνοχής θα είναι:

$$r(t) = (|\alpha|^2 e^{-igt} + |\beta|^2 e^{igt})^N \quad (4.37)$$

Αναπτύσσοντας σε διωνυμική σειρά παίρνουμε:

$$r(t) = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} |\alpha|^{2(N-k)} |\beta|^{2k} \exp[-ig(2k - N)t] \quad (4.38)$$

Για μεγάλα  $N$ , σύμφωνα με το θεώρημα Laplace-de Moivre, οι συντελεστές του διωνυμικού αναπτύγματος μπορούν να προσεγγιστούν από μια Γκαουσιανή:

$$\binom{N}{k} |\alpha|^{2(N-k)} |\beta|^{2k} \approx \frac{\exp\left[-\frac{(k-N|\beta|^2)^2}{2N|\alpha\beta|^2}\right]}{\sqrt{2\pi N|\alpha\beta|^2}} = \frac{\exp\left\{-\frac{[\epsilon_k/g - N(|\alpha|^2 - |\beta|^2)]^2}{8N|\alpha\beta|^2}\right\}}{\sqrt{2\pi N|\alpha\beta|^2}}$$

όπου  $\epsilon_k = g(2k - N)$ .

Ο παράγοντας αποσυνοχής μπορεί να γραφτεί ως:

$$r(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon J(\epsilon) e^{-i\epsilon t} \quad (4.39)$$

δηλαδή ως μετασχηματισμός Fourier της χαρακτηριστικής συνάρτησης  $J(\epsilon)$ :

$$J(\epsilon) = \sum_{\lambda=0} |\langle \phi_\lambda | \Psi \rangle|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_\lambda)$$

όπου  $|\phi_\lambda\rangle$  είναι οι ιδιοκαταστάσεις της συνολικής Χαμιλτονιανής με ιδιοτιμές  $\epsilon_\lambda$ . Σύμφωνα με το [7], στο όριο μεγάλου  $N$ , η χαρακτηριστική συνάρτηση για την (4.38) είναι Γκαουσιανή:

$$J(\epsilon) \approx \frac{\exp\left\{-\frac{[\epsilon/g - N(|\alpha|^2 - |\beta|^2)]^2}{8N|\alpha\beta|^2}\right\}}{\sqrt{8\pi N|\alpha\beta|^2}}$$

Κάνοντας τον μετασχηματισμό Fourier (4.39) της  $J(\epsilon)$  αυτής, προκύπτει ότι ο παράγοντας αποσυνοχής είναι επίσης (προσεγγιστικά) Γκαουσιανός:

$$r(t) \propto e^{-2Ng^2|\alpha\beta|^2 t^2}$$

Παρατηρούμε ότι στο όριο μεγάλων  $Ng^2$  η αποσυνοχή θα είναι σχεδόν ακαριαία. Από την άλλη, όταν  $\alpha\beta = 0$ , το περιβάλλον δεν είναι ικανό να προκαλέσει αποσυνοχή στο σύστημα (καθώς το περιβάλλον θα βρίσκεται σε μια ιδιοκατάσταση της συνολικής Χαμιλτονιανής). Τέλος σημειώνουμε ότι υπάρχει μια αναλογία με τη θεωρία των random walks: Οι ενέργειες  $\epsilon_n$  μπορούν να θεωρηθούν ως τερματικά σημεία ενός random walk  $N$ -βημάτων. Η συνεισφορά του  $k$ -οστού σπιν του περιβάλλοντος στην τυχαία ενέργεια είναι  $+g$  ή  $-g$  με πιθανότητα  $|\alpha|^2$  ή  $|\beta|^2$  αντίστοιχα.

Ωστόσο πρέπει να θυμόμαστε ότι ο παράγοντας αποσυνοχής στη γενική του μορφή (4.36) είναι άθροισμα περιοδικών συναρτήσεων και κατά συνέπεια είναι επίσης περιοδικός στον χρόνο. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα, για πεπερασμένο αριθμό περιβαλλοντικών σπιν  $N$ , ο παράγοντας αποσυνοχής να επιστρέφει στην αρχική τιμή του  $r(0) = 1$  μετά από χρόνο  $\tau_{rec}$  που εξαρτάται από την αρχική κατάσταση του περιβάλλοντος και την κατανομή των σταθερών σύζευξης  $g_i$ . Αυτό φαίνεται ξεκάθαρα στην ειδική περίπτωση στην οποία όλα τα περιβαλλοντικά σπιν έχουν την ίδια αρχική κατάσταση με  $\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$ . Τότε θα έχουμε:

$$|\Psi(0)\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle) \prod_{k=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_k + |\downarrow\rangle_k)$$

και για  $g_k = g \forall k$  από την (4.37) παίρνουμε:

$$r(t) = \left(\frac{e^{-igt} + e^{igt}}{2}\right)^N = \cos^N(gt)$$

Αυτός ο παράγοντας αποσυνοχής είναι περιοδικός με συχνότητα  $g/2\pi$  και επομένως μόνο για χρόνους  $t < \pi/g$  η απόλυτη τιμή  $|r(t)|$  θα φθίνει και η συνοχή θα επαναφέρεται πλήρως σε χρόνους ίσους με ακέραια πολλαπλάσια του  $\tau_{rec} = \pi/g$ .

Όμως τέτοιες περιπτώσεις με αρχικές καταστάσεις υψηλής τάξης και συμμετρικές σταθερές σύζευξης δεν είναι ρεαλιστικές και συνήθως  $\tau_{rec} \propto N!$ . Όπως έχει επισημανθεί από τον Zurek [27], για μακροσκοπικά περιβάλλοντα ρεαλιστικών, αλλά πεπερασμένων, μεγεθών, ο χρόνος  $\tau_{rec}$  μπορεί να ξεπερνά ακόμα και την ηλικία του Σύμπαντος, επομένως η απώλεια συνοχής είναι πρακτικά μη αναστρέψιμη.

### 4.3.2 Δυναμικό μοντέλο σπιν-σπιν

Στην προηγούμενη υποενότητα μελετήσαμε ένα απλοποιημένο μοντέλο αποσυνοχής σπιν-σπιν, στο οποίο αγνοήσαμε την εσωτερική δυναμική του κεντρικού συστήματος και του

περιβάλλοντος. Στο μη ρεαλιστικό μοντέλο αυτό η Χαμιλτονιανή ήταν διαγώνια στην βάση των ιδιοκαταστάσεων τόσο του κεντρικού συστήματος όσο και του περιβάλλοντος. Τέτοιο μοντέλο αντιστοιχεί στο όριο που οι αλληλεπιδράσεις συστήματος-περιβάλλοντος είναι πολύ ισχυρές με αποτέλεσμα να κυριαρχούν στη δυναμική.

Τώρα θα γενικεύσουμε το παραπάνω μοντέλο λαμβάνοντας υπόψιν τη δυναμική του κεντρικού συστήματος, δηλαδή θα προσθέσουμε τον όρο tunneling  $-\frac{1}{2}\Delta_0\hat{\sigma}_x$  στην Χαμιλτονιανή (4.35):

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_{int} = -\frac{1}{2}\Delta_0\hat{\sigma}_x + \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z \otimes \sum_{k=1}^N g_k \hat{\sigma}_z^{(k)} \equiv -\frac{1}{2}\Delta_0\hat{\sigma}_x + \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z \otimes \hat{E} \quad (4.40)$$

Θα δούμε ότι, εν γένει, η προσθήκη του όρου tunneling οδηγεί σε πολύ διαφορετική δυναμική από ότι στο στατικό μοντέλο σπιν-σπιν. Όμως, παρόλο που η Χαμιλτονιανή έγινε πιο πολύπλοκη, το μοντέλο αυτό μπορεί να λυθεί ακριβώς και θα ακολουθήσουμε την προσέγγιση που υπάρχει στο [7].

Επειδή το κομμάτι της Χαμιλτονιανής (4.40) που αφορά το περιβάλλον περιέχει μόνο τους τελεστές  $\hat{\sigma}_z$ , οι ιδιοκαταστάσεις του  $\hat{E}$  θα είναι ίδιες όπως στο στατικό μοντέλο σπιν-σπιν:

$$\hat{E}|n\rangle = \epsilon_n |n\rangle, \quad 0 \leq n \leq 2^N - 1$$

$$|n\rangle = |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 \cdots |\uparrow\rangle_N, \quad \text{κτλ.}$$

$$\epsilon_n = \sum_{k=1}^N (-1)^{n_k} g_k$$

όπου  $n_k = 0$  αν το  $k$ -οστό περιβαλλοντικό σπιν είναι  $|\uparrow\rangle_k$ , και  $n_k = 1$  όταν είναι  $|\downarrow\rangle_k$ .

Θεωρούμε μια κατάσταση-γινόμενο της μορφής:

$$|\Psi_n\rangle = |\psi_S\rangle |n\rangle$$

όπου  $|\psi_S\rangle$  είναι μια αυθαίρετη κατάσταση του κεντρικού συστήματος  $\mathcal{S}$ . Η δράση της Χαμιλτονιανής (4.40) στην κατάσταση αυτή δίνει:

$$\hat{H}|\Psi_n\rangle = \left(-\frac{1}{2}\Delta_0\hat{\sigma}_x + \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z \otimes \hat{E}\right)|\psi_S\rangle |n\rangle = \left(-\frac{1}{2}\Delta_0\hat{\sigma}_x + \frac{1}{2}\epsilon_n\hat{\sigma}_z\right)|\Psi_n\rangle$$

Αυτό μας επιτρέπει για κάθε περιβαλλοντική κατάσταση  $|n\rangle$  να ορίσουμε την ενεργό Χαμιλτονιανή:

$$\hat{H}_S^{(n)} = -\frac{1}{2}\Delta_0\hat{\sigma}_x + \frac{1}{2}\epsilon_n\hat{\sigma}_z = \hat{H}_0 + \frac{1}{2}\epsilon_n\hat{\sigma}_z$$

Ο τελεστής χρονικής εξέλιξης του συστήματος  $\hat{U}_n = e^{-i\hat{H}_S^{(n)}t}$  που αντιστοιχεί στην Χαμιλτονιανή  $\hat{H}_S^{(n)}$ , στην εικόνα αλληλεπίδρασης είναι:

$$\hat{U}_n(t) = e^{i\hat{H}_0t} \hat{U}_n e^{-i\hat{H}_0t} = e^{i\hat{H}_0t} \left( e^{-i\hat{H}_0t} e^{-\frac{i}{2}\epsilon_n\hat{\sigma}_z t} \right) e^{-i\hat{H}_0t} = e^{-\frac{i}{2}(\epsilon_n\hat{\sigma}_z - \Delta_0\hat{\sigma}_x)t} = e^{ia\hat{A}}$$

όπου στην τελευταία ισότητα θέσαμε  $ia = -it$  και  $\hat{A} = \frac{1}{2}\epsilon_n\hat{\sigma}_z - \frac{1}{2}\Delta_0\hat{\sigma}_x$ . Αναπτύσσουμε το εκθετικό αυτό σε σειρά Taylor:

$$\hat{U}_n(t) = e^{ia\hat{A}} = \hat{I} + ia\hat{A} + \frac{1}{2!}(ia)^2\hat{A}^2 + \frac{1}{3!}(ia)^3\hat{A}^3 + \cdots$$

Όμως

$$\begin{aligned}\hat{A}^2 &= \frac{1}{4} (\epsilon_n^2 + \Delta_0^2) \hat{I} \equiv \Omega_n^2 \hat{I} \\ \hat{A}^3 &= \Omega_n^2 \hat{A}\end{aligned}$$

Επομένως

$$\begin{aligned}\hat{A}^{2m+1} &= \Omega_n^{2m} \hat{A}, \quad m = 0, 1, 2, \dots \\ \hat{A}^{2m} &= \Omega_n^{2m} \hat{I}, \quad m = 0, 1, 2, \dots\end{aligned}$$

και το ανάπτυγμα γίνεται:

$$\begin{aligned}\hat{U}_n(t) &= \hat{I} + \underline{ia\hat{A}} - \frac{\hat{I}}{2!} a^2 \Omega_n^2 - \underline{i \frac{1}{3!} a^3 \Omega_n^2 \hat{A}} + \frac{\hat{I}}{4!} a^4 \Omega_n^4 + \underline{i \frac{1}{5!} a^5 \Omega_n^4 \hat{A}} \dots \\ &= \hat{I} \left( 1 - \frac{1}{2!} a^2 \Omega_n^2 + \frac{1}{4!} a^4 \Omega_n^4 - \dots \right) + i \frac{\hat{A}}{\Omega_n} \left( a \Omega_n - \frac{1}{3!} a^3 \Omega_n^3 + \frac{1}{5!} a^5 \Omega_n^5 - \dots \right) \\ &= \hat{I} \cos(a \Omega_n t) + i \frac{\hat{A}}{\Omega_n} \sin(a \Omega_n t)\end{aligned}$$

Επομένως

$$\hat{U}_n(t) = \hat{I} \cos(\Omega_n t) - \frac{i}{\Omega_n} \left( \frac{1}{2} \epsilon_n \hat{\sigma}_z - \frac{1}{2} \Delta_0 \hat{\sigma}_x \right) \sin(\Omega_n t)$$

Η χρονική εξέλιξη μιας αυθαίρετης αρχικής κατάστασης-γινόμενο της μορφής:

$$|\Psi(0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle \sum_{n=0}^{2^N-1} c_n |n\rangle$$

είναι:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{2^N-1} c_n \left[ \hat{U}_n(t) |\psi_S(0)\rangle \right] |n\rangle$$

και επομένως

$$\hat{\rho}_S(t) = \text{Tr}_E |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| = \sum_{n=0}^{2^N-1} |c_n|^2 \hat{U}_n(t) \hat{\rho}_S(0) \hat{U}_n^\dagger(t)$$

Περνώντας στο συνεχές θα έχουμε:

$$\hat{\rho}_S(t) = \int d\epsilon J(\epsilon) \hat{U}_\epsilon(t) \hat{\rho}_S(0) \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) \quad (4.41)$$

όπου η φασματική πυκνότητα που περιγράφει την κατανομή των περιβαλλοντικών ενεργειών  $\epsilon$  είναι:

$$J(\epsilon) = \sum_{n=0}^{2^N-1} |c_n|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_n) \quad (4.42)$$



Μπορούμε να εκφράσουμε την ανηγμένη μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}_S(t)$  μέσω του διανύσματος πόλωσης  $\mathbf{p}(t) = (p_x(t), p_y(t), p_z(t))$  ως εξής:

$$\hat{\rho}_S(t) = \frac{1}{2} \left[ \hat{I} + \mathbf{p}(t) \cdot \hat{\sigma} \right] = \frac{1}{2} \left[ \hat{I} + p_x(t) \hat{\sigma}_x + p_y(t) \hat{\sigma}_y + p_z(t) \hat{\sigma}_z \right]$$

Η διεύθυνση του διανύσματος  $\mathbf{p}(t)$  μας λέει ποιές είναι οι ιδιοκαταστάσεις της ανηγμένης μήτρας πυκνότητας  $\hat{\rho}_S(t)$ . Για παράδειγμα, αν  $p_x = p_y = 0$ , τότε  $\hat{\rho}_S = \frac{1}{2}(\hat{I} + p_z \hat{\sigma}_z)$  και επομένως οι ιδιοκαταστάσεις της  $\hat{\rho}_S$  είναι οι ιδιοκαταστάσεις του τελεστή  $\hat{\sigma}_z$ . Στο όριο  $t \rightarrow \infty$  η επικρατέστερη συνιστώσα του  $\mathbf{p}(t)$  μας λέει σε ποια βάση η διαδικασία της αποσυνοχής είναι περισσότερο αποτελεσματική, δηλαδή ποιές είναι οι pointer καταστάσεις.

