УДК 530.145

НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ДИНАМИКИ И УПРАВЛЕНИЯ ОТКРЫТЫМИ КВАНТОВЫМИ СИСТЕМАМИ

А. Н. Печень

Математический институт им. В. А. Стеклова РАН,
119991, Москва, ул. Губкина, 8.

E-mail: apечен@gmail.com

В работе содержится краткий обзор некоторых вопросов неравновесной динамики и управления открытыми квантовыми системами, таких как динамика открытых квантовых систем в режимах слабой связи и малой плотности, некогерентное управление и универсальные отображения Крауса.

Ключевые слова: *открытые квантовые системы, квантовое управление, некогерентное управление.*

Введение. В настоящее время неравновесная динамика открытых квантовых систем является предметом активного изучения [1, 2]. Точная динамика, как правило, является сложной для практических вычислений. Однако существуют физически важные режимы, в которых точная динамика аппроксимируется решениями значительно более простых уравнений. Такими режимами являются режимы слабой связи и малой плотности.

Режим слабой связи описывает квантовую систему (атом, молекулу либо наночастицу), слабо взаимодействующую с окружением (резервуаром). Формально предел слабой связи определяется как предел, при котором константа взаимодействия стремится к нулю, $\lambda \rightarrow 0$, время стремится к бесконечности, $t \rightarrow +\infty$, притом согласованным образом, так, что $\lambda^2 t = \text{const} \neq 0$. Редуцированная (т. е. усреднённая по состоянию резервуара) динамика системы в пределе слабой связи описывается марковским мастер-уравнением [1], а динамика полной системы — квантовыми стохастическими дифференциальными уравнениями (КСДУ) [2]. Предел слабой связи, применённый к динамике полной системы, называется стохастическим пределом. В п. 2 настоящей работы обсуждаются обобщённые квантовые стохастические дифференциальные уравнения с операторами квантового мультипольного шума, описывающие поправки по λ к КСДУ в стохастическом пределе слабой связи [3, 4].

Режим малой плотности в теории открытых квантовых систем описывает квантовую частицу, взаимодействующую посредством столкновений с разреженным газом малой плотности n . Формально предел малой плотности определяется как предел при $n \rightarrow 0$, $t \rightarrow \infty$ так, что $nt = \text{const} \neq 0$. Марковские мастер-уравнения для редуцированной динамики были выведены с использованием иерархии уравнений Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона (ББГКИ) [5], ранее применённой в методе Боголюбова к выводу кинетических уравнений для классических и квантовых газов в режимах слабой

Александр Николаевич Печень (к.ф.-м.н.), научный сотрудник, отд. математической физики.

связи и малой плотности [6]. В п. 3 настоящей работы обсуждается полная динамика системы и окружения в пределе малой плотности, которая описывается КСДУ с квантовым процессом Пуассона [7, 8].

Тесно связанными с динамикой являются вопросы управления квантовыми системами [9–13]. Задачи управления открытыми квантовыми системами возникают в различных приложениях в физике и химии, таких как создание с использованием лазеров заданных атомных либо молекулярных состояний [10], лазерное охлаждение [12], управление химическими реакциями [14, 15], управление электроном в квантовой точке с окружением из ядерных спинов [16], лазерное управление ориентацией молекул [17], квантовые вычисления с использованием смешанных состояний и неунитарной динамики [18]. В п. 4 настоящей работы обсуждается использование мастер-уравнений, возникающих в пределах слабой связи и малой плотности, при изучении некогерентного управления открытыми квантовыми системами [19] и создании универсальных отображений Крауса [20].

1. Открытые квантовые системы. Гильбертово пространство и гамильтониан открытой квантовой системы, взаимодействующей с окружением, имеют вид $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ и $H = H_S \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes H_E + H_{\text{int}} = H_0 + H_{\text{int}}$, где $\mathcal{H}_S$ и $\mathcal{H}_E$ — гильбертовы пространства системы и окружения, H_S и H_E — свободные гамильтонианы системы и окружения, и H_{int} — гамильтониан взаимодействия системы с окружением. В данной работе начальное состояние системы и окружения предполагается имеющим вид $\sigma = \rho_0 \otimes \omega_E$, где ρ_0 и ω_E — начальные состояния системы и окружения. Полный гамильтониан H индуцирует унитарную эволюцию полной системы, которая в представлении взаимодействия определяется унитарным оператором эволюции $U(t) = e^{itH_0} e^{-itH}$. Редуцированная динамика системы определяется как $\rho(t) = \text{Tr}_E[U(t)\sigma U^\dagger(t)]$.

