退相干所致preferred states (PS)：超越弱耦合极限

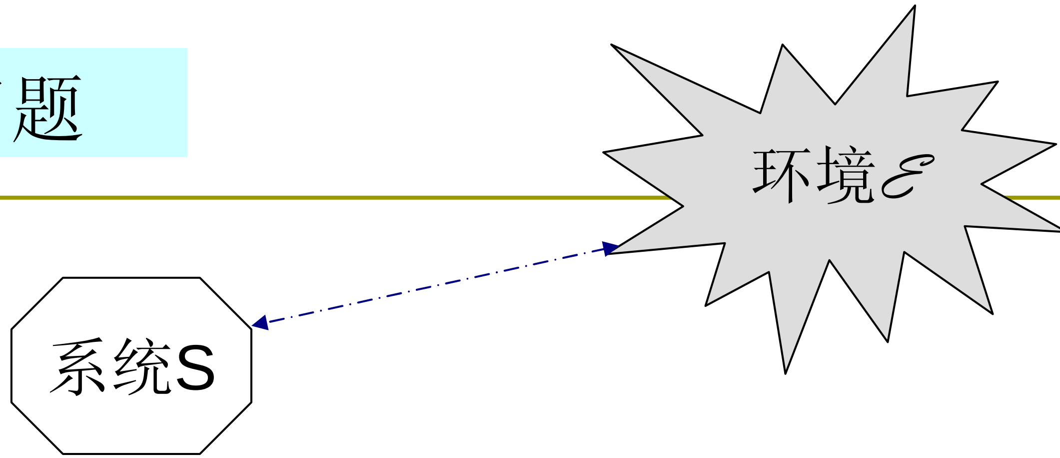
王文阁

中国科技大学，近代物理系

Outline

- I.退相干现象简介.
- II.Preferred state (PS) 概念简介.
- III.弱耦合情况下的PS.
- IV.中间耦合强度下的PS.

动机与问题



问题：

环境对系统量子态的影响：

有些态之间的量子相干性很容易破坏，

而有些态之间的相干性容易保持？

如：
为何不易观察到原子不同能量本征态的叠加态？

I. Decoherence

退相干（decoherence)的基本含义

概念所指及使用范围：

（1）在量子力学范围内，为解释测量结果的确定性，用来指称量子相干性的（永远）消失。

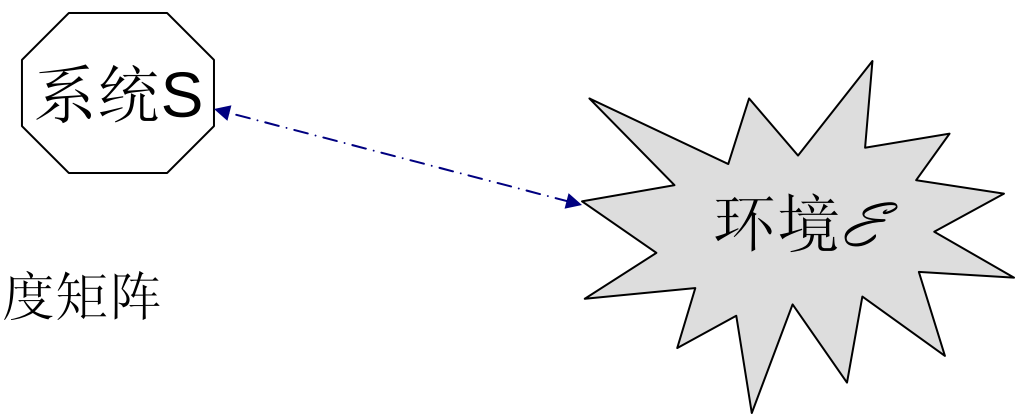
（2）约化密度矩阵的非对角元的消失，表示在相应基矢上相干性的丧失。— 现在大多数情况下的含义。

（3）某些领域中有特殊用法。

约化密度矩阵

大系统密度矩阵： $\rho = \Sigma_i C_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|$ —— 混合态

可观测量A的平均值 = Tr(ρ A)，其中，Tr为求迹，即对角元的和。



小系统S的约化密度矩阵

$$\langle\alpha|\rho^{re}(t)|\beta\rangle = \langle\alpha|\mathrm{Tr}_{\mathcal{E}}\rho(t)|\beta\rangle$$

S的可观测量B的平均值 = $\mathrm{Tr}(\rho^{re} B) = \Sigma_{mn} (\rho^{re})_{mn} B_{nm}$

$$
\begin{aligned}
|\Psi'\rangle = \alpha|1:+;2:+;\ldots.;N:+\rangle \otimes |\mathbf{k}_+\rangle \\
+\beta|1:-;2:-;\ldots N:-\rangle \otimes |\mathbf{k}_-\rangle.
\end{aligned}
$$

此态在|+;…+>,|-;…->基矢上的约化密度矩阵为

$$
\begin{pmatrix}
|\alpha|^2 & \alpha\beta^*\langle \mathbf{k}_-|\mathbf{k}_+\rangle \\
\alpha^*\beta\langle \mathbf{k}_+|\mathbf{k}_-\rangle & |\beta|^2
\end{pmatrix}
$$