Σε πλήρη αναλογία με την (4.41), το διάνυσμα πόλωσης  $\mathbf{p}(t)$  γράφεται ως:

$$\mathbf{p}(t) = \int d\epsilon J(\epsilon) \mathbf{p}(t, \epsilon) \quad (4.43)$$

όπου

$$\mathbf{p}(t, \epsilon) \cdot \hat{\sigma} = \hat{U}_\epsilon(t) (\mathbf{p}(0) \cdot \hat{\sigma}) \hat{U}_\epsilon^\dagger(t)$$

$$\begin{aligned} p_x(t, \epsilon) \hat{\sigma}_x + p_y(t, \epsilon) \hat{\sigma}_y + p_z(t, \epsilon) \hat{\sigma}_z &= p_x(0) \hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_x \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) + p_y(0) \hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_y \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) \\ &\quad + p_z(0) \hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_z \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) \end{aligned} \quad (4.44)$$

Υπολογισμός του  $\mathbf{p}(t, \epsilon)$ :

$$\begin{aligned} \hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_x \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) &= \left[ \hat{\sigma}_x \cos(\Omega_\epsilon t) + \frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_y \sin(\Omega_\epsilon t) + \frac{i\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{I} \sin(\Omega_\epsilon t) \right] \\ &\quad \times \left[ \hat{I} \cos(\Omega_\epsilon t) + \frac{i\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_z \sin(\Omega_\epsilon t) - \frac{i\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_x \sin(\Omega_\epsilon t) \right] \\ &= \hat{\sigma}_x \cos^2(\Omega_\epsilon t) + \frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_y \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) - \frac{i\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{I} \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) \\ &\quad + \frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_y \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) - \frac{\epsilon^2}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{\sigma}_x \sin^2(\Omega_\epsilon t) - \frac{\epsilon\Delta_0}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{\sigma}_z \sin^2(\Omega_\epsilon t) \\ &\quad + \frac{i\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{I} \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) - \frac{\epsilon\Delta_0}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{\sigma}_z \sin^2(\Omega_\epsilon t) + \frac{\Delta_0^2}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{\sigma}_x \sin^2(\Omega_\epsilon t) \\ &= \hat{\sigma}_x \left[ \cos^2(\Omega_\epsilon t) + \frac{\Delta_0^2 - \epsilon^2}{4\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) \right] + \hat{\sigma}_y \left[ \frac{\epsilon}{\Omega_\epsilon} \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) \right] \\ &\quad + \hat{\sigma}_z \left[ -\frac{\epsilon\Delta_0}{2\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) \right] \end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις  $4\Omega_\epsilon^2 = \Delta_0^2 + \epsilon^2$ ,  $\cos^2(\Omega_\epsilon t) = 1 - \sin^2(\Omega_\epsilon t)$  και  $\cos(2\Omega_\epsilon t) = 1 - 2\sin^2(\Omega_\epsilon t)$  που δίνουν:

$$\cos^2(\Omega_\epsilon t) + \frac{\Delta_0^2 - \epsilon^2}{4\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) = \frac{\Delta_0^2 + \epsilon^2 - 2\epsilon^2 \sin^2(\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2} = \frac{\Delta_0^2 + \epsilon^2 \cos(2\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2}$$

και  $\sin(2\Omega_\epsilon t) = 2 \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t)$ , προκύπτει ότι:

$$\hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_x \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) = \hat{\sigma}_x \left[ \frac{\Delta_0^2 + \epsilon^2 \cos(2\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2} \right] + \hat{\sigma}_y \left[ \frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] + \hat{\sigma}_z \left[ -\frac{\epsilon \Delta_0}{2\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) \right] \quad (4.45)$$

Ομοίως υπολογίζουμε και τους άλλους δύο όρους:

$$\begin{aligned} \hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_y \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) &= \left[ \hat{\sigma}_y \cos(\Omega_\epsilon t) - \frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_x \sin(\Omega_\epsilon t) - \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_z \sin(\Omega_\epsilon t) \right] \\ &\times \left[ \hat{I} \cos(\Omega_\epsilon t) + \frac{i\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_z \sin(\Omega_\epsilon t) - \frac{i\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_x \sin(\Omega_\epsilon t) \right] \\ &= \hat{\sigma}_y \cos^2(\Omega_\epsilon t) - \frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_x \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) - \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_z \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) \\ &\quad - \frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_x \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) - \frac{\epsilon^2}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{\sigma}_y \sin^2(\Omega_\epsilon t) + \frac{i\epsilon \Delta_0}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{I} \sin^2(\Omega_\epsilon t) \\ &\quad - \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_z \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) - \frac{i\epsilon \Delta_0}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{I} \sin^2(\Omega_\epsilon t) - \frac{\Delta_0^2}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{\sigma}_y \sin^2(\Omega_\epsilon t) \\ &= \hat{\sigma}_x \left[ -\frac{\epsilon}{\Omega_\epsilon} \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) \right] + \hat{\sigma}_y \left[ \cos^2(\Omega_\epsilon t) - \frac{\Delta_0^2 + \epsilon^2}{4\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) \right] \\ &\quad + \hat{\sigma}_z \left[ -\frac{\Delta_0}{\Omega_\epsilon} \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) \right] \end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση:

$$\cos^2(\Omega_\epsilon t) - \frac{\Delta_0^2 + \epsilon^2}{4\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) = \cos^2(\Omega_\epsilon t) - \sin^2(\Omega_\epsilon t) = \cos(2\Omega_\epsilon t)$$

προκύπτει:

$$\hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_y \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) = \hat{\sigma}_x \left[ -\frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] + \hat{\sigma}_y \cos(2\Omega_\epsilon t) + \hat{\sigma}_z \left[ -\frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] \quad (4.46)$$

Και τέλος,

$$\begin{aligned} \hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_z \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) &= \left[ \hat{\sigma}_z \cos(\Omega_\epsilon t) - \frac{i\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{I} \sin(\Omega_\epsilon t) + \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_y \sin(\Omega_\epsilon t) \right] \\ &\times \left[ \hat{I} \cos(\Omega_\epsilon t) + \frac{i\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_z \sin(\Omega_\epsilon t) - \frac{i\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_x \sin(\Omega_\epsilon t) \right] \\ &= \hat{\sigma}_z \cos^2(\Omega_\epsilon t) + \frac{i\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{I} \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) + \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_y \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) \\ &\quad - \frac{i\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \hat{I} \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) + \frac{\epsilon^2}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{\sigma}_z \sin^2(\Omega_\epsilon t) - \frac{\epsilon \Delta_0}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{\sigma}_x \sin^2(\Omega_\epsilon t) \\ &\quad + \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \hat{\sigma}_y \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) - \frac{\epsilon \Delta_0}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{\sigma}_x \sin^2(\Omega_\epsilon t) - \frac{\Delta_0^2}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{\sigma}_z \sin^2(\Omega_\epsilon t) \\ &= \hat{\sigma}_x \left[ -\frac{\epsilon \Delta_0}{2\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) \right] + \hat{\sigma}_y \left[ \frac{\Delta_0}{\Omega_\epsilon} \cos(\Omega_\epsilon t) \sin(\Omega_\epsilon t) \right] \\ &\quad + \hat{\sigma}_z \left[ \cos^2(\Omega_\epsilon t) - \frac{\Delta_0^2 - \epsilon^2}{4\Omega_\epsilon^2} \hat{\sigma}_z \sin^2(\Omega_\epsilon t) \right] \end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση:

$$\cos^2(\Omega_\epsilon t) - \frac{\Delta_0^2 - \epsilon^2}{4\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) = \frac{\epsilon^2 + \Delta_0^2 - 2\Delta_0^2 \sin^2(\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2} = \frac{\epsilon^2 + \Delta_0^2 \cos(2\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2}$$

προκύπτει:

$$\hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_z \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) = \hat{\sigma}_x \left[ -\frac{\epsilon \Delta_0}{2\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) \right] + \hat{\sigma}_y \left[ \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] + \hat{\sigma}_z \left[ \frac{\epsilon^2 + \Delta_0^2 \cos(2\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2} \right] \quad (4.47)$$

Από τις σχέσεις (4.45), (4.46) και (4.47) προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} & p_x(0) \hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_x \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) + p_y(0) \hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_y \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) + p_z(0) \hat{U}_\epsilon(t) \hat{\sigma}_z \hat{U}_\epsilon^\dagger(t) \\ &= \hat{\sigma}_x \left\{ p_x(0) \left[ \frac{\Delta_0^2 + \epsilon^2 \cos(2\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2} \right] - p_y(0) \left[ \frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] - p_z(0) \left[ \frac{\epsilon \Delta_0}{2\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) \right] \right\} \\ &+ \hat{\sigma}_y \left\{ p_x(0) \left[ \frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] + p_y(0) \cos(2\Omega_\epsilon t) + p_z(0) \left[ \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] \right\} \\ &+ \hat{\sigma}_z \left\{ -p_x(0) \left[ \frac{\epsilon \Delta_0}{2\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) \right] - p_y(0) \left[ \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] + p_z(0) \left[ \frac{\epsilon^2 + \Delta_0^2 \cos(2\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2} \right] \right\} \\ &= p_x(t, \epsilon) \hat{\sigma}_x + p_y(t, \epsilon) \hat{\sigma}_y + p_z(t, \epsilon) \hat{\sigma}_z \end{aligned}$$

Εξισώνοντας τους συντελεστές των τελεστών Pauli και στα δύο μέλη της τελευταίας ισότητας, παίρνουμε:

$$\begin{aligned} p_x(t, \epsilon) &= p_x(0) \left[ \frac{\Delta_0^2 + \epsilon^2 \cos(2\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2} \right] - p_y(0) \left[ \frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] - p_z(0) \left[ \frac{\epsilon \Delta_0}{2\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) \right] \\ p_y(t, \epsilon) &= p_x(0) \left[ \frac{\epsilon}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] + p_y(0) \cos(2\Omega_\epsilon t) + p_z(0) \left[ \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] \\ p_z(t, \epsilon) &= -p_x(0) \left[ \frac{\epsilon \Delta_0}{2\Omega_\epsilon^2} \sin^2(\Omega_\epsilon t) \right] - p_y(0) \left[ \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] + p_z(0) \left[ \frac{\epsilon^2 + \Delta_0^2 \cos(2\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2} \right] \end{aligned}$$

Έχοντας αυτές τις σχέσεις, μπορούμε να υπολογίσουμε το διάνυσμα πόλωσης από τη σχέση (4.43) για δοσμένη φασματική πυκνότητα  $J(\epsilon)$ . Για μεγάλο αριθμό  $N$  των περιβαλλοντικών σπιν, η φασματική πυκνότητα (4.42) τείνει στη Γκαουσιανή:

$$J(\epsilon) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi s_N^2}} \exp\left(-\frac{\epsilon^2}{2s_N^2}\right) \quad (4.48)$$

όπου  $s_N$  είναι το πλάτος της Γκαουσιανής που ποσοτικοποιεί το τυπικό εύρος των ενεργειών  $\epsilon$ . Ποιο συγκεκριμένα, αν  $x_k$  είναι τυχαία μεταβλητή που παίρνει τιμές  $g_k$  ή  $-g_k$  με πιθανότητα  $|\alpha_k|^2$  ή  $|\beta_k|^2$  αντίστοιχα, τότε η μέση τιμή  $a_k$  και η διακύμανση  $b_k$  είναι:

$$\begin{aligned} a_k &= (|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2) g_k \\ b_k^2 &= g_k^2 - a_k^2 = 4|\alpha_k|^2 |\beta_k|^2 g_k^2 \end{aligned}$$

και η αθροιστική διακύμανση  $s_N$  είναι:

$$s_N^2 = \sum_k b_k^2 = \sum_k 4|\alpha_k|^2 |\beta_k|^2 g_k^2$$

Επειδή η Γκαουσιανή (4.48) είναι άρτια συνάρτηση στο  $\epsilon$ , οι όροι των  $p_{x,y,z}(t, \epsilon)$  που είναι περιττοί στο  $\epsilon$  δεν συνεισφέρουν στο τελικό αποτέλεσμα (μετά από ολοκλήρωση). Επομένως

$$p_x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s_N^2}} \int d\epsilon p_x(0) \frac{\Delta_0^2 + \epsilon^2 \cos(2\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2} e^{-\epsilon^2/2s_N^2} \quad (4.49\alpha')$$

$$p_y(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s_N^2}} \int d\epsilon \left\{ p_y(0) \cos(2\Omega_\epsilon t) + p_z(0) \left[ \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] \right\} e^{-\epsilon^2/2s_N^2} \quad (4.49\beta')$$

$$p_z(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s_N^2}} \int d\epsilon \left\{ p_z(0) \left[ \frac{\epsilon^2 + \Delta_0^2 \cos(2\Omega_\epsilon t)}{4\Omega_\epsilon^2} \right] - p_y(0) \left[ \frac{\Delta_0}{2\Omega_\epsilon} \sin(2\Omega_\epsilon t) \right] \right\} e^{-\epsilon^2/2s_N^2} \quad (4.49\gamma')$$

Τα ολοκληρώματα αυτά μπορούν να υπολογιστούν για δύο σημαντικές οριακές περιπτώσεις  $s_N \gg \Delta_0$  και  $s_N \ll \Delta_0$ .