Если система не взаимодействует с окружением, то её эволюция является унитарной, $\rho(t) = V_t \rho_0 V_t^\dagger$, где унитарный оператор V_t удовлетворяет уравнению Шрёдингера $\dot{V}_t = -iH_S V_t$. Описание эволюции замкнутой системы посредством уравнения Шрёдингера называется *динамическим*, в то время как описание её динамики как унитарного отображения — *кинематическим*. Эволюция открытых квантовых систем $\rho(t) = \Phi_t(\rho_0)$ в кинематическом описании при отсутствии начальных корреляций с окружением определяется вполне положительными сохраняющими след отображениями Φ_t (отображениями Крауса) [21]. Динамическое описание открытых систем использует различные динамические мастер-уравнения для матрицы плотности [1]. Как правило, и редуцированная, и полная динамика открытой квантовой системы являются сложными для практических вычислений и не могут быть точно вычислены для реалистичных физических систем. Тем не менее существуют физически важные режимы, в которых как редуцированная, так и полная динамика приближённо описываются относительно простыми уравнениями. Два таких режима — режимы слабой связи и малой плотности обсуждаются в следующих пунктах.

2. Режим слабой связи. Режим слабой связи описывает открытые квантовые системы, слабо взаимодействующие с окружением. Типичным приме-

ром таких систем является атом, взаимодействующий с электромагнитным полем посредством гамильтониана взаимодействия вида $H_{\text{int}} = \lambda[Q \otimes a^+(f) + Q^\dagger \otimes a^-(f)]$, где λ — малая константа связи и $a^\pm(f)$ — операторы рождения и уничтожения ($f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ — форм-фактор, и $a^+(f) = \int f(\mathbf{k})a_{\mathbf{k}}^\dagger d\mathbf{k}$, где $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$ есть импульс фотона). Начальное состояние окружения предполагается гауссовым с двухточечной корреляционной функцией $\omega_E(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'}) = n_{\mathbf{k}}\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, где $n_{\mathbf{k}}$ есть плотность фотонов с импульсом $\mathbf{k}$.

Предел малой связи определяется как предел при $\lambda \rightarrow 0$ и $t \rightarrow +\infty$ такой, что $\lambda^2 t = \tau = \text{const}$. Редуцированная и полная динамика в пределе определяются как $\rho_0(\tau) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \rho(\tau/\lambda^2)$ и $U_0(\tau) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} U(\tau/\lambda^2)$, где последний предел понимается в смысле специальных корреляционных функций [2] (заметим, что оператор эволюции $U(\tau/\lambda^2)$ зависит от λ не только через перерастяжку времени, но и через наличие λ в гамильтониане). Редуцированная динамика удовлетворяет мастер-уравнению вида [1]

$$\frac{d\rho_0(\tau)}{d\tau} = -i[H_{\text{WCL}}, \rho_0(\tau)] + \mathcal{L}_{\text{WCL}}(\rho_0(\tau)), \quad (1)$$

где действие супероператора $\mathcal{L}_{\text{WCL}}$ имеет общий вид $\mathcal{L}_{\text{WCL}}(\rho) = \sum_i (2L_i \rho L_i^\dagger - L_i^\dagger L_i \rho - \rho L_i^\dagger L_i)$. Конкретная форма $\mathcal{L}_{\text{WCL}}$ определяется гамильтонианом H и состоянием окружения ω_E . Полная динамика системы и окружения удовлетворяет КСДУ с квантовым белым шумом [2], которое в простейшем случае имеет вид

$$\frac{dU_0(\tau)}{d\tau} = \sqrt{\gamma_0} Q b_0^+(\tau) U_0(\tau) - \sqrt{\gamma_0} Q^\dagger U_0(\tau) b_0(\tau) - \gamma_0 Q^\dagger Q U_0(\tau).$$

Здесь операторы рождения и уничтожения $b_0^\pm(\tau)$ — операторы квантового белого шума с коммутационными соотношениями

$$[b_0^-(\tau), b_0^+(\tau')] = \delta(\tau - \tau'). \quad (2)$$

Так как в физических приложениях константа связи λ может быть мала, но отлична от нуля, то $U_0(\tau)$ только приблизительно описывает точную динамику $U(t)$. Более точная аппроксимация требует анализа старших членов (поправок λ к пределу слабой связи) следующего разложения:

$$U(\tau/\lambda^2) \approx U_0(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n U_n(\tau).$$