退相干的简单图像

系统(S)在与环境($\mathcal{E}$)的互作用下的某种行为。

t=0时的初态　$|\psi_0\rangle = (c\,|s_1\rangle + d\,|s_2\rangle)|a_0\rangle$。

在$t>\tau_d$后，薛定谔演化给出

$$|\psi(t)\rangle = c|s_1\rangle|a_1\rangle + d|s_2\rangle|a_2\rangle。$$

如果$\langle a_1|a_2\rangle \approx 0$，则系统的约化密度矩阵，有一个类似混合态的形式

$$\rho^{re}(t) \approx |c|^2|s_1\rangle\langle s_1| + |d|^2|s_2\rangle\langle s_2|。$$

这样，在t> τ $_d$后，在初态(c $|s_1>$ + d $|s_2>$)中存在的、$|s_1>$ 与 $|s_2>$之间的相干性基本消失——退相干。

另一方面，若初态为$|s_1>$ $|a_0>$，则在 τ $_d$之后的一段时间内，其演化态近似为 $|s_1>|a_1>$ ——无退相干现象。

状态$|S_i>$具有特殊的稳定性。

对于退相干现象的研究，揭示以下内容：

在与环境的（某类）产生纠缠的相互作用之下，有些系统的某些状态的内在相干性，具有特殊的稳定性——远比大多数其他状态稳定。

这类状态被称为preferred (pointer) states (basis)（名称pointer state来自Zurek对于测量问题的研究。Zeh称之为memory state）

退相干问题的研究：

两个方面：

（1） PS问题：退相干在在那个基矢上发生？

（2）退相干在什么时间尺度上发生？

退相干与量子力学诠释的关系

1。Many-worlds interpretation:

退相干可能为波函数的分叉态提供解释（Preferred states），以及解释分叉可能发生的时间。

2。Consistent-histories interpretation:

Preferred states 可能对应于与事件有关的投影算子，从而排除许多非经典的“历史”。

退相干机制的直观图像

大系统的态总可以写为：$|\psi(t)\rangle = c_1|s_1\rangle|a_1\rangle + c_2|s_2\rangle|a_2\rangle + \ldots\ldots$。

其中，$|s_i\rangle$为系统S的正交基矢。

退相干意味：$|a_i\rangle$之间近乎正交。

一个有趣的现象：

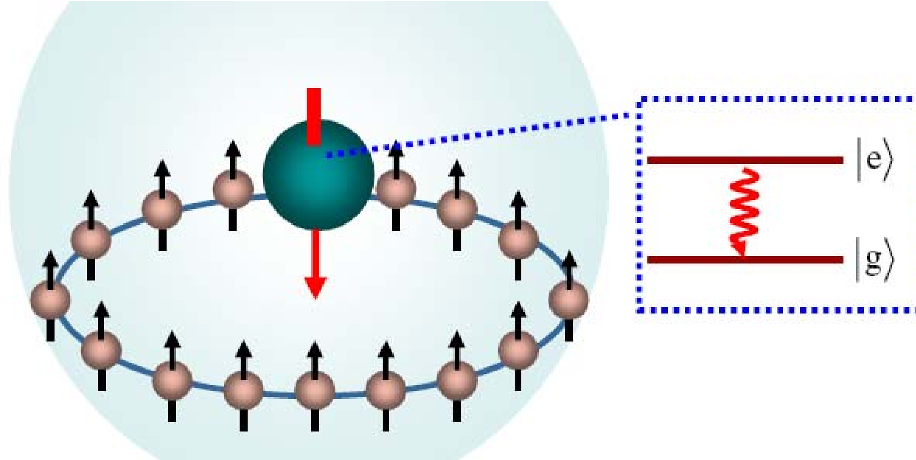
在一个N维希尔伯特空间中随意挑选两个归一化矢量，他们的内积模的平方大概为多少？

答案：1/N

在N趋于无穷大时，趋于0.

意味着什么？

一个例子



a system $\mathcal{S}$ with two spin states $\{|\Uparrow\rangle, |\Downarrow\rangle\}$ that interacts with an environment $\mathcal{E}$ described by a collection of N other two-state spins represented by $\{|\uparrow_k\rangle, |\downarrow_k\rangle\}$, $k = 1 \cdots N$. The self-Hamiltonians $\hat{H}_{\mathcal{S}}$ and $\hat{H}_{\mathcal{E}}$ and the self-interaction Hamiltonian $\hat{H}_{\mathcal{E}\mathcal{E}}$ of the environment are taken to be equal to zero. Only the interaction Hamiltonian $\hat{H}_{\mathcal{S}\mathcal{E}}$ that describes the coupling of the spin of the system to the spins of the environment is assumed to be nonzero and of the form

