

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Jiří Blažek

Dekoherence ve dvouhladinovém systému

Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr.

Studijní program: Fyzika, Obecná fyzika

2009

Na tomto místě bych chtěl poděkovat svému vedoucímu, Doc. RNDr. Pavlu Cejnarovi, Dr., za trpělivost a ochotu projevenou při vedení této práce.

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce a jejím zveřejňováním.

V Praze dne 7. 8. 2009

Jiří Blažek

Obsah

1	Úvod	5
2	Dvouhadinový systém v interakci s prostředím	7
2.1	Redukovaná matice hustoty	7
2.2	Schmidtův rozklad	10
2.3	Blochova sféra	11
3	Speciální volba hamiltoniánu	15
3.1	Popis hamiltoniánu	15
3.2	Vývoj redukované matice hustoty	17
4	Simulace	19
4.1	Popis výpočetního modelu	19
4.2	Režim $g \gg h_0$	21
4.3	Ukázky dalších typů evolucí	28
5	Závěr	31
	Literatura	32

Název práce: Dekoherece ve dvouhladinovém systému

Autor: Jiří Blažek

Katedra (ústav): Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr.

e-mail vedoucího: cejnar@ipnp.troja.mff.cuni.cz

Abstrakt: Práce se zabývá modelováním procesu dekoherence ve dvouhladinovém systému svázaném s rozsáhlým prostředím. Nejprve je zaveden formalismus redukované matice hustoty a Schmidtova rozkladu nutný ke zkoumání tohoto jevu. Dále je představen a popsán hamiltonián navržený speciálně ke sledování tvorby preferované báze. V simulacích je podrobně studována evoluce systému a proces konvergence Schmidtových vektorů. Rovněž je zkoumán vliv parametrů modelu na výsledek simulací, a to zejména počátečního stavu systému, velikosti interakční konstanty a dimenze prostředí. Na závěr jsou představeny obecnější typy evolucí, které nevedou k tvorbě preferované báze. Veškeré simulace byly prováděny v programu MAPLE 11.

Klíčová slova: Dekoherece, Schmidtův rozklad, Preferovaná báze

Title: Decoherence in a two-level system

Author: Jiří Blažek

Department: Institute of Particle and Nuclear Physics

Supervisor: Doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr.

Supervisor's e-mail address: cejnar@ipnp.troja.mff.cuni.cz

Abstract: This work is focused on the modelling of decoherence in a two-level system coupled with a larger environment. Firstly, the necessary formalism of the reduced density matrix and of the Schmidt decomposition is formulated. In the next step a hamiltonian specifically designed for observing a preferred basis is introduced and described. In simulations an evolution of the system and the process of convergence of Schmidt vectors is studied in detail. The effect of the parameters of the model on results of the simulations is explored. Special attention is paid to the initial state of the system, the value of the interaction constant and to the dimension of the environment. Lastly presented are more general types of evolution, which do not lead to a preferred basis. All simulations were carried out in MAPLE 11.

Keywords: Decoherence, Schmidt decomposition, Preferred basis

Kapitola 1

Úvod

Dekoherence je proces, při kterém systém díky interakci s okolím ztrácí své typicky kvantové vlastnosti. Studium tohoto problému se dostalo do popředí zájmu v posledních několika desetiletích, jelikož existuje naděje, že se s jeho pomocí podaří přirozeně vysvětlit emergenci klasických systémů z kvantového popisu reality. Mechanismus dekoherence má i praktickou důležitost, jedná se totiž o nežádoucí jev při jakémkoliv druhu kvantových výpočtů.

Při přechodu od kvantového ke klasickému popisu je ústředním problémem rozdíl mezi kvantovým stavem udávajícím pravděpodobnosti výsledků měření na jedné straně a klasickým statistickým souborem na straně druhé. To lze ilustrovat už na jednoduchém příkladu dvouhladinového systému, např. volné částice se spinem $1/2$. Vektor $|\uparrow\rangle$, resp. $|\downarrow\rangle$, nechť odpovídá kladné, resp. záporné projekci spinu do osy z . Mějme vlnovou funkci zadanou ve tvaru

$$|\psi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle, \quad (1.1)$$

kde komplexní amplitudy α a β splňují vztah $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Takové vlnové funkci odpovídá následující matice hustoty vyjádřená v bázi $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* \\ \alpha^*\beta & |\beta|^2 \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