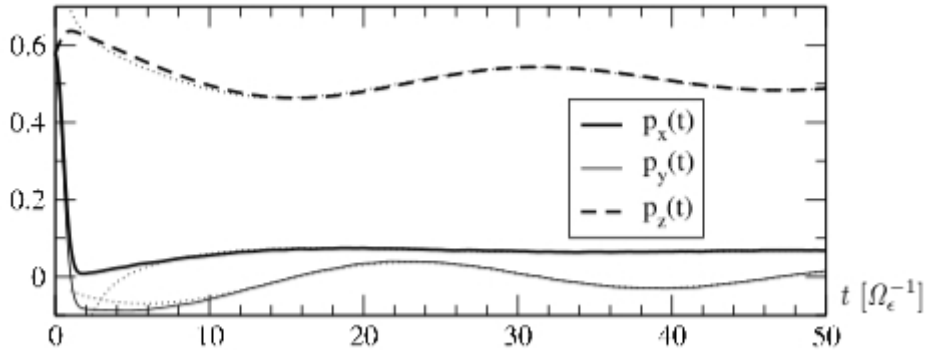
Στην πρώτη οριακή περίπτωση  $s_N \gg \Delta_0$ , η εσωτερική δυναμική του κεντρικού συστήματος είναι πολύ αργή, και περιμένουμε ότι τα αποτελέσματα που θα πάρουμε θα είναι κοντά σε αυτά του στατικού μοντέλου που μελετήσαμε στην προηγούμενη υποενότητα. Πράγματι, για μικρούς χρόνους  $t \ll \Delta_0^{-1}$ , χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor των (4.49) γύρω από το  $\Delta_0$ , βρίσκουμε [7]:

$$p_x(t) = p_x(0) e^{-2t^2 s_N^2}$$

$$p_y(t) = p_y(0) e^{-2t^2 s_N^2} + p_z(0) \frac{\Delta_0}{2s_N} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \text{Erf}(\sqrt{2}s_N t)$$

$$p_z(t) = p_z(0) - p_y(0) \frac{\Delta_0}{2s_N} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \text{Erf}(\sqrt{2}s_N t)$$

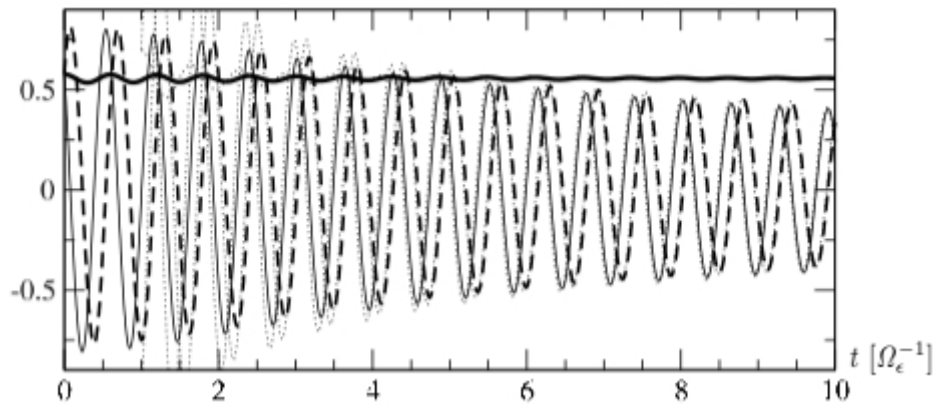
Για τον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων (4.49) για χρόνους  $t \gg \Delta_0^{-1}$ , χρησιμοποιείται η προσέγγιση σταθερής φάσης (stationary phase approximation). Τα αποτελέσματα δίνονται στο [7], οπότε εμείς εδώ παρουσιάζουμε μόνο την γραφική παράσταση των συνιστωσών του διανύσματος πόλωσης για όλους τους χρόνους (με  $\Delta_0 = 0.1s_N$ ,  $p_x(0) = p_y(0) = p_z(0) = 1/\sqrt{3}$ ):



Παρατηρούμε ότι οι συνιστώσες  $p_x(t)$  και  $p_y(t)$  φθίνουν πολύ γρήγορα, με την  $p_y(t)$  να τείνει στο μηδέν και την  $p_x(t)$  σε μια σταθερή τιμή κοντά στο μηδέν. Αντιθέτως, η συνιστώσα  $p_z(t)$  δεν φθίνει σχεδόν καθόλου και ουσιαστικά παραμένει στην αρχική της τιμή. Επομένως οι επιλεγμένες από το περιβάλλον pointer καταστάσεις είναι

(προσεγγιστικά) οι ιδιοκαταστάσεις του  $\hat{\sigma}_z$ , οι οποίες είναι ελάχιστα διαταραγμένες από την αλληλεπίδραση με το περιβάλλον. Το αποτέλεσμα αυτό είναι αναμενόμενο καθώς η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης είναι ανάλογη του τελεστή  $\hat{\sigma}_z$ .

Στη δεύτερη οριακή περίπτωση  $s_N \ll \Delta_0$ , η εσωτερική δυναμική του κεντρικού συστήματος είναι αυτή που κυριαρχεί. Τα αποτελέσματα δίνονται στο [7] και η γραφική παράσταση των συνιστωσών του διανύσματος πόλωσης για όλους τους χρόνους φαίνεται παρακάτω (με  $\Delta_0 = 5s_N$ ,  $p_x(0) = p_y(0) = p_z(0) = 1/\sqrt{3}$ ):



Παρατηρούμε ότι οι συνιστώσες  $p_y(t)$  και  $p_z(t)$  παρουσιάζουν μια φθίνουσα ταλαντωτική συμπεριφορά, ενώ η  $p_x(t)$  γρήγορα σταθεροποιείται στην τιμή κοντά στο  $1/2$ . Αυτό σημαίνει ότι οι δυναμικά επιλεγμένες από το περιβάλλον pointer καταστάσεις είναι (προσεγγιστικά) οι ιδιοκαταστάσεις του τελεστή  $\hat{\sigma}_x$ , και άρα της Χαμιλτονιανής του κεντρικού συστήματος.



# 5

## Καταπολέμηση της αποσυνοχής

Η προϋπόθεση για να δουλέψει ένας κβαντικός υπολογιστής είναι η ύπαρξη της συνοχής ανάμεσα στις καταστάσεις υπέρθεσης των qubits, τουλάχιστον για τόσο χρονικό διάστημα όσο διαρκεί ο υπολογισμός, καθώς η συνοχή αυτή είναι που επιτρέπει να γίνουν οι κβαντικοί υπολογισμοί. Επομένως η αποσυνοχή, προκαλούμενη από την αλληλεπίδραση του συστήματος με το περιβάλλον, είναι ο μεγαλύτερος εχθρός των κβαντικών υπολογιστών και ένα μεγάλο μέρος της έρευνας γίνεται για την εύρεση διάφορων τρόπων ελέγχου και ελαχιστοποίησης της.

Ένας προφανής τρόπος για να καταπολεμήσουμε την αποσυνοχή είναι να απομονώσουμε τα qubits του συστήματος (του κβαντικού υπολογιστή) από το περιβάλλον τους, ώστε να μειώσουμε τις αλληλεπιδράσεις με αυτό. Όμως παράλληλα χρειάζεται να κρατάμε το σύστημα των qubits αρκούντως ανοιχτό, ώστε να μπορούμε να χειριζόμαστε τα qubits (με τις κβαντικές πύλες) και να τα μετράμε (για εξαγωγή αποτελεσμάτων) με ελεγχόμενες αλληλεπιδράσεις με κάποια μακροσκοπική μετρητική συσκευή. Επομένως το ιδανικό είναι τα qubits να αλληλεπιδρούν ισχυρά μόνο με κάποια συγκεκριμένα τμήματα του περιβάλλοντος (κβαντικές πύλες, μετρητικές συσκευές κτ.) στα οποία έχουμε πρόσβαση, και καθόλου με το υπόλοιπο του περιβάλλοντος που δεν ελέγχουμε. Όμως ακόμα και αυτό δεν είναι αρκετό για την αποφυγή των σφαλμάτων στους κβαντικούς υπολογισμούς και για το λόγω αυτό έχουν αναπτυχθεί διάφορες μέθοδοι για τη διόρθωση τους (quantum error correction codes) ή/και για την αποφυγή τους (κωδικοποίηση στους decoherence-free υποχώρους)

### 5.1 Σύντομη εισαγωγή στην Κβαντική Πληροφορική

Προτού προχωρήσουμε στην καταπολέμηση της αποσυνοχής, παρουσιάζουμε μια σύντομη εισαγωγή στις βασικές έννοιες και ιδέες της Κβαντικής Πληροφορικής.

### 5.1.1 Στοιχειώδης μονάδα της κβαντικής πληροφορίας - qubit

Στην κβαντική θεωρία πληροφορίας, το αντίστοιχο του κλασικού bit (στοιχειώδης μονάδα πληροφορίας που μπορεί να πάρει μόνο μία τιμή, 0 ή 1) είναι το κβαντικό bit ή *qubit*, που, όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, είναι ένα οποιοδήποτε σύστημα δυο καταστάσεων:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$$

Βλέπουμε ότι, σε αντίθεση με το κλασικό bit, το qubit μπορεί να βρίσκεται στην κατάσταση υπέρθεσης των  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$ , και επειδή οι τιμές των συντελεστών  $\alpha$  και  $\beta$  μπορούν να πάρουν οποιοσδήποτε τιμές (με την προϋπόθεση ότι  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ ), υπάρχουν άπειρες τέτοιες καταστάσεις.

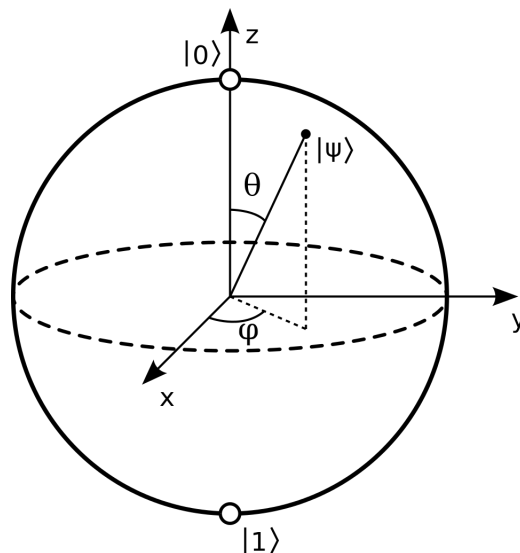
Ένα qubit μπορεί να κωδικοποιήσει δυο πραγματικούς αριθμούς, σε αντίθεση με το κλασικό bit που αναπαριστά μόνο ένα δυαδικό ψηφίο. Αυτό φαίνεται από το γεγονός ότι η κατάσταση  $|\psi\rangle$  μπορεί πάντα να γραφτεί στη μορφή:

$$|\psi\rangle = |\alpha|e^{i\phi_0} |0\rangle + |\beta|e^{i\phi_1} |1\rangle = |\alpha| |0\rangle + |\beta|e^{i\phi} |1\rangle$$

όπου  $\phi = \phi_1 - \phi_0 \in [0, 2\pi]$  είναι η σχετική φάση. Από τη συνθήκη κανονικοποίησης  $|\langle\psi|\psi\rangle|^2 = 1$  συνεπάγεται ότι:

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + \sin(\theta/2) e^{i\phi} |1\rangle$$

με  $\theta \in [0, \pi]$ . Τέτοια κατάσταση μπορεί να αναπαρασταθεί γεωμετρικά με τη σφαίρα *Block* όπως φαίνεται παρακάτω:



Βλέπουμε ότι ένα qubit πράγματι αναπαριστά δυο πραγματικούς αριθμούς, που στην αναπαράσταση αυτή δίνονται από τις γωνίες  $\theta$  και  $\phi$ .

Ένας κβαντικός υπολογιστής αποτελείται, βεβαίως, από πολλά qubits και όχι ένα. Θεωρούμε λοιπόν ένα σύστημα από  $N$  qubits. Καθώς ο χώρος Hilbert ενός qubit είναι διδιάστατος, ο χώρος Hilbert του συστήματος από  $N$  qubits,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ , θα έχει διάσταση  $2^N$ . Οι  $2^N$  αμοιβαία ορθογώνιες καταστάσεις βάσης του  $\mathcal{H}$  είναι



τανυστικά γινόμενα των καταστάσεων βάσης  $|0\rangle_i$  και  $|1\rangle_i$  του  $i$ -οστού qubit ( $1 \leq i \leq N$ ):

$$\begin{aligned} |00 \cdots 0\rangle &\equiv |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 \otimes \cdots \otimes |0\rangle_N \\ |00 \cdots 1\rangle &\equiv |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 \otimes \cdots \otimes |1\rangle_N \\ &\vdots \\ |11 \cdots 1\rangle &\equiv |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 \otimes \cdots \otimes |1\rangle_N \end{aligned} \quad (5.1)$$

Η βάση αυτή είναι γνωστή ως *υπολογιστική βάση* για το σύστημα των  $N$  qubit. Οπότε μια γενική  $N$ -qubit κατάσταση θα γράφεται στη βάση αυτή ως:

$$|\psi\rangle = \sum_{x_1, x_2, \dots, x_N} c_{x_1, x_2, \dots, x_N} |x_1, x_2, \dots, x_N\rangle \quad (5.2)$$

με  $x_i = 0$  ή  $1$  και  $\sum_{x_1, x_2, \dots, x_N} |c_{x_1, x_2, \dots, x_N}|^2 = 1$ . Η κατάσταση αυτή μπορεί επίσης να περιγραφεί από μια  $2^N \times 2^N$  μήτρα πυκνότητας, και αν τη διγωνοποιήσουμε, βλέπουμε ότι η κατάσταση αυτή μπορεί ταυτόχρονα να κωδικοποιήσει  $2^N$  ανεξάρτητους πραγματικούς αριθμούς.

### 5.1.2 Κβαντικές πύλες

Είδαμε προηγουμένως ότι η λειτουργία ενός κβαντικού υπολογιστή γίνεται με κατάλληλους χειρισμούς των qubits που συγκροτούν τη μνήμη του. Ο χειρισμός αυτός γίνεται με διάφορους μοναδιακούς μετασχηματισμούς, δηλαδή με δράση μοναδιακών τελεστών πάνω στις καταστάσεις των qubits. Τέτοιες μοναδιακές πράξεις ονομάζονται *κβαντικές πύλες*. Είναι σημαντικό να πούμε ότι για να υλοποιηθεί (έστω προσεγγιστικά) κάθε δυνατός μοναδιακός μετασχηματισμός επί του συνόλου των qubits της μνήμης του κβαντικού υπολογιστή, αρκεί μόνο ένας μικρός αριθμός κβαντικών πυλών που δρουν μόνο πάνω σε ένα qubit, σε συνδυασμό με μια μόνο κβαντική πύλη που δρα σε δυο qubits.

#### Πύλες που δρουν σε ένα qubit

Οι πύλες αυτές δρουν στον διδιάστατο χώρο Hilbert των καταστάσεων  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ , και επομένως θα αναπαρίστανται από μοναδιακούς πίνακες  $2 \times 2$ .

Οι βασικές στοιχειώδεις κβαντικές πύλες που δρουν σε ένα qubit είναι:

- Πύλη μονάδα  $\hat{I}$ :

$$\hat{I}|0\rangle = |0\rangle \quad , \quad \hat{I}|1\rangle = |1\rangle$$

- Πύλες Pauli  $\hat{X}$ ,  $\hat{Y}$ ,  $\hat{Z}$  (δεν είναι παρά οι γνωστές μήτρες Pauli  $\hat{\sigma}_x$ ,  $\hat{\sigma}_y$  και  $\hat{\sigma}_z$  αντίστοιχα):

$$\hat{X}|0\rangle = |1\rangle \quad , \quad \hat{X}|1\rangle = |0\rangle$$

$$\hat{Y}|0\rangle = i|1\rangle \quad , \quad \hat{Y}|1\rangle = -i|0\rangle$$

$$\hat{Z}|0\rangle = |0\rangle \quad , \quad \hat{Z}|1\rangle = -|1\rangle$$

- Πύλη Hadamard  $\hat{H}$

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{H} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \equiv |+\rangle$$

$$\hat{H} |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) \equiv |-\rangle$$

- Πύλη φάσης  $\hat{R}_a$ :

$$\hat{R}_a = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{ia} \end{pmatrix}$$

$$\hat{R}_a |0\rangle = |0\rangle, \quad \hat{R}_a |1\rangle = e^{ia} |1\rangle$$

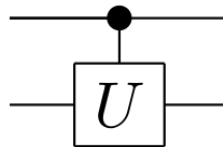
### Πύλες που δρουν σε δυο qubits

Οι πύλες αυτές δρουν στον χώρο Hilbert που είναι τανυστικό γινόμενο δυο χώρων Hilbert ενός qubit, και επομένως είναι μήτρες  $4 \times 4$ .