$$\hat{H}_{\mathcal{S}\mathcal{E}} = (|\Uparrow\rangle\langle\Uparrow| - |\Downarrow\rangle\langle\Downarrow|) \otimes \sum_k g_k (|\uparrow_k\rangle\langle\uparrow_k| - |\downarrow_k\rangle\langle\downarrow_k|) \bigotimes_{k' \neq k} \hat{I}_{k'}$$

$$|\psi(0)\rangle = (a|\Uparrow\rangle + b|\Downarrow\rangle)\bigotimes_{k=1}^{N}(\alpha_k|\uparrow_k\rangle + \beta_k|\downarrow_k\rangle),$$

$$|\psi(t)\rangle = a|\Uparrow\rangle|E_\Uparrow(t)\rangle + b|\Downarrow\rangle|E_\Downarrow(t)\rangle,$$

$$|E_\Uparrow(t)\rangle = |E_\Downarrow(-t)\rangle = \bigotimes_{k=1}^{N}(\alpha_k e^{ig_k t}|\uparrow_k\rangle + \beta_k e^{-ig_k t}|\downarrow_k\rangle).$$

$$\rho_{\mathcal{S}}(t) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{E}}(|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|)$$

$$\rho_{\mathcal{S}}(t) = |a|^2|\Uparrow\rangle\langle\Uparrow| + |b|^2|\Downarrow\rangle\langle\Downarrow| + z(t)ab^*|\Uparrow\rangle\langle\Downarrow| + z^*(t)a^*b|\Downarrow\rangle\langle\Uparrow|,$$

$$z(t) = \langle E_\Uparrow(t)|E_\Downarrow(t)\rangle = \prod_{k=1}^{N}(|\alpha_k|^2 e^{ig_k t} + |\beta_k|^2 e^{-ig_k t}),$$

$$|z(t)|^2 = \prod_{k=1}^{N}\{1 + [(|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2)^2 - 1]\sin^2 2g_k t\}.$$

$$\langle |z(t)|^2 \rangle_{t\to\infty} \simeq 2^{-N} \prod_{k=1}^{N} [1 + (|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2)^2] \xrightarrow{N\to\infty} 0,$$

$(|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2)^2$　一般都小于1。

从而，退相干发生。

II.PS问题基本研究对象：系统的约化密度矩阵

具体问题：其演化，是否趋于在固定基矢上对角化

意义：

（1）退相干发生，preferred (pointer) states (PS)出现。

……

（2）统计系统趋于平衡态（热化，thermalization）的条件之一。

……

（3）各类具体应用（量子调控等等）。

PS概念的由来

对测量问题的研究：在与环境的相互作用之下，有些系统的某些状态具有特殊的稳定性——远比大多数其他状态稳定(Zeh) （Zurek称之为preferred pointer states）。

前述例子：

t=0时的初态　$|\psi_0\rangle = (c\,|s_1\rangle + d\,|s_2\rangle)|a_0\rangle$。

在$t>\tau_d$后，薛定谔演化给出

$$|\psi(t)\rangle = c|s_1\rangle|a_1\rangle + d|s_2\rangle|a_2\rangle。$$

如果$\langle a_1|a_2\rangle \approx 0$，则系统的约化密度矩阵，有一个类似混合态的形式

$$\rho^{re}(t) \approx |c|^2|s_1\rangle\langle s_1| + |d|^2|s_2\rangle\langle s_2|。$$

这样，在$t>\tau_d$后，在初态$(c|s_1>+d|s_2>)$中存在的、$|s_1>$与$|s_2>$之间的相干性基本消失——发生退相干。

另一方面，若初态为$|s_1>|a_0>$，则在τ_d之后的一段时间内，其演化态近似为$|s_1>|a_1>$——无退相干现象。

状态$|S_i>$具有特殊的稳定性。

引入Preferred states概念的原因

引入此概念的原因

1.薛定谔演化不足以解决测量问题，因此，为在其框架下解释宏观世界的确定性性质，需要引入此类概念。

2. 某些开放系统，具有拥有特殊稳定性的态，需要一个概念以描述之。

从需要1出发，人们时常要借助于对测量过程的直观理解、可预言性(predictability)、经典性(classicality)等在经典理论中建立的概念。这些概念尽管在物理讨论中时常用到，但是在量子力学里并没有清楚的定义。

注意：引入preferred state概念的目的之一，即为理清这一形势。

需要2：更侧重数学性质，逻辑上更清楚。

然而，在实际操作中，经常遇到数学上的困难。

两种需求并不完全一致，为该概念带来一定模糊性。

——我们的重心在第二点上。

PS有众多定义（列举几个）

(1) 最小deseparation rate. Zeh (1973)，called memory states.

Deseparation rate measures how fast a quantum system becomes entangled with environment degrees of freedom.

（2）Zurek(1981): Using P_A to represent the associated projection operator for PS, it should satisfy $[H_I, P_A]=0$, when the interaction is strong such that the self-Hamiltonian can be neglected. More generally, one may require $[H_A+H_I, P_A]=0$, if H_A and H_I are commutable.