Naproti tomu mějme stav, který projekci $|\uparrow\rangle$ přiřazuje pravděpodobnost p_\uparrow a projekci $|\downarrow\rangle$ pravděpodobnost p_\downarrow , kde $p_\uparrow + p_\downarrow = 1$. V maticovém vyjádření:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} p_\uparrow & 0 \\ 0 & p_\downarrow \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

Tyto dva stavy se fundamentálně liší. Při výpočtu pravděpodobnosti výskytu systému v nějakém stavu $|a\rangle$ pomocí výrazu (1.2), resp. (1.1), se ve výsledku vždy vyskytnou interferenční členy úměrné $\langle a|\uparrow\rangle\langle\downarrow|a\rangle$, naproti tomu vyjádření (1.3) se chová jako klasický statistický soubor a tyto členy jsou zde nulové. V prvním případě se někdy mluví o koherentní směsi (nebo také o koherentní sumě). Právě od ztráty této vlastnosti odvozuje dekoherence svůj název.

Je důležité si uvědomit, že kvantově mechanická evoluce neumožňuje přechod od jednoho typu stavů k druhému, jelikož prvně diskutovaný typ je čistý a unitární vývoj čistotu stavu zachovává. Z průkopnických prací [3], [7] a dalších ale začalo být zřejmé, že cestou by mohla být interakce systému s rozsáhlejším prostředím. Vlnová funkce popisující stav obou částí pak nadále zůstává v čistém stavu, nicméně už ji nelze popsat jako direktní součin dvou separátních vlnových funkcí obou subsystémů. Technika parciální stopy nicméně umožňuje vytvořit redukovanou matici systému $\hat{\rho}_s$, která o něm obsahuje všechny fyzikálně relevantní informace. Akce prostředí na systém způsobuje diagonalizaci $\hat{\rho}_s$ v jisté bázi, která se dále nazývá preferovaná. Každá regulární matice je v nějaké bázi diagonální, nicméně preferovaná báze je v průběhu vývoje *stabilní*. Důležitým nástrojem pro zkoumání tohoto jevu je tzv. Schmidtův rozklad celkové vlnové funkce do báze vlastních vektorů $\hat{\rho}_s$ a prostředí. Informace o časovém vývoji Schmidtova rozkladu jsou pak klíčové ke zjišťování míry dekoherence. Proces výběru preferované báze rovněž zavádí nový druh časové nevrátnosti, resp. novou šipku času. Rozsáhlé diskuzi těchto otázek je věnována publikace [6]. Tato práce si neklade za cíl podat obsáhlý úvod do celého rozsahu problematiky, k tomu jsou vhodné publikace [8], [9] nebo [5].

Lze shrnout, že nastíněný mechanismus umožňuje vytvoření stavu typu (1.3), aniž by bylo opuštěno od jednoho ze základních kamenů kvantové mechaniky – unitární evoluce.

Kapitola 2

Dvouhladinový systém v interakci s prostředím

2.1 Redukovaná matice hustoty

Cílem této práce je pokusit se o popis jednoduchého systému interagujícího s rozsáhlejším prostředím. V řeči kvantové mechaniky se jedná o případ, kdy celkový Hilbertův prostor má tvar $\mathcal{H} = \mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_e$, kde index s označuje systém a index e zbytek vektorového prostoru. Předpokládejme, že \mathcal{H}_s je charakterizován bází $\{|\chi_i\rangle_s\}$ a obklopující prostředí má bázi $\{|e_j\rangle_e\}$. Pokud má prostor \mathcal{H}_s dimenzi m a prostor \mathcal{H}_e dimenzi N , má celkový prostor dimenzi $m \times N$. V této a následující sekci budeme předpokládat m libovolné, ve zbylých oddílech už se budeme soustředit pouze na případ dvouhladinového systému, tedy $m = 2$. Na problém se díváme tak, že důležitý je pro nás pouze stav systému a informace o prostředí nás nezajímají. Za těchto okolností se pokusíme alespoň kvalitativně něco říci o vývoji relevantní části. Přírodním nástrojem pro popis se zdá být celková vlnová funkce, která poskytuje úplnou informaci o obou částech. Nicméně, vlnová funkce se zpravidla nenachází v separabilním stavu typu

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle_s \otimes |\phi\rangle_e. \quad (2.1)$$