Οι πιο απλές και χρήσιμες πύλες που δρουν σε δυο qubits είναι οι *ελεγχόμενες πύλες* (controlled gates). Σε αυτό το είδος των πυλών, το πρώτο qubit παίζει τον ρόλο του *qubit ελέγχου* (control qubit), ενώ το δεύτερο, τον ρόλο του *qubit στόχου* (target qubit). Αν  $\hat{U}$  είναι μια οποιαδήποτε πύλη που δρα σε ένα qubit (στόχο), τότε η αντίστοιχη πύλη ελέγχου  $\hat{U}_C$  είναι:

$$\hat{U}_C = |0\rangle\langle 0| \otimes \hat{I} + |1\rangle\langle 1| \otimes \hat{U}$$

με κυκλωματικό σύμβολο:



Βλέπουμε λοιπόν ότι η πύλη  $\hat{U}$  δρα στο qubit στόχο μόνο αν το qubit ελέγχου είναι  $|1\rangle$ , διαφορετικά το qubit στόχος μένει όπως είναι.

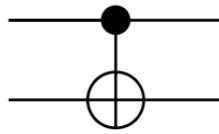
Η πιο γνωστή πύλη ελέγχου είναι η πύλη CNOT (controlled-X) στην οποία  $\hat{U} = \hat{X}$ . Η δράση της CNOT πάνω σε μια τυχούσα κατάσταση  $|x, y\rangle \equiv |x\rangle |y\rangle$ ,  $x, y = 0$  ή  $1$ , περιγράφεται από τις σχέσεις:

$$\text{CNOT} |x, y\rangle = |x, y \oplus x\rangle$$

όπου  $x \oplus y = (x + y) \bmod 2$  είναι πρόσθεση modulo 2, οπότε  $0 \oplus 0 = 0$ ,  $0 \oplus 1 = 1 \oplus 0 = 1$  και  $1 \oplus 1 = 0$ , που σημαίνει ότι αν το qubit ελέγχου είναι  $|0\rangle$ , η πύλη CNOT δεν κάνει τίποτε στο δεύτερο, ενώ αν είναι  $|1\rangle$ , η πύλη CNOT αναστρέφει το δεύτερο. Σε μορφή πίνακα η πύλη CNOT είναι:

$$\text{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

με κυκλωματικό σύμβολο:



Μια θεμελιώδης νέα δυνατότητα που μας παρέχει η πύλη CNOT είναι η δημιουργία εναγκαλισμένων καταστάσεων:

$$\text{CNOT} (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) |1\rangle = \alpha \text{CNOT} |0\rangle |1\rangle + \beta \text{CNOT} |1\rangle |1\rangle = \alpha |0\rangle |1\rangle + \beta |1\rangle |0\rangle$$

Μια άλλη ενδιαφέρουσα πύλη ελέγχου είναι η  $\hat{U}_f$  (γενίκευση της CNOT  $f(x) = x$ ), που η δράση της δίνεται από τη σχέση:

$$\hat{U}_f |x, y\rangle = |x, y \oplus f(x)\rangle$$

όπου  $f(x)$  είναι μια συνάρτηση τύπου Boole (απεικόνιση από  $\{0, 1\}$  στο  $\{0, 1\}$ ) πάνω στη δυαδική μεταβλητή  $x$ . Υπάρχουν τέσσερις τέτοιες συναρτήσεις που χωρίζονται σε δύο ομάδες:

- $f(x)$  σταθερή:

$$f_1 : f_1(0) = f_1(1) = 0$$

$$f_2 : f_2(0) = f_2(1) = 1$$

- $f(x)$  ισοζυγισμένη:

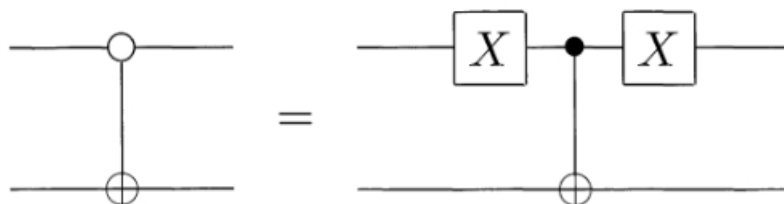
$$f_3 : f_3(0) = 0, f_3(1) = 1$$

$$f_4 : f_4(0) = 1, f_4(1) = 0$$

Για κάθε μια από αυτές τις συναρτήσεις η αντίστοιχη πύλη  $\hat{U}_f$  είναι:

$$\hat{U}_{f_1} = \hat{I} \otimes \hat{I}, \quad \hat{U}_{f_2} = \hat{I} \otimes \hat{X}, \quad \hat{U}_{f_3} = \text{CNOT}, \quad \hat{U}_{f_4} = \overline{\text{CNOT}}$$

όπου  $\overline{\text{CNOT}}$  λειτουργεί όπως η CNOT αλλά με εναλλαγή των ρόλων των  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$  στο qubit ελέγχου. Η δράση της πύλης αυτής είναι ισοδύναμη με τη δράση πρώτα της  $\hat{X}$  στο qubit ελέγχου, μετά δράση της CNOT στα δύο qubits και τέλος δράση της  $\hat{X}$  στο qubit ελέγχου για την επαναφορά του στην αρχική του κατάσταση:



Σημειώνουμε ότι μια οποιαδήποτε πύλη που δρα σε δύο qubits μπορεί να κατασκευαστεί από συνδυασμό πυλών που δρουν σε ένα qubit και πυλών CNOT.

### 5.1.3 Θεώρημα της μη αντιγραφής

Το *θεώρημα της μη αντιγραφής* (no cloning theorem) λέει ότι μια άγνωστη χβαντική κατάσταση  $|\psi\rangle$  δεν μπορεί να αντιγραφεί, δηλαδή δεν υπάρχει μοναδιακός τελεστής αντιγραφής  $\hat{U}$ , τέτοιος ώστε  $\hat{U}|\psi\rangle \otimes |\phi_0\rangle = |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$ , όπου  $|\phi_0\rangle$  είναι η αρχική κατάσταση του συστήματος στο οποίο θα γίνει η αντιγραφή της  $|\psi\rangle$ .

Η απόδειξη του θεωρήματος αυτού είναι η εξής: Έστω ότι υπάρχει ένας τέτοιος τελεστής αντιγραφής. Τότε, αν  $|\psi_1\rangle$  και  $|\psi_2\rangle$  είναι δύο τυχαίες άγνωστες χβαντικές καταστάσεις, η αντιγραφή τους θα δώσει:

$$\hat{U}|\psi_1\rangle \otimes |\phi_0\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_1\rangle, \quad \hat{U}|\psi_2\rangle \otimes |\phi_0\rangle = |\psi_2\rangle \otimes |\psi_2\rangle$$

Έστω ότι τώρα αντιγράφουμε την κατάσταση επαλληλίας των  $|\psi_1\rangle$  και  $|\psi_2\rangle$ :

$$\hat{U}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) \otimes |\phi_0\rangle = (c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) \otimes (c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle)$$

Όμως ο τελεστής  $\hat{U}$  είναι γραμμικός, επομένως:

$$\begin{aligned} \hat{U}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) \otimes |\phi_0\rangle &= c_1(\hat{U}|\psi_1\rangle \otimes |\phi_0\rangle) + c_2(\hat{U}|\psi_2\rangle \otimes |\phi_0\rangle) \\ &= c_1|\psi_1\rangle \otimes |\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \otimes |\psi_2\rangle \\ &\neq (c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) \otimes (c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) \end{aligned}$$

Επομένως συμπεραίνουμε ότι η υπόθεση μας για την ύπαρξη τέτοιου τελεστή αντιγραφής δεν ισχύει.

Υπενθυμίζουμε ότι το θεώρημα της μη αντιγραφής αναφέρεται στην αντιγραφή μιας άγνωστης κατάστασης, διότι αν είναι γνωστή, τότε μπορούμε πάντα να τη θεωρήσουμε ως ιδιοκατάσταση κάποιου ερμητιανού τελεστή και η μέτρηση αυτού του φυσικού μεγέθους θα δίνει την κατάσταση που επιθυμούμε. Με άλλα λόγια, η πολλαπλή δημιουργία μιας γνωστής κατάστασης είναι δυνατή, αλλά όχι η αντιγραφή μιας άγνωστης.

### 5.1.4 Η δύναμη των χβαντικών υπολογισμών

Από την κατάσταση επαλληλίας (5.2) φαίνεται αμέσως το πλεονέκτημα των χβαντικών υπολογιστών έναντι των κλασικών: τα  $N$  qubits μπορούν να κωδικοποιήσουν  $2^N$  δυαδικές σειρές ψηφίων μήκους  $N$ , έναντι μόνο μιας στην κλασική περίπτωση. Δηλαδή, η χωρητικότητα μιας σειράς από qubits είναι εκθετικά μεγαλύτερη από αυτή των κλασικών bits.

Άλλο ένα πλεονέκτημα των χβαντικών υπολογιστών έναντι των κλασικών είναι ο τρόπος με τον οποίο γίνεται η επεξεργασία της πληροφορίας. Στην χβαντική περίπτωση, οι χβαντικές πύλες  $\hat{U}$  δρουν ταυτόχρονα – ή “παράλληλα” – σε όλες τις συνιστώσες της κατάστασης των  $N$  qubits (5.2), και ένας τέτοιος μετασχηματισμός  $\hat{U}$ , ακόμα και αν δρα μόνο σε ένα qubit, μπορεί να αλλάξει την ολική κατάσταση των  $N$  qubits (αυτό οφείλεται στη μη-τοπική και ολιστική φύση των καταστάσεων εναγκαλισμού). Από την άλλη, στην κλασική περίπτωση, οι λογικές πύλες δρουν πάνω μόνο σε ένα ή δύο bits κάθε φορά, και επομένως χρειάζεται να δράσουμε  $2^N$  φορές για να πετύχουμε αυτό που πετυχαίνει μια δράση της χβαντικής πύλης.

Ένα πρόβλημα που έχουμε να αντιμετωπίσουμε στους χβαντικούς υπολογιστές είναι η δυσκολία ανάγνωσης των αποτελεσμάτων των υπολογισμών. Στην περίπτωση των

κλασικών υπολογιστών, τα αποτελέσματα των υπολογισμών λαμβάνονται απλώς διαβάζοντας την τελική τιμή όλων των bits, κάτι που μπορούμε να επαναλάβουμε πολλές φορές χωρίς να μεταβάλλεται η κατάσταση του υπολογιστή. Η αντίστοιχη διαδικασία στην κβαντική περίπτωση είναι η προβολική μέτρηση στο τέλος του υπολογισμού, σε κάποια βάση των qubits του συστήματος. Όμως αυτό θα έχει ως αποτέλεσμα την “κατάρρευση” της ολικής κατάστασης του συστήματος των  $N$  qubits σε μια κατάσταση της βάσης μέτρησης (και την καταστροφή οποιοδήποτε εναγκαλισμού ανάμεσα στα qubits). Η φύση της μέτρησης αυτής είναι πιθανοκρατική, που σημαίνει ότι, εν γένει, τα αποτελέσματα των μετρήσεων θα διαφέρουν μεταξύ τους (συνολικά υπάρχουν  $2^N$  δυνατά αποτελέσματα). Ευτυχώς όμως, σε πολλές περιπτώσεις, είναι δυνατόν να επαληθεύσουμε αν κάποιο αποτέλεσμα του κβαντικού υπολογισμού είναι το σωστό αποτέλεσμα ή όχι. Βέβαια, συνήθως χρειάζεται να εκτελέσουμε μερικές φορές τον ίδιο υπολογισμό και μέτρηση ώστε να περιορίσουμε το ενδεχόμενο του σφάλματος. Παρακάτω παρουσιάζεται ένα τέτοιο παράδειγμα.

### Αλγόριθμος Deutsch

Η δουλειά του κβαντικού αλγορίθμου Deutsch, που χρειάζεται δύο qubits για να λειτουργήσει, είναι να προσδιορίσει αν μια συνάρτηση τύπου Boole είναι σταθερή ή ισοζυγισμένη, δηλαδή αν είναι  $f(0) = f(1)$  ή  $f(0) \neq f(1)$ . Όπως είδαμε νωρίτερα, υπάρχουν τέσσερις τέτοιες συναρτήσεις,  $f_i(x)$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$ . Ένας κλασικός υπολογιστής για να απαντήσει στο ερώτημα αυτό – αν η συνάρτηση  $f$  είναι σταθερή ή όχι – χρειάζεται να εκτελέσει δύο πράξεις: να υπολογίσει τις δύο τιμές  $f(0)$  και  $f(1)$ , και αν βγουν ίσες τότε η δοθείσα συνάρτηση είναι σταθερή, αλλιώς δεν είναι. Παρακάτω θα δείξουμε ότι με τον αλγόριθμο Deutsch το παραπάνω πρόβλημα λύνεται με μια μόνο πράξη.

Θεωρούμε ότι η αρχική κατάσταση των δύο qubits του κβαντικού υπολογιστή είναι  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$  αντίστοιχα, δηλαδή  $|\psi_0\rangle = |0\rangle|1\rangle$ . Εφαρμόζοντας την πύλη Hadamard  $\hat{H}$  στα δύο qubits αυτά, παίρνουμε την κατάσταση:

$$|\psi\rangle = (\hat{H}|0\rangle) (\hat{H}|1\rangle) = |+\rangle|-\rangle$$

όπου

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle)$$

Εφαρμόζουμε τώρα την πύλη  $\hat{U}_f$  στην  $|\psi\rangle$ :

$$\begin{aligned} \hat{U}_f |\psi\rangle &= \frac{1}{2} \{ |0\rangle [ |0 \oplus f(0)\rangle - |1 \oplus f(0)\rangle ] + |1\rangle [ |0 \oplus f(1)\rangle - |1 \oplus f(1)\rangle ] \} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [ (-1)^{f(0)} |0\rangle |-\rangle + (-1)^{f(1)} |1\rangle |-\rangle ] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [ (-1)^{f(0)} |0\rangle + (-1)^{f(1)} |1\rangle ] |-\rangle \end{aligned}$$

Εκτελώντας την προβολική μέτρηση στο πρώτο qubit ως προς τη βάση  $|\pm\rangle$ , θα παίρνουμε πάντα  $|+\rangle$  αν η  $f$  είναι σταθερή, και  $|-\rangle$  αν είναι ισοζυγισμένη.

Βλέπουμε ότι πράγματι, ο κβαντικός υπολογιστής, χάρη στον κβαντικό παραλληλισμό, βρίσκει τη λύση στο πρόβλημα μόνο με ένα “τρέξιμο” έναντι των δύο που απαιτεί

ένας κλασικός υπολογιστής. Όμως δεν πρέπει να ξεχνάμε ότι οι υπολογιστές δεν είναι τέλειες μηχανές, αλλά πραγματικά συστήματα που λειτουργούν με ένα ενδεχόμενο σφάλματος (λόγω της αποσυνοχής προκαλούμενης από την αλληλεπίδραση του συστήματος με το περιβάλλον του, κλασικού θορύβου της συσκευής μέτρησης κτλ.). Έτσι λοιπόν, ακόμα και όταν ο ιδεατός αλγόριθμος Deutsch προβλέπει πχ. το αποτέλεσμα  $|+\rangle$ , δηλαδή ότι η συνάρτηση  $f$  είναι σταθερή, η πραγματική λειτουργία του υπολογιστή δεν θα δώσει ακριβώς  $|+\rangle$ , αλλά μια κατάσταση υπέρθεσης της μορφής  $a|+\rangle + b|-\rangle$ . Για την αντιμετώπιση του προβλήματος αυτού, μπορούμε να επαναλάβουμε τον υπολογισμό όσες φορές χρειαστεί ώστε να βεβαιωθούμε (πάντα με ένα ανεκτό περιθώριο λάθους) ότι η απάντηση είναι  $|+\rangle$  και όχι η  $|-\rangle$ , και αν μειώσουμε αρκετά τα σφάλματα που αναφέραμε, θα είναι  $|a|^2 \gg |b|^2$  και ο αριθμός των επαναλήψεων αυτών αρκετά μικρός. Επομένως συμπεραίνουμε ότι ο περιορισμός ή η διόρθωση των κβαντικών σφαλμάτων είναι πολύ σημαντική για να είναι η λειτουργία ενός κβαντικού υπολογιστή συμφέρουσα έναντι των κλασικών.