Уравнения для старших членов данного разложения получены в [3]. В эти уравнения входят операторы квантового мультипольного шума, определённые как операторнозначные обобщённые функции $b_k^\pm(\tau)$ ($k = 1, 2, \dots$) с коммутационными соотношениями

$$[b_k(\tau), b_l^+(\tau')] = i^k \delta_{k,l} \frac{\partial^k \delta(\tau - \tau')}{\partial \tau^k}. \quad (3)$$

Особенностью данных соотношений является наличие производных дельта-функции. В результате операторы 2^k -польного квантового шума для нечётных k являются операторами в псевдогильбертовых пространствах, а именно в пространствах Фока с индефинитной метрикой [4]. Обобщённые КСДУ, описывающие поправки к стохастическому пределу, включают квантовый мультипольный шум. В частности, уравнение для первой поправки в простейшем случае имеет вид [3]

$$\begin{aligned} \frac{dU_1(\tau)}{d\tau} = & \sqrt{\gamma_0} Q b_0^+(\tau) U_1(\tau) - \sqrt{\gamma_0} Q^\dagger U_1(\tau) b_0(\tau) - \gamma_0 Q^\dagger Q U_1(\tau) + \\ & + \sqrt{\gamma_1} Q b_1^+(\tau) U_0(\tau) - \sqrt{\gamma_1} Q^\dagger U_0(\tau) b_1(\tau). \end{aligned}$$

Решением этого уравнения является

$$U_1(\tau) = U_0(\tau) \int_0^\tau d\tau' [Q_{\tau'} b_1^+(\tau') - Q_{\tau'}^\dagger b_1(\tau')],$$

где $Q_\tau = U_0^\dagger(\tau)(Q \otimes \mathbb{I})U_0(\tau)$.

3. Режим малой плотности. Режим малой плотности описывает системы, взаимодействующие с разреженным газом посредством столкновений. Типичный гамильтониан для этого режима имеет вид

$$H_{\text{int}} = Q \otimes a^+(f)a^-(g) + Q^\dagger \otimes a^+(g)a^-(f).$$

Взаимодействие может быть сильным. Начальное состояние газа ω_E предполагается гауссовым с двухточечной корреляционной функцией $\omega_E(a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'}^-) = \varepsilon n_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, где $\varepsilon \geq 0$ — малое число и $\varepsilon n_{\mathbf{k}}$ — плотность частиц газа с импульсом $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$. Предел малой плотности определяется как $\varepsilon \rightarrow +0$ и $t \rightarrow +\infty$ так, что $\varepsilon t = \tau = \text{const}$.

Мастер-уравнение для редуцированной матрицы плотности системы в пределе малой плотности имеет общий вид

$$\frac{d\rho_0(\tau)}{d\tau} = -i[H_{\text{LDL}}, \rho_0(\tau)] + \mathcal{L}_{\text{LDL}}(\rho_0(\tau)) \quad (4)$$

с супероператором $\mathcal{L}_{\text{LDL}}$ специального вида, зависящим от матрицы рассеяния S для столкновений системы с одной частицей газа [5].

ТЕОРЕМА [8]. *Полная динамика системы и окружения в пределе малой плотности удовлетворяет КСДУ*

$$dU_0(\tau) = dN_\tau(S - \mathbb{I})U_0(\tau),$$

где dN_τ — квантовый процесс Пуассона интенсивности $S - \mathbb{I}$.

4. Некогерентное управление. В данном пункте рассматриваются некоторые вопросы управления открытыми квантовыми системами. В динамическом описании эволюция управляемой открытой квантовой системы в режимах слабой связи и малой плотности определяется мастер-уравнениями вида (1) и (4), где $H_{\text{WCL,LDL}}^c$ и $\mathcal{L}_{\text{WCL,LDL}}^c$ зависят от управления c как от параметра. Существуют два типа управления. Когерентное управление, обозначаемое как $c = u(t)$, влияет на гамильтоновы аспекты динамики, т.е. определяет H_{WCL}^u и H_{LDL}^u , и стремится сохранить квантовую когерентность в системе. Примером когерентного управления является поле лазера. Некогерентное управление $c = n_{\mathbf{k}}$ влияет на негамильтоновы аспекты динамики, т.е. на $\mathcal{L}_{\text{WCL}}^{n_{\mathbf{k}}}$ и $\mathcal{L}_{\text{LDL}}^{n_{\mathbf{k}}}$, и, как правило, стремится разрушить квантовую когерентность [19]. Физическим примером некогерентного управления является некогерентное излучение, для которого $n_{\mathbf{k}}$ — плотность числа фотонов с импульсом $\mathbf{k}$. В кинематическом описании эволюция открытой квантовой системы под действием управления c определяется семейством отображений Крауса Φ_c^t , так что $\rho(t) = \Phi_c^t(\rho_0)$. Два широких класса задач управления квантовыми системами формулируются как задачи минимизации функционалов видов $J_1[c] = \text{Tr}[\rho(T)O]$ и $J_2[c] = \|\rho(T) - \rho_{\text{target}}\|$, где $T > 0$ — заданное время окончания управления и $\rho(T) = \Phi_c^T(\rho_0)$.