相应约化密度矩阵的退相干性质，直到2001 年才得到比较一般的证明 (Braun, Haake, Strunz，PRL 86, 2913 (2001) ）。

（3） Zurek（1993）：从可预测性角度，利用系统的最小von Neumann熵（或纯度）来定义pointer state，称 predictability sieve 方法。

(4)约化密度矩阵在PS上的非对角元衰减，趋于很小的量。 （及其在过完备基上的推广）（参见 Diosi and Kiefer, PRL,**85**,3552(2000)）

在已求解过的模型中（主要为toy models），对于理想PS情形，几种定义给出一致的结果。

但是，对于一般情况，未必得到一致结果。

我们的采取：第四个定义

原因：

（1）数学上更明晰。

（2）应用于小量子系统时，物理意义明确，适用范围广。（退相干的已解模型，都针对小量子系统。）

（3）与统计物理基础的研究相通。

PS性质对互作用强度的依赖

$H_{总}=H_S + H_{\mathcal{E}} + H_I$ (S—系统，$\mathcal{E}$——环境）

（1）互作用极强，H_S可以忽略，系统的动力学由H_I所主导，H_I的本征态为PS。

（2） 互作用极弱，系统的演化由H_S所主导。分立能级系统，能量本征态为PS。（量子布朗运动，采取推广的定义，相干态为PS。）

（3）中间情况， H_S和H_I两者都重要，较复杂，了解很少。

弱耦合极限

为何氢原子不同能级的
叠加态很难观察到？
(Zeh等人曾给出分析)

Paz and Zurek PRL **82**,5181(1999)的工作:

绝热环境中的分立能级系统，能量本征态是PS.

研究方法：

（1）推导该系统在能量基上的约化密度矩阵所满足的主方程。

$$\dot{\rho}_{nm} = -i\omega_{nm}\rho_{nm} - \gamma_{nm}^2 t\rho_{nm} - t\sum_{k,j} A_{kjnm}\rho_{kj}$$

（2）解主方程，证明约化密度矩阵非对角元为高斯衰减。

$$\rho_{nm}(t) \approx \rho_{nm}(0)\exp(-i\omega_{nm}t)\exp(-t^2\gamma_{nm}^2).$$

遗留的问题：如何处理非绝热环境？

—— 跃迁几率不可忽略。

难点：如何在统一的框架下，处理两个时间尺度的影响（退相干时间与弛豫时间）。

主方程方法有较大难度。

退相干的环境保真度研究方案

T.Gorin, T.Prosen, T.H.Seligman, and W.T.Strunz, Phys. Rev. A 70, 042105 (2004)
H.T.Quan, Z.Song, X.F.Liu, P.Zanardi, and C.P.Sun, Phys. Rev. Lett. 96, 140604 (2006)

考虑一个大系统：

$$H = H_S + \epsilon H_I + H_{\mathcal{E}},$$

其演化遵循薛定谔方程， $|\Psi_{S\mathcal{E}}(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\Psi_{S\mathcal{E}}(0)\rangle$

初态设为 $|\Psi_{S\mathcal{E}}(0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle|\phi_{\mathcal{E}}(0)\rangle.$

考虑弱耦合情况，设系统初态为能量本征态 | α >,

$$|\Psi_{S\mathcal{E}}(t)\rangle = e^{-iE_\alpha t/\hbar}|\alpha\rangle|\phi_\alpha^{\mathcal{E}}(t)\rangle + \epsilon|\chi_{\overline{\alpha}}\rangle,$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\phi_\alpha^{\mathcal{E}}(t)\rangle = H_{\mathcal{E}\alpha}^{eff}|\phi_\alpha^{\mathcal{E}}(t)\rangle + \epsilon^2 e^{iE_\alpha t/\hbar}\langle\alpha|H_I|\chi_{\overline{\alpha}}\rangle,$$

$$\text{where } H_{\mathcal{E}\alpha}^{eff} \equiv \epsilon H_{I\alpha} + H_{\mathcal{E}},$$

$$H_{I\alpha} \equiv \langle\alpha|H_I|\alpha\rangle$$

对于t<<τ_E（τ_E为驰豫时间），系统状态的跃迁可以被忽略。

当初态为能量本征态的叠加时，

$$|\widetilde{\psi}_0^S\rangle = \sum_\alpha C_\alpha|\alpha\rangle$$

$$\rho_{\alpha\beta}^{re} \simeq e^{-i(E_\alpha - E_\beta)t/\hbar} C_\alpha C_\beta^* f_{\beta\alpha}(t),$$

$$\begin{aligned} f_{\beta\alpha}(t) &\equiv \langle\phi_\beta^{\mathcal{E}}(t)|\phi_\alpha^{\mathcal{E}}(t)\rangle \\ &\approx \langle\widetilde{\phi}_0^{\mathcal{E}}|e^{it\left(H_{\mathcal{E}\alpha}^{eff} + \epsilon V\right)/\hbar} e^{-itH_{\mathcal{E}\alpha}^{eff}/\hbar}|\widetilde{\phi}_0^{\mathcal{E}}\rangle, \end{aligned}$$

$$V \equiv H_{I\beta} - H_{I\alpha} = \langle\beta|H_I|\beta\rangle - \langle\alpha|H_I|\alpha\rangle.$$

For energy-preserving interaction H_I, the relations are rigorous.