Mnohem častější je neseparabilní případ, obecně popsáný tvarem

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} a_{ij} |\chi_i\rangle_s |e_j\rangle_e, \quad (2.2)$$

kde $\sum_{i,j} |a_{ij}|^2 = 1$. I kdyby byla počáteční vlnová funkce připravena ve stavu (1), stejně se obecně vlivem časového vývoje dostane do stavu popsaného pomocí (2), a to i přesto, že evoluce kompletního systému je unitární. Je zřejmé, že jedině hamiltonián typu $H = \mathbb{1}_s \otimes H_e + H_s \otimes \mathbb{1}_e$ zachovává separabilitu vlnové funkce ve všech časech a zaručuje oddělený vývoj obou částí \mathcal{H} . Nás ale zajímá případ systému interagujícího s prostředím, do celkového hamiltoniánu tedy přibude interakční člen: $H = \mathbb{1}_s \otimes H_e + H_s \otimes \mathbb{1}_e + H_I$.

Ukazuje se, že vhodným nástrojem pro popis stavu systému je formalismus parciálních stop a redukovaných matic hustoty. Mějme matici hustoty v čistém stavu udanou

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (2.3)$$

a zavedme operaci parciální stopy přes prostředí vztahem

$$Tr_e \hat{\rho} = \sum_k \langle e_k | \hat{\rho} | e_k \rangle_e = \sum_{i,j,k} a_{ik}^* a_{jk} |\chi_i\rangle_s \langle \chi_j|. \quad (2.4)$$

Výsledný objekt nazvěme redukovanou maticí hustoty systému a označme ji $\hat{\rho}_s$. Obdobně se zadefinuje redukovaná matice hustoty prostředí $\hat{\rho}_e$ jako zúžení operátoru celkové matice hustoty přes bázi systému, tedy $\hat{\rho}_e = Tr_s \hat{\rho} = \sum_k \langle \chi_k | \hat{\rho} | \chi_k \rangle_s$. Takto zavedené definice jsou korektní, neboli, tyto výrazy mají všechny vlastnosti matice hustoty. Především:

- (i) $Tr \hat{\rho}_s = 1$
- (ii) $\hat{\rho}_s$ je hermitovský operátor
- (iii) $\hat{\rho}_s$ je semipozitivně definitní
- (iv) $Tr \hat{\rho}_s^2 \leq 1$

Tvrzení (i) se dokáže přímým výpočtem:

$$\begin{aligned} Tr \hat{\rho}_s &= \sum_l \langle \chi_l | \left(\sum_{i,j,k} a_{ik}^* a_{jk} |\chi_i\rangle_s \langle \chi_j| \right) | \chi_l \rangle_s = \sum_l \sum_{i,j,k} a_{ik}^* a_{jk} \langle \chi_l | \chi_i \rangle_s \langle \chi_j | \chi_l \rangle_s \\ &= \sum_{l,k} a_{lk}^* a_{lk} = \sum_{l,k} |a_{lk}|^2 = 1. \end{aligned}$$

Hermitovskost je zřejmá z tvaru (2.4). O platnosti bodu (iii) se lze opět přesvědčit přímým dosazením. Nechť $|\psi\rangle_s$ je libovolný vektor z \mathcal{H}_s s rozkladem $|\psi\rangle_s = \sum_i b_i |\chi_i\rangle_s$. Potom

$$\begin{aligned} {}_s\langle\psi|\hat{\rho}_s|\psi\rangle_s &= \left(\sum_i {}_s\langle\chi_i|b_i^*\right)\left(\sum_{j,l}\rho_{jl}|\chi_j\rangle_s{}_s\langle\chi_l|\right)\left(\sum_i b_i|\chi_i\rangle_s\right) = \sum_{i,j}\rho_{ij}b_i^*b_j \\ &= \sum_{i,j,k}a_{ik}^*a_{jk}b_i^*b_j = \sum_k\left|\sum_i a_{ik}b_i\right|^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Parciální matici hustoty lze vždy diagonalizovat a spočítat vlastní čísla p_i a (normalizované) vlastní vektory $|i\rangle_s$. Zapsaná v takto vzniklé nové bázi potom dostane tvar

$$\hat{\rho}_s = \sum_i p_i |i\rangle_{ss}\langle i|. \quad (2.5)$$

Vzhledem k ortonormalitě báze platí $\hat{\rho}_s = \sum_i (p_i)^2 |i\rangle_{ss}\langle i|$ a tudíž také $Tr\hat{\rho}_s^2 = \sum_i (p_i)^2$. Z vlastností (i) a (iii) je vidět, že $p_i \in (0,1)$ a tedy je opravdu splněn bod (iv).