## 5.2 Κβαντική διόρθωση σφαλμάτων

Η αποσυνοχή λόγω της αλληλεπίδρασης των qubits με το περιβάλλον και τη συσκευή ελέγχου, καθώς και ο κλασικός θόρυβος, είναι αναπόφευκτα φαινόμενα στη λειτουργία ενός κβαντικού υπολογιστή που οδηγούν σε σημαντικά σφάλματα στους υπολογισμούς. Επομένως η κβαντική διόρθωση των σφαλμάτων (quantum error correction) είναι απαραίτητη για να μπορούν να γίνονται χρήσιμοι κβαντικοί υπολογισμοί. Η μέθοδος βασίζεται στη σύζευξη του συστήματος με ένα βοηθητικό σύστημα για να ανακατασκευάσουμε την αρχική κατάσταση επαλληλίας.

### 5.2.1 Κλασική διόρθωσης σφαλμάτων έναντι της κβαντικής

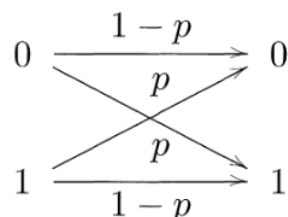
Ας δούμε πρώτα πως γίνεται η διόρθωση σφαλμάτων στους κλασικούς υπολογιστές. Η μέθοδος βασίζεται στον πλεονασμό της πληροφορίας, δηλαδή αντί για κωδικοποίηση ενός bit πληροφορίας (logical bit) σε ένα φυσικό bit, κωδικοποιούμε το λογικό bit σε πολλά φυσικά bits (πχ. τρία):

$$\begin{aligned} 0_L &\rightarrow 000 \\ 1_L &\rightarrow 111 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Υποθέτουμε ότι λόγω κάποιας διαδικασίας θορύβου, ένα από τα bits αναστρέφεται, πχ.:

$$000 \rightarrow 001$$

Αν η πιθανότητα  $p$  της αναστροφής αυτής είναι αρκετά μικρή, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι αναστράφηκε το τρίτο bit και ότι το λογικό bit είναι το  $0_L$ .



Η πιθανότητα ότι θα αναστραφούν δύο ή περισσότερα bits είναι  $3p^2(1-p) + p^3$ , οπότε η πιθανότητα του σφάλματος είναι  $p_\sigma = 3p^2 - 2p^3$ . Χωρίς την κωδικοποίηση (5.3), η πιθανότητα σφάλματος είναι  $p$ , επομένως η μέθοδος αυτή έχει νόημα όταν  $p_\sigma < p$ , που ισχύει για  $p < 1/2$ .

Η κλασική μέθοδος αυτή της καταπολέμησης των σφαλμάτων δεν μπορεί να εφαρμοστεί απευθείας στους κβαντικούς υπολογιστές. Αυτό οφείλεται στο ότι, λόγω του θεώρημα της μη-αντιγραφής, δεν επιτρέπεται να φτιάξουμε πολλά αντίγραφα άγνωστων κβαντικών καταστάσεων ώστε να εφαρμόσουμε την κωδικοποίηση (5.3). Αλλά ακόμα και αν τέτοια αντιγραφή ήταν εφικτή, θα ήταν αδύνατον να συγκρίνουμε τα αντίγραφα στην έξοδο λόγω της “κατάρρευσης” της κατάστασης που προκαλείται από τη μέτρηση.

Άλλο ένα πρόβλημα είναι ότι, σε αντίθεση με τις δύο διακριτές καταστάσεις ενός bit, υπάρχουν άπειρες καταστάσεις ενός qubit,  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ , και κατά συνέπεια υπάρχουν άπειρα δυνατά κβαντικά σφάλματα που αποτελούν ένα συνεχές. Επομένως, φαίνεται ότι απαιτείται ένας άπειρος αριθμός από διαδικασίες διόρθωσης σφαλμάτων στην κβαντική περίπτωση. Στην επόμενη υποενότητα θα δούμε πως να ξεπεράσουμε αυτά τα εμπόδια και να κάνουμε τη διόρθωση των σφαλμάτων στους κβαντικούς υπολογισμούς δυνατή.

## 5.2.2 Διακριτοποίηση των κβαντικών σφαλμάτων

Θα δούμε τώρα πως μπορούμε να διακριτοποιήσουμε το συνεχές των δυνατών κβαντικών σφαλμάτων σε γραμμικούς συνδυασμούς ενός πολύ μικρού αριθμού σφαλμάτων, τα οποία στη συνέχεια μπορούν να διορθωθούν. Για το σκοπό αυτό θεωρούμε ένα qubit  $\mathcal{S}$  που αλληλεπιδρά με κάποιο περιβάλλον  $\mathcal{E}$ . Υποθέτουμε ότι η αρχική κατάσταση του  $\mathcal{S}$  είναι  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  και του  $\mathcal{E}$  είναι  $|e_r\rangle$ , οπότε η αρχική κατάσταση του σύνθετου συστήματος  $\mathcal{SE}$  είναι  $|\psi\rangle|e_r\rangle$ . Μια αυθαίρετη αλληλεπίδραση ανάμεσα στα  $\mathcal{S}$  και  $\mathcal{E}$  μπορεί να αναπαρασταθεί από την εξέλιξη:

$$|0\rangle|e_r\rangle \rightarrow c_{00}|0\rangle|e_{00}\rangle + c_{01}|1\rangle|e_{01}\rangle \quad (5.4\alpha')$$

$$|1\rangle|e_r\rangle \rightarrow c_{10}|0\rangle|e_{10}\rangle + c_{11}|1\rangle|e_{11}\rangle \quad (5.4\beta')$$

όπου οι συντελεστές  $c_{ij}$  παίρνουν τιμές 0 ή 1, και οι καταστάσεις του περιβάλλοντος  $|e_{ij}\rangle$  δεν είναι απαραίτητως ορθογώνιες και κανονικοποιημένες. Για  $c_{00} = c_{11} = 1$  και  $c_{01} = c_{10} = 0$ , έχουμε την περίπτωση της καθαρής αποσυνοχής (καθαρής συμπλεκτικής αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον, χωρίς την αλλαγή των καταστάσεων  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$ ).

Θεωρούμε την πιο γενική περίπτωση στην οποία όλοι οι συντελεστές στην (5.4) είναι ίσοι με τη μονάδα. Οπότε:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle|e_r\rangle &\rightarrow \alpha(|0\rangle|e_{00}\rangle + |1\rangle|e_{01}\rangle) + \beta(|0\rangle|e_{10}\rangle + |1\rangle|e_{11}\rangle) \\ &= \underbrace{(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)}_{\hat{I}|\psi\rangle} \underbrace{\frac{1}{2}(|e_{00}\rangle + |e_{11}\rangle)}_{|e_I\rangle} + \underbrace{(\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle)}_{\hat{\sigma}_x|\psi\rangle} \underbrace{\frac{1}{2}(|e_{01}\rangle + |e_{10}\rangle)}_{|e_x\rangle} \\ &+ \underbrace{(\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle)}_{\hat{\sigma}_z|\psi\rangle} \underbrace{\frac{1}{2}(|e_{00}\rangle - |e_{11}\rangle)}_{|e_z\rangle} + \underbrace{(\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle)}_{\hat{\sigma}_y|\psi\rangle} \underbrace{\frac{1}{2}(|e_{01}\rangle - |e_{10}\rangle)}_{|e_y\rangle} \end{aligned}$$

Επομένως η εξίσωση αυτή γράφεται ως:

$$|\psi\rangle|e_r\rangle \rightarrow \hat{I}|\psi\rangle|e_I\rangle + \sum_{s=x,y,z} (\hat{\sigma}_s|\psi\rangle)|e_s\rangle \quad (5.5)$$

Αυτή η διακριτοποίηση του συνεχούς των δυνατών αλλαγών της κατάστασης σε επαλληλία μόνο τεσσάρων τελεστών μπορεί να γίνει επειδή το  $\{\hat{I}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$  αποτελεί ένα πλήρες σύνολο τελεστών του χώρου Hilbert  $\mathcal{H}_S$  του qubit  $\mathcal{S}$ . Επειδή ο τελεστής  $\hat{\sigma}_x$  αναστρέφει τα δύο bits  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$ , ενώ ο  $\hat{\sigma}_z$  περιστρέφει τη φάση του bit  $|1\rangle$  κατά  $180^\circ$  (που ισοδυναμεί με την αναστροφή του προσήμου), το αποτέλεσμα της δράσης του  $\hat{\sigma}_x$  στην  $|\psi\rangle$  συχνά αναφέρεται ως “bit-flip error”, ενώ του  $\hat{\sigma}_z$  ως “phase-flip error”. Ο τελεστής  $\hat{\sigma}_y$  είναι απλώς ο συνδυασμός των bit-flip error και phase-flip error, καθώς  $\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z$ .

Η εξέλιξη (5.5) μπορεί να γενικευτεί σε ένα σύστημα από  $N$  qubits που αλληλεπιδρούν με κάποιο περιβάλλον  $\mathcal{E}$ :

$$|\psi\rangle |e_r\rangle \rightarrow \sum_i \left( \hat{E}_i |\psi\rangle \right) |e_i\rangle \quad (5.6)$$

όπου οι τελεστές σφάλματος (error operators)  $\hat{E}_i$  είναι τανυστικά γινόμενα  $N$  τελεστών από το σύνολο  $\{\hat{I}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$ . Για παράδειγμα:

$$\hat{E}_i = \hat{\sigma}_y^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)} \otimes \hat{\sigma}_x^{(3)} \otimes \dots \otimes \hat{\sigma}_z^{(N)}, \text{ κτλ.}$$

Ο άνω δείκτης δείχνει σε ποίο qubit δρα ο κάθε τελεστής.

Θεωρούμε την απλοποιημένη έκδοση της (5.5), μόνο με το phase-flip error που οφείλεται στην αποσυνοχή λόγω της αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον:

$$|\psi\rangle |e_r\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{I} |\psi\rangle |e_+\rangle + \hat{\sigma}_z |\psi\rangle |e_-\rangle \right)$$

όπου

$$|e_\pm\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|e_{00}\rangle \pm |e_{11}\rangle)$$

Η γενίκευση σε  $N$  qubits δίνεται από την (5.6) με τελεστές σφάλματος  $\hat{E}_i$  αυτή τη φορά να είναι τανυστικά γινόμενα  $N$  τελεστών από το σύνολο  $\{\hat{I}, \hat{\sigma}_z\}$  [13]. Για παράδειγμα:

$$\hat{E}_i = \hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(3)} \otimes \dots \otimes \hat{\sigma}_z^{(N)}, \text{ κτλ.}$$

Είναι πιο πρακτικό να γράψουμε τους τελεστές σφάλματος  $\hat{E}_i$  ως  $\hat{Z}_{j_1 j_2 \dots j_N}$ , όπου κάθε  $j_k$  είναι 0 αν στο  $k$ -οστό qubit δρα ο τελεστής  $\hat{I}$ , ή 1 αν δρα ο  $\hat{\sigma}_z$ . Για παράδειγμα, ο τελεστής  $\hat{E}_i = \hat{\sigma}_z^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(3)} \otimes \dots \otimes \hat{\sigma}_z^{(N)}$  γράφεται ως  $\hat{Z}_{101\dots 1}$ . Οπότε η εξέλιξη της αρχικής κατάστασης  $|\psi\rangle |e_r\rangle$  γράφεται ως:

$$|\psi\rangle |e_r\rangle \rightarrow \left( \sum_{j_1=0}^1 \sum_{j_2=0}^1 \dots \sum_{j_N=0}^1 \hat{Z}_{j_1 j_2 \dots j_N} |\psi\rangle \right) |\tilde{e}_{j_1 j_2 \dots j_N}\rangle$$

όπου  $|\tilde{e}_{j_1 j_2 \dots j_N}\rangle$  είναι κάποιες σχετικές καταστάσεις του περιβάλλοντος.

Εν γένει υπάρχουν  $2^N$  διαφορετικοί τελεστές σφάλματος  $\hat{Z}_{j_1 j_2 \dots j_N}$  με αριθμό των phase-flip errors μέχρι και  $N$  (βαθμού μέχρι και  $N$ ). Ευτυχώς όμως, σε πολλές περιπτώσεις ενδιαφέροντος τα πράγματα απλοποιούνται αρκετά. Μια τέτοια περίπτωση είναι όταν έχουμε μερική αποσυνοχή (partial decoherence), στην οποία μόνο ένας μικρός



αριθμός  $K < N$  των qubits συμπλέκεται με το περιβάλλον ανάμεσα σε δύο διαδοχικές εφαρμογές του μηχανισμού διόρθωσης σφαλμάτων. Οπότε είναι αρκετό να περιοριστούμε στους  $2^K$  δυνατούς τελεστές σφάλματος βάρους  $\leq K$ . Μια άλλη περίπτωση ενδιαφέροντος είναι όταν η αποσυνοχή γίνεται ανεξάρτητα σε κάθε qubit, δηλαδή το κάθε qubit έχει ένα δικό του περιβάλλον που δεν αλληλεπιδρά με τα περιβάλλοντα των άλλων qubits. Οπότε στην περίπτωση αυτή τα phase-flip errors στα πολλαπλά qubits δεν είναι συσχετισμένα μεταξύ τους.

### 5.2.3 Διόρθωση των σφαλμάτων λόγω της αποσυνοχής

Ας δούμε τώρα πως μπορούμε να κάνουμε τη διόρθωση των σφαλμάτων που οφείλονται στην αποσυνοχή, ώστε να επαναφέρουμε το σύστημα στην κατάσταση που είχε πριν την αποσυνοχή. Αντί να ψάχνουμε να βρούμε ποια σφάλματα χρειάζεται να διορθώσουμε κάνοντας μετρήσεις στο σύστημα και μετά να κάνουμε χειρισμούς στο συνολικό σύστημα  $\mathcal{SE}$  (κάτι που είναι δύσκολο, αν όχι αδύνατο), χρησιμοποιούμε ένα σύνολο βοηθητικών qubits ("ancilla qubits"), στο οποίο σε αντίθεση με το περιβάλλον  $\mathcal{E}$  έχουμε πλήρη πρόσβαση, για την ανίχνευση και διόρθωση των σφαλμάτων.

Η εξέλιξη του συνολικού συστήματος  $\mathcal{SE}$  που οφείλεται στη συμπλεκτική αλληλεπίδραση ανάμεσα στο σύστημα και το περιβάλλον δίνεται από την (5.6):

$$|\psi\rangle |e_r\rangle \rightarrow \sum_i \left( \hat{E}_i |\psi\rangle \right) |e_i\rangle$$

Ο σκοπός μας είναι να ανακτήσουμε την αρχική (άγνωστη) κατάσταση  $|\psi\rangle$  του  $\mathcal{S}$ . Για να το κάνουμε αυτό θεωρούμε ένα σύστημα  $\mathcal{A}$  από βοηθητικά qubits και το αφήνουμε να αλληλεπιδράσει με το σύστημα  $\mathcal{S}$ :

$$|a_r\rangle \left[ \sum_i \left( \hat{E}_i |\psi\rangle \right) |e_i\rangle \right] \rightarrow \sum_i |a_i\rangle \left( \hat{E}_i |\psi\rangle \right) |e_i\rangle \quad (5.7)$$

όπου  $|a_r\rangle$  είναι η αρχική κατάσταση του ancilla  $\mathcal{A}$ . Υποθέτουμε ότι οι καταστάσεις  $|a_i\rangle$  είναι, τουλάχιστον προσεγγιστικά, αμοιβαία ορθογώνιες, ώστε να μπορούν να διακριθούν από τη μέτρηση.