T.Gorin, T.Prosen, T.H.Seligman, and W.T.Strunz, Phys. Rev. A 70, 042105 (2004)

WGW, J.Gong, G.Casati, and B.Li, PRA **77**, 012108 (2008)

问题的关键：驰豫时间τ_E与退相干时间τ_d的关系

当$\tau_E \gg \tau_d$时，能量本征态才能为preferred states。

迟豫时间τ_E可以由费米黄金律来估计。

退相干时间τ_d被定义为$\rho_{\alpha\beta}^{re}$衰减到1/e的时间，可以由系统的退相干与环境的保真度的关系来估计。

考虑具有混沌运动、由无规矩阵理论来描述的环境。

对于由无规矩阵理论来描述的环境,

$$\tau_d \simeq \sqrt{2}\hbar/(\epsilon\sigma_v) \propto \epsilon^{-1}, \qquad \epsilon < \epsilon_p$$

$$\tau_d \simeq \hbar\Delta/[\pi\epsilon^2\overline{V_{nd}^2}] \propto \epsilon^{-2}, \qquad \epsilon > \epsilon_p.$$

$$\tau_E \simeq 1/R \propto \epsilon^{-2}, \qquad \text{where } R = 2\pi\epsilon^2\rho\langle H_{I,nd}^2\rangle/\hbar$$

其中, ε_p 是对环境保真度而言的微扰边界。

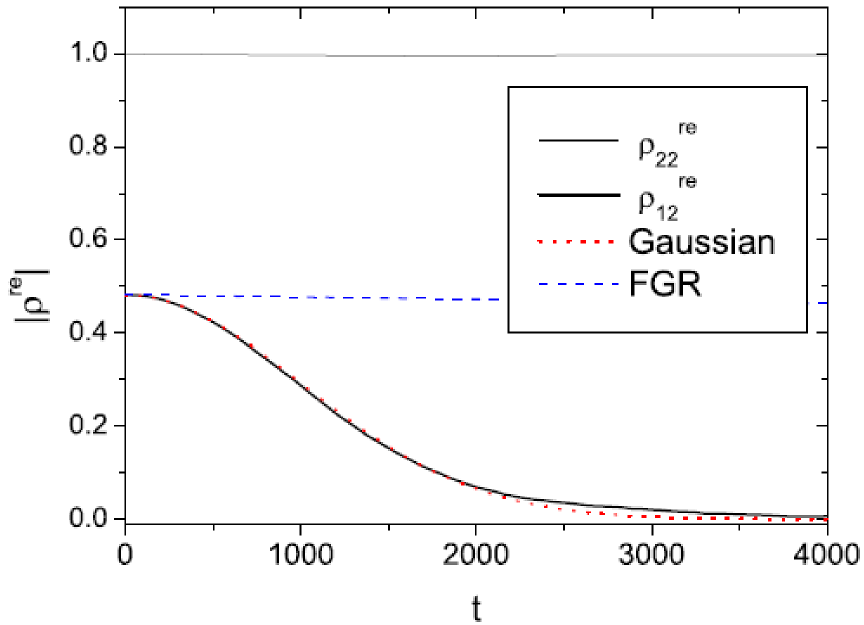
$$2\pi\epsilon_p\overline{V_{nd}^2} \sim \sigma_v\Delta$$

结论:对于有限的 ε_p,在弱耦合极限下,能量本征态为preferred states。

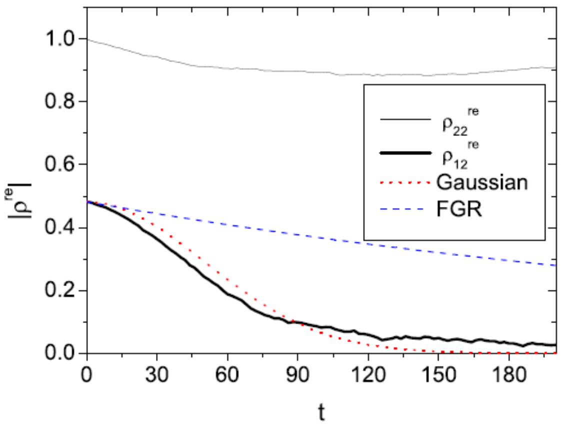
对于可以视为0的 ε_p,能量本征态未必为preferred states,需具体情况具体分析 。