Formalismus matice hustoty rozlišuje mezi čistými a smíšenými stavy podle kritéria (iv) (pro čistý stav nastává rovnost). Smíšené stavy jsou charakterizovány neúplnou informací o systému, např. neznámou počáteční vlnovou funkcí. Technika parciální stopy ale umožňuje vytvořit nový druh smíšeného stavu. Byť se systém jako celek nachází v čistém stavu, přesto může nastat situace $Tr\hat{\rho}_s^2 < 1$. Takový případ se potom někdy nazývá smíšený stav druhého druhu.

Separabilita celkové vlnové funkce a čistota stavu jednoho ze subsystémů spolu úzce souvisejí – vlnová funkce je separabilní právě tehdy, když se jeden ze subsystémů nachází v čistém stavu (tato podmínka zároveň vynucuje i čistotu stavu druhého subsystému). Navíc platí, že evoluce indukovaná časově konstantním hamiltoniánem s interakčním členem už nikdy nemůže obnovit čistotu stavu jakéhokoli ze subsystémů. Pro další diskuzi je rovněž důležitá skutečnost, že diagonalizovaná redukovaná matice hustoty se nachází v čistém stavu právě tehdy, je-li jeden z jejích diagonálních členů roven 1 a všechny ostatní jsou nulové.

2.2 Schmidtův rozklad

Ukazuje se, že báze, v níž je redukovaná matice hustoty diagonální (vztah (2.5)), má privilegované postavení. Libovolnou vlnovou funkci z prostoru \mathcal{H} lze zapsat ve tvaru

$$|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{(p_i)} |i\rangle_s |i\rangle_e. \quad (2.6)$$

Klíčovou vlastností této dekompozice je, že sčítání probíhá pouze přes *jeden* index. Vektorům $|i\rangle_s$ a $|i\rangle_e$ se říká Schmidtovy vektory a vztah (2.6) se nazývá Schmidtův rozklad. Vektory z prostoru systému jsou tedy jedinečným způsobem korelovány s vektory z prostoru prostředí. Tato korelace se obecně při vývoji nezachovává a v každém čase je třeba redukovanou matici hustoty znovu diagonalizovat a hledat novou Schmidtovu bázi. Mechanismus dekoherence studovaný v této práci je nicméně speciálním typem evoluce, která zachovává korelace i na dlouhých časech a při které se Schmidtova báze příliš nemění. Konkrétněji bude toto diskutováno v kapitole 3. Následuje důkaz tvrzení (2.6).

Mějme opět obecnou vlnovou funkci ve tvaru (2.2), tedy

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} a_{ij} |\chi_i\rangle_s |e_j\rangle_e$$

a předpokládejme ortogonalitu a ortonormalitu obou bazí. Zavedme nové vektory vztahem

$$|\tilde{i}\rangle \equiv \sum_j a_{ij} |e_j\rangle_e. \quad (2.7)$$

Takže dostáváme

$$|\psi\rangle = \sum_i |\chi_i\rangle_s |\tilde{i}\rangle_e. \quad (2.8)$$

Vektory $|\tilde{i}\rangle_e$ už nejsou obecně ortogonální. Pokud ale vezmeme za $|\chi_i\rangle_s$ normalizované vlastní vektory $\hat{\rho}_s$, které jsou v souladu se značením výše rovny $|i\rangle_s$, vyplývá ortogonalita odpovídajících $|\tilde{i}\rangle_e$ z následujícího:

$${}_s\langle l | \hat{\rho}_s | m \rangle_s \propto \delta_{lm}$$

a zároveň:

$$\begin{aligned}
{}_s\langle l | \hat{\rho}_s | m \rangle_s &= {}_s\langle l | \left(\sum_k {}_e\langle e_k | \hat{\rho} | e_k \rangle_e \right) | m \rangle_s \\
&= \sum_{i,j,k} {}_e\langle e_k | \tilde{i} \rangle_{ee} \langle \tilde{j} | e_k \rangle_{es} \langle l | i \rangle_{ss} \langle j | m \rangle_s \\
&= \sum_k {}_e\langle \tilde{l} | e_k \rangle_{ee} \langle e_k | \tilde{m} \rangle_e = {}_e\langle \tilde{l} | \tilde{m} \rangle_e.
\end{aligned}$$