Εκτελούμε τώρα μια προβολική μέτρηση στο  $\mathcal{A}$ :

$$\hat{O}_{\mathcal{A}} = \sum_i a_i |a_i\rangle \langle a_i|$$

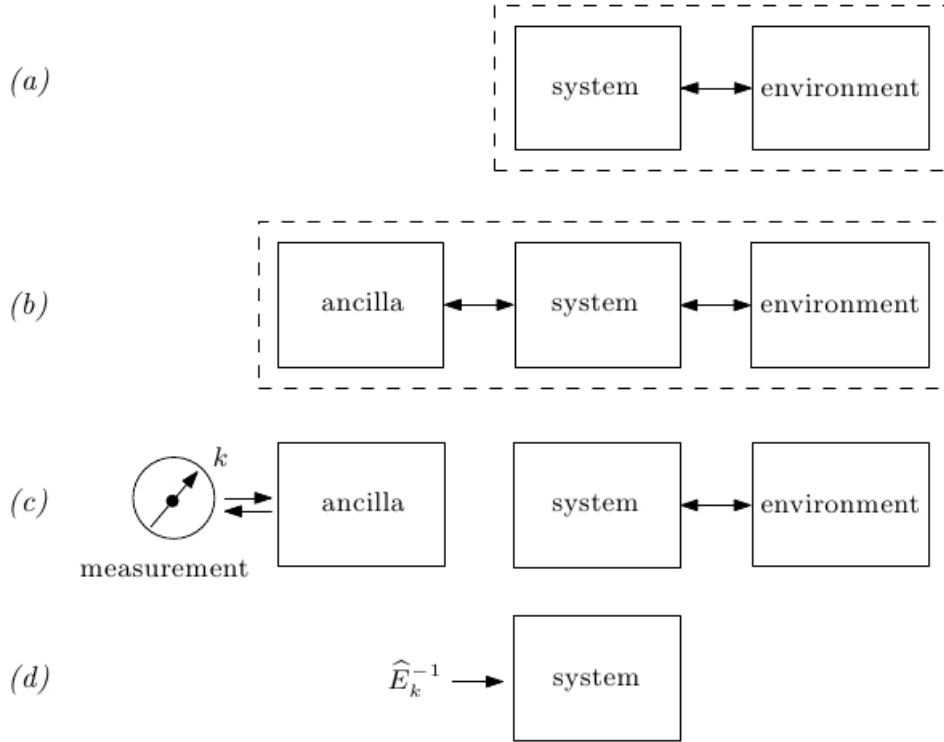
με  $a_i \neq a_j$  για  $i \neq j$ . Αυτή η προβολική μέτρηση θα έχει ως αποτέλεσμα κάποιο συγκεκριμένο  $a_k$ , οπότε η κατάσταση του συνολικού συστήματος ανάγεται σε:

$$\sum_i |a_i\rangle \left( \hat{E}_i |\psi\rangle \right) |e_i\rangle \rightarrow |a_k\rangle \left( \hat{E}_k |\psi\rangle \right) |e_k\rangle$$

Ξέροντας ότι το αποτέλεσμα της μέτρησης ήταν  $a_k$ , ξέρουμε επίσης ποιο μετασχηματισμό πρέπει να χρησιμοποιήσουμε ώστε να ανακτήσουμε την κατάσταση  $|\psi\rangle$ . Ο μετασχηματισμός αυτός δεν είναι άλλος από τον  $\hat{E}_k^{-1} = \hat{E}_k^\dagger$ :

$$|a_k\rangle \left( \hat{E}_k |\psi\rangle \right) |e_k\rangle \xrightarrow{\hat{E}_k^\dagger} |a_k\rangle |\psi\rangle |e_k\rangle$$

Με τον τρόπο έχουμε ανακτήσει την αρχική κατάσταση του  $\mathcal{S}$ , αναιρώντας τα αποτελέσματα της αποσυνοχής. Η σχηματική αναπαράσταση της διαδικασίας της χβαντικής διόρθωσης σφαλμάτων φαίνεται παρακάτω.



Μπορέσαμε να μετρήσουμε το βοηθητικό σύστημα  $\mathcal{A}$  χωρίς να καταστρέψουμε την χβαντική πληροφορία που περιέχεται στα qubits του  $\mathcal{S}$ , διότι οι καταστάσεις  $|a_i\rangle$  είναι συσχετισμένες με ολόκληρη την κατάσταση  $|\psi\rangle$  του  $\mathcal{S}$ , παρόλο που αυτή μετασχηματίστηκε από τους τελεστές σφάλματος  $\hat{E}_i$ . Η μέτρηση αυτή ανήγαγε την κατάσταση του  $\mathcal{ASE}$  σε ένα μοναδικό τελεστή σφάλματος και κάνοντας τον αντίστροφο μετασχηματισμό ανακτήσαμε την  $|\psi\rangle$ . Υπό αυτή την έννοια, η βασική ιδέα της χβαντικής διόρθωσης σφαλμάτων είναι η “καταπολέμηση του εναγκαλισμού με εναγκαλισμό” [19], με την προϋπόθεση της δυνατότητας πλήρους πρόσβασης στο βοηθητικό σύστημα  $\mathcal{A}$ .

Όμως ο παραπάνω μηχανισμός της χβαντικής διόρθωσης σφαλμάτων είναι πολύ εξιδανικευμένος και υπάρχουν πολλά προβλήματα στην πρακτική εφαρμογή του. Είναι αδύνατον να σχεδιάσουμε μια αλληλεπίδραση ανάμεσα στα υπολογιστικά qubits  $\mathcal{S}$  και τα βοηθητικά  $\mathcal{A}$  που να μας επιτρέπει να διακρίνουμε όλα τα δυνατά σφάλματα μέσω της μέτρησης στο  $\mathcal{A}$ , δηλαδή τέτοια ώστε  $\langle a_i | a_j \rangle \approx 0$  για  $\hat{E}_i \neq \hat{E}_j$ . Συνήθως περιοριζόμαστε στους μετασχηματισμούς της μορφής (5.7) που μπορούν να διακρίνουν όλα τα σφάλματα  $\hat{E}_i$  βάρους  $t < N$  (σφάλματα στα  $t$  qubits μόνο). Επιπλέον, οι αλγόριθμοι της χβαντικής διόρθωσης σφαλμάτων συνήθως δεν μπορούν να ανακτήσουν οποιεσδήποτε αρχικές καταστάσεις του  $\mathcal{H}_S$ , αλλά μόνο αυτές που υπάρχουν στον υπόχωρο  $\mathcal{H}_{code}$  (“code space”) του  $\mathcal{H}_S$ , ο οποίος ορίζει ένα υποσύνολο τελεστών σφάλματος που μπορούν να διορθωθούν. Έτσι λοιπόν, η συνθήκη για να είναι δυνατή η εφαρμογή του αλγορίθμου της χβαντικής διόρθωσης σφαλμάτων είναι η απαίτηση οι προβολικοί υπόχωροι  $\{\hat{E}_i \mathcal{H}_{code} | \text{βάρους}(\hat{E}_i) \leq t\}$  να είναι (τουλάχιστον προσεγγιστικά) αμοιβαία ορθογώνιοι για όλα τα  $i$ .

Άλλα προβλήματα με την κβαντική διόρθωση των σφαλμάτων είναι ότι, σε πραγματικές καταστάσεις, οι τελεστές σφάλματος  $\hat{E}_i$  μπορεί να είναι πολύ πολύπλοκοι, με αποτέλεσμα να μην είναι δυνατόν να εφαρμοστεί ο αντίστοιχος αντίστροφος μετασχηματισμός χωρίς να προκληθεί επιπρόσθετη αποσυνοχή. Επίσης, τα βοηθητικά qubits, όπως και τα υπολογιστικά, είναι επιρρεπείς στην αλληλεπίδραση με το περιβάλλον και κατά συνέπεια στην αποσυνοχή.

#### 5.2.4 Αλγόριθμος τριών qubits για τη διόρθωση σφαλμάτων φάσης

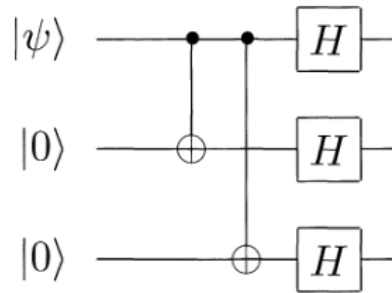
Στον αλγόριθμο αυτό κωδικοποιούμε το λογικό qubit  $\mathcal{S}$ ,  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ , σε τρία φυσικά qubits ως εξής:

$$(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|00\rangle \rightarrow \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle \quad (5.8)$$

Αυτό επιτυγχάνεται με την εφαρμογή των πυλών CNOT ανάμεσα στο πρώτο qubit και στα άλλα δύο. Έπειτα μετασχηματίζουμε στη συζυγή βάση  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ , όπου  $|\pm\rangle = (|0\rangle \pm |1\rangle)/\sqrt{2}$ , εφαρμόζοντας πύλες Hadamard και στα τρία qubits. Αυτό το κάνουμε γιατί στη βάση  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ , το phase-flip σφάλμα  $\hat{\sigma}_z$  λειτουργεί ως bit-flip σφάλμα, καθώς  $\hat{\sigma}_z|\pm\rangle = |\mp\rangle$ . Οπότε τελικά παίρνουμε:

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \rightarrow \alpha|+++ \rangle + \beta|--- \rangle$$

Το κύκλωμα που δημιουργεί αυτήν την κωδικοποίηση φαίνεται παρακάτω:



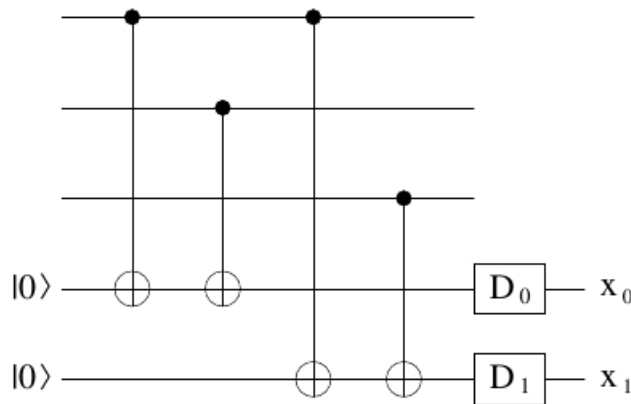
Η αλληλεπίδραση των τριών qubits αυτών με το περιβάλλον θα προκαλέσει αποσυνοχή και συνεπώς θα οδηγήσει στα φασικά σφάλματα  $\hat{Z}_{ijk}$ ,  $(i, j, k) \in \{0, 1\}$ . Θεωρούμε σφάλματα βάρους  $\leq 1$ , δηλαδή μόνο τα  $\hat{Z}_{000}$ ,  $\hat{Z}_{100}$ ,  $\hat{Z}_{010}$  και  $\hat{Z}_{001}$ . Οπότε η κατάσταση του συνολικού συστήματος qubits-περιβάλλον μπορεί να γραφτεί ως:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = & (\alpha|+++ \rangle + \beta|--- \rangle)|e_{000}\rangle \\ & + (\alpha|--+ \rangle + \beta|+- \rangle)|e_{100}\rangle \\ & + (\alpha|+ - + \rangle + \beta| - + - \rangle)|e_{010}\rangle \\ & + (\alpha|++ - \rangle + \beta| - - + \rangle)|e_{001}\rangle \end{aligned}$$

Για τη “διάγνωση” του σφάλματος, για άλλη μια φορά εφαρμόζουμε στα qubits μας τις πύλες Hadamard, ώστε να τα επαναφέρουμε στην αρχική βάση  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ :

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= (\alpha |000\rangle + \beta |111\rangle) |e_{000}\rangle \\ &+ (\alpha |100\rangle + \beta |011\rangle) |e_{100}\rangle \\ &+ (\alpha |010\rangle + \beta |101\rangle) |e_{010}\rangle \\ &+ (\alpha |001\rangle + \beta |110\rangle) |e_{001}\rangle \end{aligned}$$

Μετά εισάγουμε δύο βοηθητικά qubits προετοιμασμένα στην κατάσταση  $|a\rangle_r = |00\rangle$ . Για να κωδικοποιούμε στα βοηθητικά qubits την πληροφορία για τα σφάλματα στα τρία qubits του συστήματος, εφαρμόζουμε τις πύλες CNOT όπως στην παρακάτω εικόνα:



Επομένως

$$\begin{aligned} |a\rangle_r |\Psi\rangle &= |00\rangle (\alpha |000\rangle + \beta |111\rangle) |e_{000}\rangle \\ &+ |11\rangle (\alpha |100\rangle + \beta |011\rangle) |e_{100}\rangle \\ &+ |10\rangle (\alpha |010\rangle + \beta |101\rangle) |e_{010}\rangle \\ &+ |01\rangle (\alpha |001\rangle + \beta |110\rangle) |e_{001}\rangle \end{aligned}$$

Μετρώντας τα δύο βοηθητικά qubits (με συσκευές μέτρησης  $D_0$  και  $D_1$ ), μπορούμε να διακρίνουμε τα τέσσερα είδη σφαλμάτων, καθώς οι καταστάσεις  $|ij\rangle$ ,  $(i, j) \in \{0, 1\}$  τους είναι αμοιβαία ορθογώνιες. Τα δυνατά αποτελέσματα των μετρήσεων,  $x_0$  και  $x_1$ , καθώς και τα αντίστοιχα σφάλματα και μετασχηματισμοί ανάκτησης φαίνονται στον παρακάτω πίνακα:

$x_0 x_1$	Σφάλμα	Μετ. ανάκτησης
00	$\hat{Z}_{000}$	$\hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \hat{I}$
11	$\hat{Z}_{100}$	$\hat{\sigma}_x \otimes \hat{I} \otimes \hat{I}$
10	$\hat{Z}_{010}$	$\hat{I} \otimes \hat{\sigma}_x \otimes \hat{I}$
01	$\hat{Z}_{001}$	$\hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \hat{\sigma}_x$

Ας υποθέσουμε, για παράδειγμα, ότι τα αποτελέσματα των μετρήσεων ήταν  $x_0 = 0$  και  $x_1 = 1$ , οπότε η κατάσταση του σύνθετου συστήματος γίνεται:

$$|01\rangle (\alpha |001\rangle + \beta |110\rangle) |e_{001}\rangle$$

Επομένως, για να διορθώσουμε το σφάλμα, δηλαδή να ανακτήσουμε την αρχική κατάσταση  $|\psi\rangle$  του  $\mathcal{S}$ , εφαρμόζουμε τον μετασχηματισμό  $\hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \hat{\sigma}_x$ :

$$|01\rangle (\alpha |001\rangle + \beta |110\rangle) |e_{001}\rangle \xrightarrow{\hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \hat{\sigma}_x} |01\rangle (\alpha |000\rangle + \beta |111\rangle) |e_{001}\rangle$$

Τέλος, για να πάρουμε την αρχική κατάσταση  $|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ , δεν έχουμε παρά να εφαρμόσουμε τον αντίστροφο μετασχηματισμό του (5.8), αγνοώντας το περιβάλλον και τα βοηθητικά qubits.