对于两能级系统加复杂环境的模型

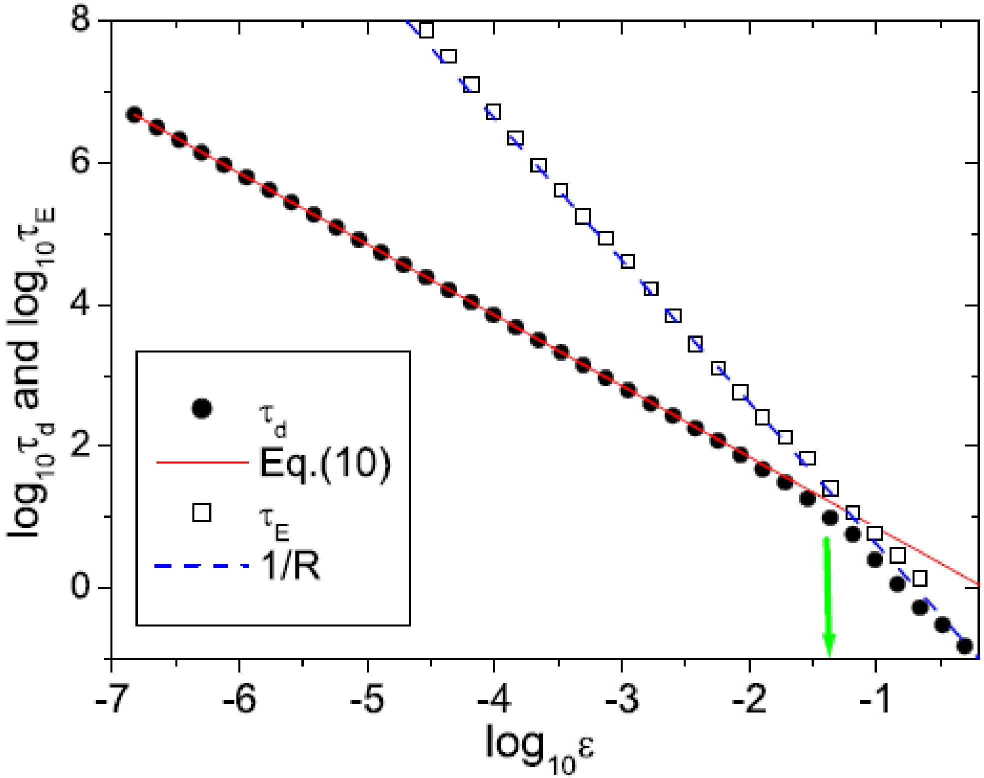
$\epsilon_p \sim 0.04$



$\epsilon = 5 \times 10^{-4}$



$\epsilon = 0.01$



8
6
4
2
0
-7
-6
-5
-4
-3
-2
-1
log10τd and log10τE
log10ε
τd
Eq.(10)
τE
1/R

非弱耦合强度下的PS

现有的知识非常少，主方程处理未必有效。

Preferred state 的操作性定义：

若约化密度矩阵的本征态，在长时间情况下，绕某固定基矢做小涨落运动，则称该基矢为preferred basis.

意义：体现了约化密度矩阵的（近似对角）性质。

WGW, L.He, and J.Gong, Phys.Rev.Lett. 108, 070403 (2012)

$$\rho^s(t)|\rho_k(t)\rangle = \rho_k(t)|\rho_k(t)\rangle,$$

小涨落的定量度量：

$$|\langle\rho_k|\eta_{k'}\rangle|^2 \geq 1/2$$

$$d(|\rho_k\rangle, |\eta_{k'}\rangle) = 1 - [1/(t_b - t_a)] \int_{t_a}^{t_b} dt' |\langle\rho_k(t')|\eta_{k'}\rangle|^2$$

数值求解方法：求

$$|\rho_k(t)\rangle\langle\rho_k(t)|$$

的平均算符的本征解。

解析分析，S为二能级系统

$$|\Psi(t)\rangle = |\alpha\rangle|\phi_\alpha(t)\rangle + |\overline{\alpha}\rangle|\phi_{\overline{\alpha}}(t)\rangle$$

|α>为S的基矢

$$\rho^s_{\alpha\overline{\alpha}} \equiv \langle\alpha|\rho^s|\overline{\alpha}\rangle = \langle\phi_{\overline{\alpha}}(t)|\phi_\alpha(t)\rangle$$

$$i\frac{d}{dt}|\phi_\alpha\rangle = H_{\alpha\alpha}|\phi_\alpha\rangle + i|\xi_\alpha\rangle, \qquad |\xi_\alpha\rangle \equiv -iH_{\alpha\beta}|\phi_\beta\rangle$$

$$i\frac{d}{dt}|\xi_\alpha\rangle = K_\alpha|\xi_\alpha\rangle - iJ_\alpha|\phi_\alpha\rangle,$$

where $H_{\alpha\alpha} = H_{\mathcal{E}} + H^I_{\alpha\alpha} + H^S_{\alpha\alpha}$, $K_\alpha = H_{\alpha\overline{\alpha}}H_{\overline{\alpha}\overline{\alpha}}H^{-1}_{\alpha\overline{\alpha}}$, $J_\alpha = H_{\alpha\overline{\alpha}}H_{\overline{\alpha}\alpha}$, with $H_{\alpha\overline{\alpha}} = H^S_{\alpha\overline{\alpha}} + H^I_{\alpha\overline{\alpha}}$, $H^S_{\alpha\overline{\alpha}} = \langle\alpha|H_S|\overline{\alpha}\rangle$, $H^I_{\alpha\overline{\alpha}} = \langle\alpha|H_I|\overline{\alpha}\rangle$ and the alike. Analogous equations for $|\phi_{\overline{\alpha}}\rangle$ are obtained by exchanging α and $\overline{\alpha}$.