V posledním kroku bylo použito $\sum_k | e_k \rangle_{ee} \langle e_k | = \mathbf{1}_e$. Nyní lze učinit několik pozorování. Předně, $|\tilde{i}\rangle_e$ jsou vlastními vektory operátoru $\hat{\rho}_e$. To zřejmě vyplývá z tvaru $|\psi\rangle$ a z definice parciální stopy. Je tedy $\hat{\rho}_e = Tr_s |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_i |\tilde{i}\rangle_{ee} \langle \tilde{i}|$. Odtud je ihned vidět, že vlastní čísla $\hat{\rho}_e$ jsou dána $p_i = {}_e\langle \tilde{i} | \tilde{i} \rangle_e$. Dále, výpočet výše ukázal, že ${}_s\langle i | \hat{\rho}_s | i \rangle_s = {}_e\langle \tilde{i} | \tilde{i} \rangle_e = p_i$. Odtud tedy plyne důležitý výsledek o shodnosti vlastních čísel $\hat{\rho}_e$ a $\hat{\rho}_s$. Nyní zbývá vytvořit normalizovaný stav

$$|i\rangle_e \equiv p_i^{-1/2} |\tilde{i}\rangle_e, \quad (2.9)$$

čímž dostáváme dokazovaný výsledek (2.6).

2.3 Blochova sféra

Informace o evoluci relevantní části systému se dají získávat ze sledování vývoje několika zajímavých veličin. Příkladem budiž von Neumannova entropie ($Tr(-\hat{\rho}_s \ln \hat{\rho}_s)$), čistota stavu ($Tr \hat{\rho}_s^2$) nebo, u případu zkoumaného touto prací, třetí složka operátoru spinu. Pro dvouhladinový systém ale existuje názorný způsob zobrazení evoluce redukované matice hustoty jako celku. Hermitovská matice 2×2 je jednoznačně určena čtyřmi reálnými čísly, přičemž ale podmínka $Tr \hat{\rho}_s = 1$ redukuje počet nezávislých parametrů na tři a umožňuje tak zobrazit stav systému do trojrozměrného grafu.

Libovolnou hermitovskou 2×2 matici lze zapsat jako lineární kombinaci Pauliho matic a jednotkové matice: $\hat{\rho}_s = a \cdot \mathbf{1}_s + 1/2 \vec{b} \cdot \vec{\sigma}$. Podmínka $Tr \hat{\rho}_s = 1$ fixuje hodnotu parametru a , jelikož $Tr \hat{\rho}_s = 2a + 0 = 1 \Rightarrow a = 1/2$. Tato skutečnost také osvětluje použití koeficientu $1/2$ ve výrazu výše. Celkově má tedy matice hustoty tvar

$$\hat{\rho}_s = 1/2(\mathbf{1}_s + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}). \quad (2.10)$$

Nabízí se otázka, jestli má takto zobrazený stavový prostor nějaký speciální tvar. Ukazuje se, že má, a navíc jeho geometrie je velmi jednoduchá. Všechny možné hodnoty vektoru \vec{b} jsou ohraničeny jednotkovou koulí, přičemž čisté stavy leží na jejím povrchu a smíšené stavy v jejím vnitřku. K tomuto výsledku se dá dospět velmi jednoduše přímým výpočtem (za použití vztahu $\sigma_a\sigma_b = \delta_{ab}\mathbb{1} + i\sum_c \epsilon_{abc}\sigma_c$).

$$\begin{aligned}\rho_s^2 &= 1/4(\mathbb{1}_s + \sum_i b_i\sigma_i)(\mathbb{1}_s + \sum_l b_l\sigma_l) = 1/4(\mathbb{1}_s + 2\sum_i b_i\sigma_i + b_i b_l\sigma_i\sigma_l) = \\ &= 1/4(\mathbb{1}_s + 2\sum_i b_i\sigma_i + b_i^2 + \sum_{i,l,k} i b_i b_l \epsilon_{ilk}\sigma_k).\end{aligned}$$

Pro libovolnou matici hustoty platí $Tr\hat{\rho}_s^2 \leq 1$. S využitím předchozího dostáváme hledanou podmínku na velikost vektoru \vec{b} :

$$Tr\hat{\rho}_s^2 = 1/4\left(2 + 0 + 2\sum_i b_i^2 + 0\right) = 1/2\left(1 + \sum_i b_i^2\right) \leq 1 \Rightarrow \sum_i b_i^2 \leq 1.$$