В работе [20] были построены отображения Крауса типа «все-в-одно» (т.н. универсальные отображения Крауса), переводящие все состояния системы (с любой матрицей плотности) в одно и то же конечное состояние. Универсальное отображение Крауса, переводящее все ρ_0 в одно и то же ρ_f , обозначим как Φ_{ρ_f} . Пусть c^* — оптимальное управление, минимизирующее $J_1[c]$ или $J_2[c]$, и пусть $\rho^* = \Phi_{c^*}^T(\rho_0)$. Если $\Phi_{c^*}^T = \Phi_{\rho^*}$ — универсальное отображение Крауса, то управление c^* будет оптимальным сразу для всех ρ_0 . Данное свойство определяет важность универсальных отображений Крауса. Открытым оставался вопрос генерации произвольных универсальных отображений Крауса в реальных физических системах. Для решения этой задачи применительно к квантовым системам, слабо взаимодействующим с некогерентным излучением (в пределе слабой связи), автором разработана методика, в которой используется специальная комбинация некогерентного управления $n_{\mathbf{k}}$, определяющего $\mathcal{L}_{\text{WCL}}^{n_{\mathbf{k}}}$, и когерентного управления $u(t)$, определяющего H_{WCL}^u . При широких предположениях на H_{WCL}^u и $\mathcal{L}_{\text{WCL}}^{n_{\mathbf{k}}}$ показано, что любое универсальное отображение Крауса может быть приближённо создано определённой комбинацией некогерентного $n_{\mathbf{k}}^*$ и когерентного $u^*(t)$ управлений. При этом построение универсального отображения Крауса Φ_{ρ_f} , где $\rho_f = \sum_i p_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$, происходит в два этапа. Сначала посредством некоторого некогерентного управления $n_{\mathbf{k}}^*$ произвольное ρ_0 переводится в матрицу плотности $\tilde{\rho}_f = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|$, где $|i\rangle$ — собственные векторы H_S . Затем с помощью определённого когерентного управления $u^*(t)$ реализуется унитарная динамика, переводящая $|i\rangle$ в $|\phi_i\rangle$ и, соответственно, $\tilde{\rho}_f$ в ρ_f . При этом произвольное начальное состояние ρ_0 переводится в заданное конечное состояние ρ_f .

Заключение. Таким образом, в работе рассмотрены некоторые вопросы неравновесной динамики и управления открытыми квантовыми системами.

В режиме слабой связи полная динамика системы и окружения описывается уравнениями с квантовым мультипольным шумом, в режиме малой плотности — квантовым стохастическим дифференциальным уравнением с квантовым процессом Пуассона. Рассмотрено некогерентное управление открытыми квантовыми системами и его применение к генерации универсальных отображений Крауса.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 11-01-00828-а) и гранта президента РФ (НШ-7675.2010.1).