$|\phi_\alpha\rangle$与 $|\phi_{\overline{\alpha}}(t)\rangle$的“距离”在一定程度上由下面三个差量决定

$$\begin{aligned}\Delta H &\equiv H_{\alpha\alpha} - H_{\overline{\alpha\alpha}},\\ \Delta K &\equiv K_\alpha - K_{\overline{\alpha}},\\ \Delta J &\equiv J_\alpha - J_{\overline{\alpha}}.\end{aligned}$$

原则上，使该三个差量产生最大效果的基矢，可能为PS.

实际操作问题：如何确定最大联合效果？

特殊情况（如下面的模型）

$$\Delta K \simeq -\Delta H \qquad \Delta J = 0$$

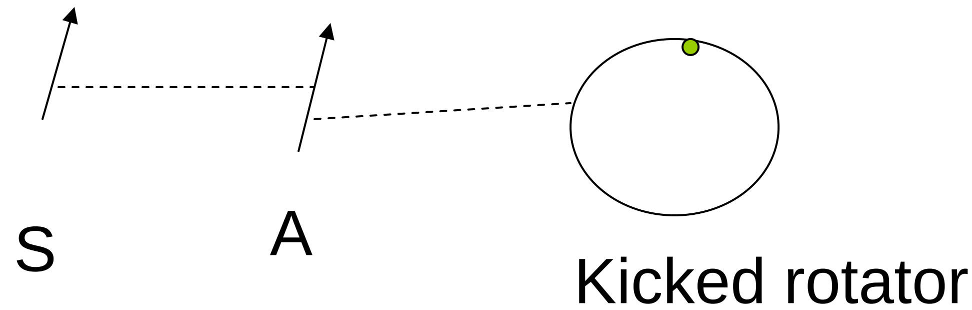
利用 $\|\Delta H\|$ 可以近似预言preferred states.

$\|\ldots\|$ indicates a Frobenius-2 norm

模型：双自旋加受击转子

目标系统：S.

环境：A+KR



$$H_S = \omega_x \sigma_x^S + \omega_z \sigma_z^S, \; H_I = \varepsilon \sigma_z^S \otimes \sigma_z^A,$$

$$H_A = \omega_A \sigma_x^A,$$

$$H_B = \frac{p^2}{2} + k \cos\theta \sum_j \delta(t - jT)$$

$$H_{AB} = \lambda \sigma_z^A \cos\theta \sum_j \delta(t - jT).$$

$$\hat{U}_T = e^{-iT(\omega_x \hat{\sigma}_x^S + \omega_z \hat{\sigma}_z^S + \omega_A \hat{\sigma}_x^A + \varepsilon \hat{\sigma}_z^S \otimes \hat{\sigma}_z^A)}$$

$$\times e^{-iT\frac{\hat{p}^2}{2}} e^{-ik\cos\hat{\theta}} e^{-i\lambda\hat{\sigma}_z^A \cos\hat{\theta}}.$$