Αν είχαμε συμπεριλάβει σφάλματα που επηρεάζουν πάνω από ένα qubit (δηλαδή σφάλματα βάρους  $> 1$ , όπως τα  $\hat{Z}_{110}$ ,  $\hat{Z}_{111}$  κτλ.), ο αλγόριθμος της διόρθωσης των σφαλμάτων φάσης που μόλις περιγράψαμε δεν θα έδινε πάντα σωστά αποτελέσματα. Αυτό οφείλεται στο ότι τα δύο βοηθητικά qubits μπορούν να μας δώσουν μόνο δύο κλασικά bits πληροφορίας για το σφάλμα, που σημαίνει ότι μπορούμε να διακρίνουμε με βεβαιότητα μέχρι τέσσερα δυνατά σφάλματα (από τα  $2^3 = 8$ ). Οπότε, αν συμπεριλάβουμε όλα τα δυνατά φασικά σφάλματα για τα τρία qubits, μπορούμε να ανακτήσουμε την αρχική κατάσταση μόνο με κάποια πιθανότητα. Αν η πιθανότητα σφάλματος σε ένα qubit είναι  $p$ , τότε η πιθανότητα αποτυχίας του αλγορίθμου διόρθωσης σφαλμάτων είναι  $3p^2(1-p) + p^3$  (η οποία είναι απλώς η πιθανότητα της εμφάνισης σφαλμάτων βάρους 2 και 3). Επομένως, αν  $p < 1/2$ , τα πιο πιθανά σφάλματα θα είναι τα σφάλματα βάρους 1 ( $\hat{Z}_{000}$ ,  $\hat{Z}_{100}$ ,  $\hat{Z}_{010}$  και  $\hat{Z}_{001}$ ), τα οποία και θεωρήσαμε στο παράδειγμα μας.

Υπάρχουν πολλοί άλλοι αλγόριθμοι διόρθωσης σφαλμάτων που δεν θα τους αναφέρουμε εδώ (πχ. ο αλγόριθμος των εννέα qubits του Shor – συνδυασμός των bit flip και phase flip αλγορίθμων – διορθώνει αυθαίρετα σφάλματα σε ένα qubit [17]). Ο σκοπός μας εδώ ήταν απλώς να παρουσιάσουμε την ύπαρξη του προβλήματος της δημιουργίας σφαλμάτων στους κβαντικούς υπολογισμούς λόγω της αποσυνοχής, και της ανάγκης της διόρθωσης τους. Όμως πρέπει να είμαστε ιδιαίτερα προσεκτικοί στην εφαρμογή των διορθωτικών αλγορίθμων που βασίζονται στο redundant encoding και τη χρήση των βοηθητικών qubits, διότι, όπως και τα υπολογιστικά qubits, τα qubits του αλγορίθμου είναι ευάλωτα στην αποσυνοχή.

Τέλος, σημειώνουμε ότι η πηγή των σφαλμάτων στους κβαντικούς υπολογισμούς δεν είναι μόνο η συνεχής αλληλεπίδραση με το μη-ελεγχόμενο περιβάλλον, αλλά και η αλληλεπίδραση με τις συσκευές χειρισμού (κβαντικές πύλες) και μέτρησης των qubits που οδηγεί στην αποσυνοχή. Επιπλέον, η συσκευή αυτές δεν είναι τέλειες και εισάγουν κλασικό θόρυβο. Ευτυχώς όμως αποδεικνύεται ότι οι κβαντικοί υπολογιστές μπορούν να εκτελέσουν σωστά τους υπολογισμούς ακόμα και με τις “ελαττωματικές” κβαντικές πύλες, αν η πιθανότητα του σφάλματος ανά μια τέτοια πύλη δεν ξεπερνά ένα ορισμένο σταθερό κατώφλι (*threshold theorem* [16], [19]).

### 5.3 Κβαντικοί υπολογισμοί στους decoherence-free υποχώρους

Στην ενότητα αυτή θα μιλήσουμε για τους παθητικούς τρόπους αποφυγής των κβαντικών σφαλμάτων, στους οποίους δεν εκτελούνται μετρήσεις για τον προσδιορισμό των σφαλμάτων και τη διόρθωση τους. Η βασική ιδέα εδώ είναι η κωδικοποίηση της πληροφορίας στους *decoherence-free υποχώρους* (DFS), κάτι που είναι δυνατόν να γίνει αν η αλληλεπίδραση του συστήματος με το περιβάλλον έχει κάποιες (δυναμικές) συμμετρίες.

Προτού προχωρήσουμε, ας δούμε ένα απλό παράδειγμα. Υποθέτουμε ότι έχουμε ένα σύστημα από  $N$  qubits που αλληλεπιδρούν με το περιβάλλον τους με τον εξής τρόπο:

$$|0\rangle_i \rightarrow |0\rangle_i, \quad |1\rangle_i \rightarrow e^{i\phi} |1\rangle_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (5.9)$$

Στο μοντέλο αυτό υποθέτουμε ότι η φάση  $\phi$  δεν εξαρτάται από το  $i$ -οστό qubit, δηλαδή η παραπάνω διαδικασία της αποσυνοχής είναι αναλλοίωτη στις μεταθέσεις των qubits. Αυτό είναι ένα παράδειγμα *συλλογικής αποσυνοχής*: μερικά qubits είναι συζευγμένα με το ίδιο ακριβώς περιβάλλον, με αποτέλεσμα τα σφάλματα να είναι συσχετισμένα μεταξύ τους.

Ας δούμε την περίπτωση των  $N = 2$  qubits. Σύμφωνα με την (5.9) έχουμε:

$$\begin{aligned} |00\rangle &\rightarrow |00\rangle \\ |01\rangle &\rightarrow e^{i\phi} |01\rangle \\ |10\rangle &\rightarrow e^{i\phi} |10\rangle \\ |11\rangle &\rightarrow e^{i2\phi} |11\rangle \end{aligned}$$

Καθώς οι καταστάσεις  $|01\rangle$  και  $|10\rangle$  αποκτούν την ίδια φάση, μια απλή κωδικοποίηση μας επιτρέπει την αποφυγή των σφαλμάτων φάσης:

$$|0_L\rangle \equiv |01\rangle, \quad |1_L\rangle \equiv |10\rangle$$

Τότε η εξέλιξη (5.9) μιας αυθαίρετης κατάστασης  $|\psi_L\rangle = \alpha |0_L\rangle + \beta |1_L\rangle$  ενός qubit είναι:

$$|\psi_L\rangle \rightarrow \alpha e^{i\phi} |0_L\rangle + \beta e^{i\phi} |1_L\rangle = e^{i\phi} |\psi_L\rangle$$

Η ολική φάση που απέκτησε η  $|\psi_L\rangle$  δεν έχει φυσική σημασία, και επομένως η κατάσταση αυτή έχει "άνοσία" στην αποσυνοχή. Ο διδιάστατος χώρος που παράγεται από τις καταστάσεις  $|01\rangle$  και  $|10\rangle$  είναι επομένως ένας decoherence free υπόχωρος. Ομοίως μπορούμε να βρούμε ότι για  $N = 3$  qubits οι υπόχωροι που παράγονται από τις καταστάσεις  $\{|000\rangle\}$ ,  $\{|100\rangle, |010\rangle, |001\rangle\}$ ,  $\{|011\rangle, |101\rangle, |110\rangle\}$  και  $\{|111\rangle\}$  είναι DFS, και οι καταστάσεις σε αυτούς τους υποχώρους αποκτούν ολικές φάσεις  $1$ ,  $e^{i\phi}$ ,  $e^{i2\phi}$  και  $e^{i3\phi}$  αντίστοιχα. Πιο γενικά, στην περίπτωση των  $N$  qubits, οι υπόχωροι που παράγονται από τις καταστάσεις της υπολογιστικής βάσης με τον ίδιο αριθμό από  $1$  (έστω  $k$ ) και  $0$  ( $n - k$ ), είναι DFS. Αυτοί οι υπόχωροι έχουν διάσταση  $d_k = \binom{n}{k}$  και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την κωδικοποίηση των  $\log_2 d_k$  qubits.

### 5.3.1 Συνθήκες για το DFS

Η Χαμιλτονιανή που περιγράφει ένα σύστημα  $\mathcal{S}$  συζευγμένο με περιβάλλον  $\mathcal{E}$  είναι:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathcal{S}} \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{H}_{\mathcal{E}} + \hat{H}_{int}$$

με Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης της μορφής  $\hat{H}_{int} = \sum_{\alpha} \hat{S}_{\alpha} \otimes \hat{E}_{\alpha}$ , όπου οι τελεστές  $\hat{S}_{\alpha}$  και  $\hat{E}_{\alpha}$  δρουν μόνο στο σύστημα και μόνο στο περιβάλλον, αντίστοιχα.

Οι decoherence-free υπόχωροι εξ ορισμού είναι υπόχωροι του χώρου Hilbert  $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$  στους οποίους το σύστημα  $\mathcal{S}$  είναι αποσυνζευγμένο από το περιβάλλον και επομένως η

εξέλιξη του εκεί είναι πλήρως μοναδιακή. Η απαραίτητη συνθήκη είναι η ύπαρξη ενός συνόλου ορθογώνιων και εκφυλισμένων ιδιοκαταστάσεων  $|s_i\rangle$  των τελεστών  $\hat{S}_\alpha$ :

$$\hat{S}_\alpha |s_i\rangle = \lambda_\alpha |s_i\rangle, \quad \forall \alpha \text{ και } i$$

Το ότι οι ιδιοτιμές  $\lambda$  εξαρτώνται μόνο από τον δείκτη  $\alpha$  του τελεστή  $\hat{S}_\alpha$  και όχι τον  $i$  της  $|s_i\rangle$  σημαίνει ότι είναι εκφυλισμένες. Αν περιοριστούμε στον υπόχωρο  $\mathcal{H}'_S$  του  $\mathcal{H}_S$ , που παράγεται από τα  $\{|s_i\rangle\}$ , μπορούμε να γράψουμε τη συνολική Χαμιλτονιανή ως:

$$\hat{H}' = \hat{H}_S \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \left( \hat{H}_E + \sum_\alpha \lambda_\alpha \hat{E}_\alpha \right)$$

όπου  $\hat{H}'$  είναι ο περιορισμός της Χαμιλτονιανής  $\hat{H}$  στον χώρο Χίλμπερτ  $\mathcal{H}'$ . Αν υποθέσουμε ότι η Χαμιλτονιανή  $\hat{H}_S$  αφήνει τον χώρο Χίλμπερτ  $\mathcal{H}'$  αναλλοίωτο και η αρχική κατάσταση είναι στον  $\mathcal{H}'$ , η εξέλιξη του συστήματος είναι decoherence-free (με άλλα λόγια ο υπόχωρος  $\mathcal{H}'_S$  είναι decoherence-free).

Για να το αποδείξουμε αυτό, υποθέτουμε ότι αρχικά,  $t = 0$ , το σύστημα και το περιβάλλον δεν είναι συσχετισμένα. Οπότε η αρχική κατάσταση του  $\mathcal{SE}$  είναι:

$$\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_E(0)$$

Επιπλέον υποθέτουμε ότι η αρχική μήτρα πυκνότητας του  $\mathcal{S}$  βρίσκεται στον  $\mathcal{H}'$ :

$$\hat{\rho}_S(0) = \sum_{i,j} c_{ij} |s_i\rangle \langle s_j|$$

Μπορούμε επίσης να γράψουμε:

$$\hat{\rho}_E(0) = \sum_{\mu,\nu} d_{\mu\nu} |e_\mu\rangle \langle e_\nu|$$

όπου  $\{|e_\mu\rangle\}$  είναι μια βάση του χώρου Χίλμπερτ του περιβάλλοντος  $\mathcal{E}$ .

Η χρονική εξέλιξη του  $\mathcal{SE}$  που δίνεται από τον τελεστή  $\hat{U}_{\mathcal{SE}}(t) = \exp(-i\hat{H}'t)$  δεν βγάζει το σύστημα από τον χώρο  $\mathcal{H}'$ . Πράγματι:

$$\hat{U}_{\mathcal{SE}}(t) (|s_i\rangle \otimes |e_\mu\rangle) = \hat{U}_S(t) |s_i\rangle \otimes \hat{U}_E(t) |e_\mu\rangle$$

όπου  $\hat{U}_S(t) = \exp(-i\hat{H}_S t)$  και  $\hat{U}_E(t) = \exp[-i(\hat{H}_E + \sum_\alpha \lambda_\alpha \hat{E}_\alpha) t]$ . Επομένως η εξέλιξη της μήτρα πυκνότητας  $\hat{\rho}$  δίνεται από τη σχέση:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}_S(t) \hat{\rho}_S(0) \hat{U}_S^\dagger(t) \otimes \hat{U}_E(t) \hat{\rho}_E(0) \hat{U}_E^\dagger(t)$$

Συνεπώς, η ανηγμένη μήτρας πυκνότητας του συστήματος  $\mathcal{S}$  προκύπτει παίρνοντας το μερικό ίχνος της  $\hat{\rho}$  ως προς το περιβάλλον:

$$\hat{\rho}_S(t) = \text{Tr}_E [\hat{\rho}(t)] = \hat{U}_S(t) \hat{\rho}_S(0) \hat{U}_S^\dagger(t) \text{Tr} [\hat{U}_E(t) \hat{\rho}_E(0) \hat{U}_E^\dagger(t)]$$

Όμως  $\text{Tr} [\hat{U}_E(t) \hat{\rho}_E(0) \hat{U}_E^\dagger(t)] = \text{Tr} [\hat{U}_E^\dagger(t) \hat{U}_E(t) \hat{\rho}_E(0)] = \text{Tr} [\hat{\rho}_E(0)] = 1$ . Οπότε:

$$\hat{\rho}_S(t) = \hat{U}_S(t) \hat{\rho}_S(0) \hat{U}_S^\dagger(t)$$

Βλέπουμε ότι η χρονική εξέλιξη του συστήματος  $\mathcal{S}$  στον υπόχωρο  $\mathcal{H}'_S$  είναι μοναδιακή και επομένως ο υπόχωρος  $\mathcal{H}'_S$  είναι DFS.

### 5.3.2 DFS για το μοντέλο σπιν-μποζόνιο

Θεωρούμε πρώτα την περίπτωση της συλλογικής αποσυνοχής στο μοντέλο σπιν-μποζόνιο (για  $N$  qubits). Η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης είναι:

$$\hat{H}_{int} = \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_z^{(i)} \otimes \sum_j \left( g_{ij} \hat{a}_j^\dagger + g_{ij}^* \hat{a}_j \right) \equiv \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_z^{(i)} \otimes \hat{E}_i$$

όπου  $g_{ij}$  είναι η σταθερά σύζευξης ανάμεσα στο  $i$ -οστό qubit και τον  $j$ -οστό περιβαλλοντικό ταλαντωτή. Οι τελεστές  $\hat{a}_j$  και  $\hat{a}_j^\dagger$  είναι οι τελεστές καταστροφής και δημιουργίας, αντίστοιχα, για τον  $j$ -οστό τρόπο ταλάντωσης του μποζονικού πεδίου.