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Breuer H.-P., Petruccione F.* The theory of open quantum systems. Oxford: Oxford University Press, 2002. 648 pp.; русск. пер.: *Бройер Х.-П., Петруччионе Ф.* Теория открытых квантовых систем. Ижевск: РХД, 2010. 824 с.
2. *Accardi L., Lu Y. G., Volovich I. V.* Quantum theory and its stochastic limit. Berlin: Springer-Verlag, 2002. 473 pp.
3. *Pechen A. N., Volovich I. V.* Quantum multipole noise and generalized quantum stochastic equations // *Infin. Dimens. Anal. Quantum Probab. Relat. Top.*, 2002. Vol. 5, no. 4. Pp. 441–464, arXiv: math-ph/0202046.
4. *Печень А. Н.* Об одном асимптотическом разложении в квантовой теории // *Матем. заметки*, 2004. Т. 75, №3. С. 459–461; англ. пер.: *Pechen' A. N.* On an asymptotic expansion in quantum theory // *Math. Notes*, 2004. Vol. 75, no. 3. Pp. 426–429.
5. *Dütmcke R.* The low density limit for an N -level system interacting with a free Bose or Fermi gas // *Comm. Math. Phys.*, 1985. Vol. 97, no. 3. Pp. 331–359.
6. *Боголюбов Н. Н.* Собрание научных трудов в двенадцати томах. Т. 5: Неравновесная статистическая механика, 1939–1980. М.: Наука, 2006. 804 с. [*Bogolyubov N. N.* Collection of scientific works in twelve volumes. Vol. 5: Nonequilibrium Statistical Mechanics. Moscow: Nauka, 2006. 804 pp.]
7. *Accardi L., Pechen A. N., Volovich I. V.* A stochastic golden rule and quantum Langevin equation for the low density limit // *Infin. Dimens. Anal. Quantum Probab. Relat. Top.*, 2003. Vol. 6, no. 3. Pp. 431–453, arXiv: math-ph/0206032.
8. *Pechen A. N.* Quantum stochastic equation for a test particle interacting with a dilute Bose gas // *J. Math. Phys.*, 2004. Vol. 45, no. 1. Pp. 400–417, arXiv: math-ph/0303020.
9. *Бутковский А. Г., Самойленко Ю. И.* Управление квантовомеханическими процессами. М.: Наука, 1984. 256 с. [*Butkovskiy A. G., Samoylenko Yu. I.* Control of quantum mechanical processes. Moscow: Nauka, 1984. 256 pp.]
10. *Rice S. A., Zhao M.* Optical control of molecular dynamics. New York: Wiley, 2000. 437 pp.
11. *Brumer P. W., Shapiro M.* Principles of the quantum control of molecular processes. Hoboken, NJ: Wiley-Interscience, 2003. 354 pp.
12. *Letokhov V. S.* Laser control of atoms and molecules. Oxford, New York: Oxford University Press, 2007. 310 pp.
13. *Brif C., Chakrabarti R., Rabitz H.* Control of quantum phenomena: past, present and future // *New Journal of Physics*, 2010. Vol. 12, no. 7, 075008. 69 pp., arXiv: 0912.5121 [quant-ph].
14. *Tannor D J., Rice S. A.* Control of selectivity of chemical reaction via control of wave packet evolution // *J. Chem. Phys.*, 1985. Vol. 83, no. 10, 5013. 6 pp.
15. *Dantus M., Lozovoy V. V.* Experimental coherent laser control of physicochemical processes // *Chem. Rev.*, 2004. Vol. 104, no. 4. Pp. 1813–1860.
16. *Ruskov R., Korotkov A. N.* Quantum feedback control of a solid-state qubit // *Phys. Rev. B*, 2002. Vol. 66, no. 4, 041401(R). 4 pp., arXiv: cond-mat/0204516 [cond-mat.mes-hall].
17. *Zhdanov D. V., Zadkov V. N.* Laser-assisted control of molecular orientation at high temperatures // *Phys. Rev. A*, 2008. Vol. 77, no. 1, 011401(R). 4 pp.

18. *Tarasov V. E.* Quantum computer with mixed states and four-valued logic // *J. Phys. A*, 2002. Vol. 35, no. 25. Pp. 5207–5235, arXiv: quant-ph/0312131.
19. *Pechen A., Rabitz H.* Teaching the environment to control quantum systems // *Phys. Rev. A*, 2006. Vol. 73, no. 6, 062102. 6 pp., arXiv: quant-ph/0609097.
20. *Wu R., Pechen A., Brif C., Rabitz H.* Controllability of open quantum systems with Kraus-map dynamics // *J. Phys. A*, 2007. Vol. 40, no. 21. Pp. 5681–5693, arXiv: quant-ph/0611215.
21. *Kraus K.* States, effects, and operations / Lecture Notes in Physics. Vol. 190. Berlin: Springer-Verlag, 1983. 151 pp.

Поступила в редакцию 21/XII/2010;
в окончательном варианте — 13/IV/2011.

MSC: 81Q05, 81Q93

SOME TOPICS IN DYNAMICS AND CONTROL OF OPEN QUANTUM SYSTEMS

A. N. Pechen

Steklov Mathematical Institute, Russian Academy of Sciences,
8, Gubkina st., Moscow, 119991, Russia.

E-mail: apechen@gmail.com

This work reviews several topics in the non-equilibrium dynamics and control of open quantum systems, including the dynamics in the weak coupling and low density regimes, incoherent control and universal Kraus maps.

Key words: *open quantum systems, quantum control, incoherent control.*

Original article submitted 21/XII/2010;
revision submitted 13/IV/2011.

Alexander N. Pechen (Ph.D. (Phys. & Math.)), Research Fellow, Dept. of Mathematical Physics.