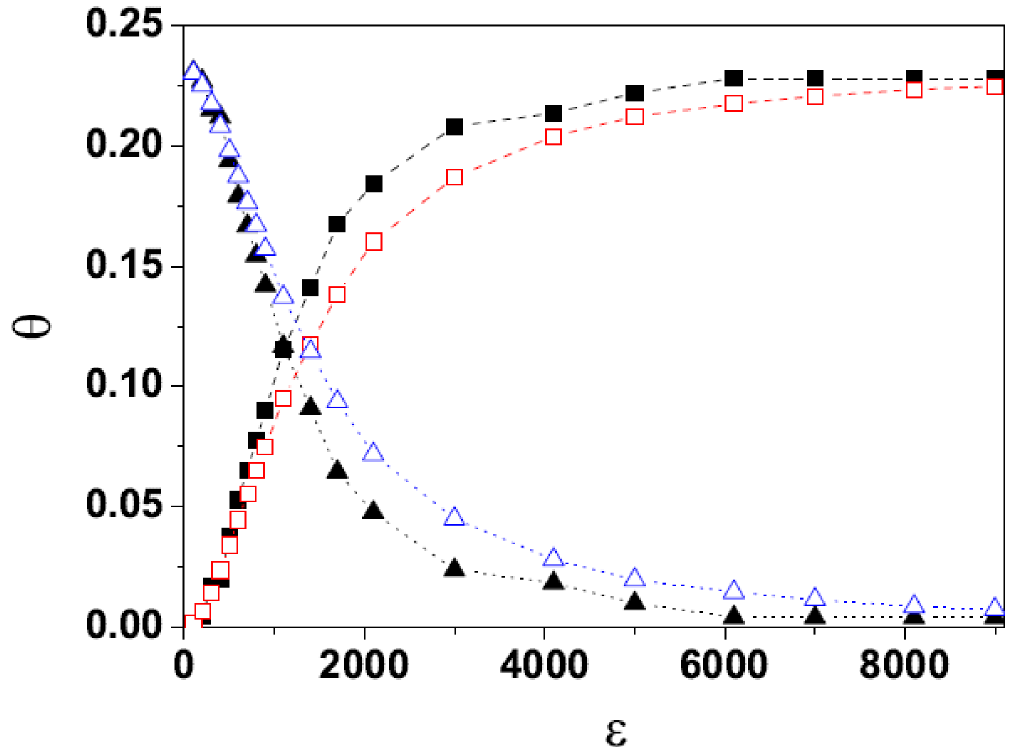


FIG. 1: (Color online) Angle θ (in unit of Radiant) to be rotated to reach state $|\widetilde{\rho}_1\rangle$ (empty symbols) from one eigenstate of H_S (squares) or of H_I (triangle), for a wide range of ε. State $|\widetilde{\rho}_1\rangle$ is one numerically found eigenstate of $\bar{\rho}$ (a time-averaged RDM for $t \in [30000T, 40000T]$). For comparison, the θ values to reach the state $|\alpha\rangle$ (filled symbols) directly determined by maximizing $||\Delta H||$ are also presented. Other system parameters are given by $\omega_x = 0.5 \times 10^3$, $\omega_z = 1.0 \times 10^3$, $\omega_A = 1.5 \times 10^3$, $k = 90/T, N = 2^{12}$, $\lambda = 0.1$.

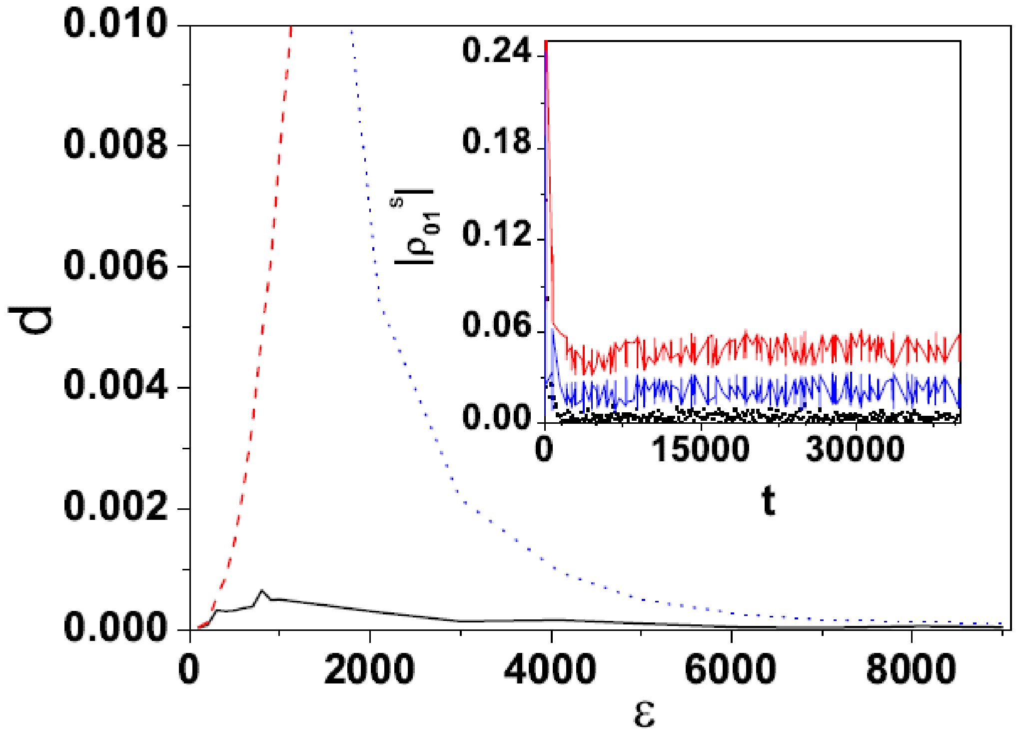


FIG. 2: (Color online) Behavior of time-evolving eigenstates of the system's RDM, as measured by a time-averaged distance d from eigenstates of H_S (dashed red line), from eigenstates of H_I (dotted blue line), and from states $(|\widetilde{\rho}_0\rangle, |\widetilde{\rho}_1\rangle)$ found computationally in Fig. 1 (solid line), for a wide range of ε. System parameters are the same as in Fig. 1. Insets: Decay of the off-diagonal element of RDM with time t, in the $|E_k\rangle$ representation (upper red curve), in the eigen-representation of H_I (middle blue curve), and in the representation of the PS identified in Fig. 1 (bottom dotted curve), for $\varepsilon = 2100$.

谢谢!