Η υπόθεση ότι έχουμε συλλογική αποσυνοχή σημαίνει ότι όλα τα qubits είναι συζευγμένα με το ίδιο περιβάλλον, που συνεπάγεται ότι οι σταθερές σύζευξης  $g_{ij}$  και οι περιβαλλοντικοί τελεστές  $\hat{E}_i$  είναι ανεξάρτητοι από τον δείκτη  $i$ . Επομένως:

$$\hat{H}_{int} = \left( \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_z^{(i)} \right) \otimes \hat{E} \equiv \hat{S}_z \otimes \hat{E}$$

Η ακριβής μορφή του τελεστή  $\hat{E}$  δεν είναι σημαντική εδώ και το βασικό είναι ότι καταφέραμε να γράψουμε τη Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης στη μορφή γινομένου.

Σύμφωνα με τον ορισμό, ο DFS παράγεται από τις εκφυλισμένες ιδιοτιμές του συλλογικού τελεστή σπιν  $\hat{S}_z$ . Είναι ξεκάθαρο ότι μια οποιαδήποτε κατάσταση γινόμενο των  $N$  qubits της υπολογιστικής βάσης (5.1) θα είναι μια ιδιοκατάσταση του  $\hat{S}_z$ . Υπάρχουν συνολικά  $2N + 1$  διαφορετικές δυνατές ακέριαι ιδιοτιμές  $m$ , από  $m = -N$  (για την ιδιοκατάσταση  $|1 \cdots 1\rangle$ ) μέχρι  $m = N$  (για την ιδιοκατάσταση  $|0 \cdots 0\rangle$ ). Γενικά, μια κατάσταση της υπολογιστικής βάσης με  $m_0$  qubits στην κατάσταση  $|0\rangle$  έχει ιδιοτιμή  $m = 2m_0 - N$ .

Ο μέγιστος αριθμός των αμοιβαία ορθογώνιων καταστάσεων της υπολογιστικής βάσης με την ίδια ιδιοτιμή  $m$  του  $\hat{S}_z$ , δίνεται από το σύνολο  $\mathcal{G}_0$  των καταστάσεων βάσης με  $m = 0$ , δηλαδή των καταστάσεων βάσεις που έχουν τον ίδιο αριθμό των qubits στην κατάσταση  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$ . Μπορούμε να γράψουμε:

$$\mathcal{G}_0 = \left\{ |i_1 \cdots i_N\rangle \mid i_j \in \{0, 1\}, \sum_{j=1}^N m_j = m = 0 \right\}$$

Το σύνολο  $\mathcal{G}_0$  έχει  $n_0$  καταστάσεις:

$$n_0 = \binom{N}{N/2}$$

Επομένως οι καταστάσεις του  $\mathcal{G}_0$  παράγουν τον decoherence-free υπόχωρο διάστασης  $n_0$ . Για μεγάλες τιμές του  $N$ , χρησιμοποιώντας τον τύπο Stirling, παίρνουμε την προσέγγιση:

$$\log_2 \binom{N}{N/2} \approx N - \frac{1}{2} \log_2(\pi N/2) \xrightarrow{N \gg 1} N$$

Αυτό σημαίνει ότι η διάσταση του DFS τείνει στη διάσταση του συνολικού χώρου Χίλμπερτ, και η αποτελεσματικότητα της κωδικοποίησης τείνει στη μονάδα (δηλαδή στο



όριο  $N \rightarrow \infty$  μπορούμε να κωδικοποιήσουμε και τα  $2^N$  qubits με decoherence-free τρόπο).

Για παράδειγμα, για  $N = 4$  qubits, έχουμε:

$$\mathcal{G}_0 = \{|0011\rangle, |0101\rangle, |0110\rangle, |1001\rangle, |1010\rangle, |1100\rangle\}$$

Αυτό το σύνολο είναι ένας decoherence-free υπόχωρος μέγιστης διάστασης 6. Η διάσταση του συνολικού χώρου Χίλμπερτ είναι  $2^4 = 16$ , επομένως μπορούμε να κωδικοποιήσουμε μόνο μέχρι δύο λογικά qubits στο DFS αυτό (χρειαζόμαστε  $2^2 = 4$  οποιαδήποτε διανύσματα από αυτά τα 6, πχ.  $|0_L 0_L\rangle \equiv |0011\rangle$ ,  $|0_L 1_L\rangle \equiv |0101\rangle$ ,  $|1_L 0_L\rangle \equiv |0110\rangle$  και  $|1_L 1_L\rangle \equiv |1001\rangle$ , ενώ για τρία λογικά qubits χρειάζονται  $2^3 = 8$  καταστάσεις της υπολογιστικής βάσης, αριθμός που ξεπερνά τις διαθέσιμες 6). Επομένως, χρησιμοποιώντας τέσσερα φυσικά qubits, μπορούμε να εκτελέσουμε decoherence-free υπολογισμό που απαιτεί μέχρι δύο λογικά qubits.

Αντιθέτως, στην περίπτωση πλήρως ανεξάρτητης αποσυνοχής, δεν είναι δυνατόν να βρούμε DFS διάστασης μεγαλύτερης του ένα. Αυτό φαίνεται από το γεγονός ότι τώρα οι περιβαλλοντικοί τελεστές  $\hat{E}_i$  θα είναι, εν γένει, όλοι διαφορετικοί μεταξύ τους. Για την εύρεση του DFS θα πρέπει να λύσουμε το παρακάτω πρόβλημα ιδιοτιμών:

$$\left[ \hat{I}^{(1)} \otimes \dots \otimes \hat{I}^{(j-1)} \otimes \hat{\sigma}_z^{(j)} \otimes \hat{I}^{(j+1)} \otimes \dots \otimes \hat{I}^{(N)} \right] |s_i\rangle = \lambda^{(j)} |s_i\rangle, \quad \forall j \text{ και } i$$

Υπάρχει όμως μόνο μια κατάσταση που ικανοποιεί το σύστημα αυτό και είναι η θεμελιώδης κατάσταση  $|0 \dots 0\rangle$  της υπολογιστικής βάσης. Αλλά χρειαζόμαστε τουλάχιστον δύο καταστάσεις της υπολογιστικής βάσης για να κωδικοποιήσουμε ένα λογικό qubit. Επομένως στην περίπτωση της ανεξάρτητης αποσυνοχής, στο μοντέλο σπιν-μποζόνιο, δεν υπάρχουν decoherence-free υπόχωροι για κβαντικούς υπολογισμούς.

Βέβαια, στις ρεαλιστικές περιπτώσεις δεν έχουμε ούτε πλήρως συλλογική, ούτε καθαρά ανεξάρτητη αποσυνοχή. Ευτυχώς όμως, έχουμε τώρα δύο ισχυρές και συμπληρωματικές μεθόδους για την καταπολέμηση της αποσυνοχής στις δύο οριακές περιπτώσεις αυτές. Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την κωδικοποίηση στο DFS για την προστασία του qubit-συστήματος μας από τη συλλογική αποσυνοχή, και μπορούμε να διορθώσουμε τα single-qubit σφάλματα λόγω της ανεξάρτητης αποσυνοχής χρησιμοποιώντας κάποιον αλγόριθμο διόρθωσης σφαλμάτων.



## Συμπεράσματα

Η κβαντική αποσυνοχή είναι ένα καλά μελετημένο φαινόμενο για το οποίο έχουν αναπτυχθεί πάρα πολλά μοντέλα που καλύπτουν ένα τεράστιο εύρος φυσικών περιπτώσεων. Στην εργασία αυτή είδαμε μερικά από τα πιο απλά μοντέλα σε διάφορες προσεγγίσεις, ωστόσο υπάρχουν μοντέλα πολύ πολυπλοκότερα που η ακριβής αναλυτική επίλυση τους είναι αδύνατη και η προσφυγή στη χρήση των υπολογιστών για την αριθμητική αντιμετώπιση τους είναι απαραίτητη. Όμως ο σκοπός της εργασίας αυτής ήταν μια πρώτη εισαγωγή στην κβαντική αποσυνοχή και όχι η μελέτη των σημαντικότερων μοντέλων που υπάρχουν, καθώς κάτι τέτοιο θα απαιτούσε πολύ περισσότερο χρόνο και θα ταίριαζε περισσότερο σε μια διδακτορική διατριβή παρά σε μια μεταπτυχιακή εργασία.

Η αποσυνοχή είναι ένα πανταχού παρόν φαινόμενο στη φύση, καθώς όλα τα πραγματικά κβαντικά συστήματα είναι ανοιχτά. Είδαμε, για παράδειγμα, ότι η αποσυνοχή μπορεί να προκληθεί ακόμα και από την κοσμική ακτινοβολία υποβάθρου των  $3^{\circ}$  K, οπότε είναι πρακτικά αδύνατον να απομονώσουμε πλήρως ένα κβαντικό σύστημα για την αποφυγή της αποσυνοχής. Ωστόσο σε κάποιες περιπτώσεις είναι δυνατόν να αυξηθούν σημαντικά οι χρόνοι της αποσυνοχής κατά τους οποίους γίνεται να παρατηρήσουμε, και ίσως να εκμεταλλευτούμε, τις κβαντικές ιδιότητες. Όμως στον μακρόκοσμο αυτό είναι αδύνατον, καθώς οι χρόνοι αποσυνοχής εκεί είναι εξαιρετικά μικροί, κάτι που εξηγεί γιατί δεν παρατηρούμε φαινόμενα κβαντικής συμβολής σε μακροσκοπικές κλίμακες, δηλαδή γιατί ο κόσμος γύρω μας είναι κλασικός.

Παρόλο που η αποσυνοχή παίζει σημαντικό ρόλο στην επίλυση του προβλήματος της μέτρησης, δεν μπορούμε να πούμε ότι το λύνει πλήρως. Συγκεκριμένα, υπάρχει δυσκολία στην εξήγηση του κανόνα του Born για τις πιθανότητες των διαφόρων αποτελεσμάτων της μέτρησης, ή με άλλα λόγια, γιατί σε κάθε μέτρηση λαμβάνουμε ένα συγκεκριμένο αποτέλεσμα από το πλήθος των διαφόρων δυνατοτήτων. Όμως η επιτυχία της αποσυνοχής στην επίλυση του προβλήματος αυτού εξαρτάται και από την επιλογή της ερμηνείας της Κβαντομηχανικής.

Τέλος, είδαμε ότι η αποσυνοχή αποτελεί ένα τεράστιο εμπόδιο στις κβαντικές τεχνολογικές εφαρμογές. Αναγκαζόμαστε επομένως να ψάχνουμε διαφόρους τρόπους καταπολέμησης της αποσυνοχής, ελαχιστοποιώντας την όσο αυτό είναι δυνατόν και έπειτα διορθώνοντας τις επιπτώσεις της. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό στην προσπάθεια της δημιουργίας των κβαντικών υπολογιστών, στους οποίους τόσο ο χειρισμός των qubits όσο και η αλληλεπίδραση τους με το μη-ελεγχόμενο περιβάλλον οδηγούν στην αποσυνοχή και δημιουργία σφαλμάτων στους υπολογισμούς. Είδαμε ότι έχουν αναπτυχθεί πολλές τεχνικές που πετυχαίνουν τον σκοπό αυτό στους απλούς κβαντικούς υπολογιστές μερικών qubits, όμως είμαστε ακόμα μακριά από τη δημιουργία ενός πραγματικά χρήσιμου κβαντικού υπολογιστή χιλιάδων qubits, ακριβώς λόγω της δυσκολίας της αντιμετώπισης της αποσυνοχής σε τόσο μεγάλα και πολύπλοκα κβαντικά συστήματα.



# Βιβλιογραφία

- [1] Adler S.L. *Normalization of collisional decoherence: Squaring the delta function, and an independent cross-check*, Phys. A: Math. Gen. 39, 14067-14074 (2006)
- [2] Allori V. *Decoherence and the Classical Limit of Quantum Mechanics*, 2000
- [3] Breuer H., Petruccione F. *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press, 2002
- [4] Bub J. *Interpreting the Quantum World*, Cambridge University, 1997
- [5] Bub J., Elby A. *Triorthogonal uniqueness theorem and its relevance to the interpretation of quantum mechanics*, Phys. Rev. A, 1994, 49, 4213-4216
- [6] Caldeira A., Leggett A. *Quantum tunneling in a dissipative system*, Ann. Phys. (N.Y.) 149, 374-456 (1983)
- [7] Cucchietti F. M., Paz J. P., Zurek W. H. *Decoherence from Spin Environments*, quant-ph/0508184v1
- [8] Cucchietti F.M., Paz J.P., Zurek W. H. *Gaussian Decoherence and Gaussian Echo from Spin Environments*, quant-ph/0611200v3
- [9] Feynman R., Vernon F. L. *The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system*, Ann. Phys. (N.Y.) 24, 118-173 (1963)
- [10] Giulini D., Joos E. *Decoherence and the appearance of a classical world in quantum theory*, Springer, 1996
- [11] Hu B. L., Paz J. P., Zang Y. *Quantum Brownian motion in a general environment: Exact master equation with nonlocal dissipation and colored noise*, Phys. Rev. D 45, 2843-2861 (1992)
- [12] Jackson D. *Classical Electrodynamics Third Edition*, 1998
- [13] Jamiolkowski A. *Linear transformations which preserve trace and positive semidefiniteness of operators*, Rep. Math. Phys. 3, 275-278 (1972)
- [14] Joos E., Zeh H. D., et all. *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory, 2nd Edition*, Springer, New York, 2003
- [15] Joos E., Zeh H. D. *The emergence of classical properties through interaction with the environment*, Phys. B: Condens. Matter 59, 223-242 (1985)

- [16] Kitaev A. Y. *Quantum error correction with imperfect gates*, Quantum Communication, Computing and Measurement, Plenum Press, New York, 1997
- [17] Nielsen M. A., Chuang I. L. *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, 2000
- [18] Paz J. P., Habib S., Zurek W. H. *Reduction of the wave packet: Preferred observable and decoherence time scale*, Phys. Rev. D 47, 488-501 (1993)
- [19] Preskill J. *Reliable quantum computers*, Proc. R. Soc. Lond. A 454, 385-410 (1998)
- [20] Reina J. H., Quiroga L., Johnson N. F. *Decoherence of quantum registers*, Phys. Rev. A 65, 032326 (2002)
- [21] Schlosshauer M. *Decoherence, the measurement problem, and interpretations of quantum mechanics*, quant-ph/0312059v4
- [22] Schlosshauer M. *Decoherence and the Quantum-to-Classical Transition*, Springer, 2007
- [23] Schlosshauer M., Fine A. *Decoherence and the foundations of quantum mechanics*, Quantum Mechanics at the Crossroads, Springer, 2007
- [24] Τραχανάς Σ., *Κβαντομηχανική II*
- [25] Zeh H. D. *Decoherence: Theoretical, Experimental, and Conceptual Problems*, Ph.D. thesis, Physics Department, University of Genova, 2001
- [26] Zurek W. H. *Phys. Rev. D 26, 1862 (1982)*
- [27] Zurek W. H. *Environment-induced superselection rules*, Phys. Rev. D 26, 1862-1880 (1982)
- [28] Zurek W. H. *Preferred States, Predictability, Classicality and the Environment-Induced Decoherence*, Progress of Theoretical Physics, Vol. 89, No.2, February 1993
- [29] Zurek W. H. *Decoherence and the Transition from Quantum to Classical*, Los Alamos Science Number 27, 2002
- [30] Zurek W. H. *Pointer basis of a quantum apparatus: Into what mixture does the wavepacket collapse?*, Phys. Rev. D24, 1516-1525 (1981)
- [31] Zurek W. H. *Quantum Darwinism*, arXiv:0903.5082v1