Povrch takto vzniklé koule se nazývá Blochova sféra a představuje prostor všech čistých stavů dvouhladinového systému (pro čisté stavy platí $Tr\hat{\rho}_s^2 = 1$). Bod $(0, 0, 1)$ odpovídá vektoru $|\uparrow\rangle$ a bod $(0, 0, -1)$ vektoru $|\downarrow\rangle$. Osa z představuje prostor klasických statistických souborů, charakterizovaných pravděpodobnostmi p_\uparrow nalezení systému ve stavu $|\uparrow\rangle$ a obdobně pravděpodobnostmi p_\downarrow pro stav $|\downarrow\rangle$. Stavy vzdálené ose z mají kvantovou povahu a z nich počítané výrazy pro pravděpodobnosti mají typicky interferenční členy. Střed koule je rovněž speciální, odpovídá totiž nalezení obou stavů s pravděpodobností $1/2$, jde tedy o případ s maximální entropií. Ta je rovna $S = -Tr\hat{\rho}_s \ln \hat{\rho}_s = -p_\uparrow \ln p_\uparrow - p_\downarrow \ln p_\downarrow = \ln 2$.

Možná názornější náhled lze získat z parametrizace vlnové funkce systému v čistém stavu. Tu lze zapsat jako

$$|\psi\rangle_s = \cos\theta |\uparrow\rangle + \sin\theta e^{i\phi} |\downarrow\rangle. \quad (2.11)$$

kde $\pi/2 \leq \theta < \pi/2$ a $0 \leq \phi < 2\pi$ jsou standardní sférické úhly. Pomocí zobrazení

$$\begin{aligned}x &= \sin 2\theta \cos \phi \\ y &= \sin 2\theta \sin \phi \\ z &= \cos 2\theta\end{aligned}$$

se potom dá sledovat vývoj vlnové funkce na Blochově sféře. Lze se snadno přesvědčit, že obě zde ukázané parametrizace jsou ekvivalentní a zobrazují to samé (neboli vektor \vec{b} je roven $\vec{r} = (x, y, z)$ z výše definované parametrizace čistých stavů). Důkaz obnáší jen rozepsání goniometrických výrazů:

$$\begin{pmatrix} \cos^2 \theta & \cos \theta \sin \theta e^{-i\phi} \\ \cos \theta \sin \theta e^{i\phi} & \sin^2 \theta \end{pmatrix} = 1/2 \begin{pmatrix} 1 + b_3 & b_1 + ib_2 \\ b_1 - ib_2 & 1 - b_3 \end{pmatrix}$$

Výraz na levé straně rovnice vznikl jako matice hustoty generovaná vlnovou funkcí ve tvaru (2.11), výraz na pravé straně je rozepsané (2.10). Pro jednoduchost ukažme jen zetovou složku. Z porovnání diagonálních členů je $b_3 = 2 \cos^2 \theta - 1 = \cos 2\theta = z$, konzistentně se sférickou parametrizací výše.

V kapitole 4 zabývající se výsledky simulací se nacházejí dva typy grafů. První typ zobrazuje kvadrát absolutní hodnoty první souřadnice Schmidtova vektoru, jež odpovídá stavu s nejvyšší pravděpodobností nalezení v rámci statistického souboru systému (tj. přísluší většímu ze dvou vlastních čísel $\hat{\rho}_s$). Pro tento vektor je užito značení $|\phi_S^>\rangle$, index s značící příslušnost k prostoru systému pro přehlednost vynecháváme. Souřadnice je vzata v pracovní bázi $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, je tedy rovna $\langle\uparrow|\phi_S^>\rangle$.

Druhý typ grafu zobrazuje evoluci redukované matice hustoty podle parametrizace (2.10). Tyto dvě vynášené veličiny spolu ale úzce souvisí. Pro nalezení této souvislosti musíme spočítat vlastní vektory (2.10). Rovnice pro větší vlastní číslo má tvar

$$1/2(\mathbf{1}_s + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}) |\phi_S^>\rangle = p_> |\phi_S^>\rangle. \quad (2.12)$$

Jelikož nás ale zajímá pouze veličina $|\langle\uparrow|\phi_S^>\rangle|^2$, stačí řešit rovnici

$$\vec{b} \cdot \vec{\sigma} |\phi_S^>\rangle = (2p_> - 1) |\phi_S^>\rangle =: \lambda |\phi_S^>\rangle, \quad (2.13)$$

čímž se výpočet zjednoduší. Po krátkém počítání vyjde

$$|\lambda|^2 = |\vec{b}|^2. \quad (2.14)$$

Kladně vzatá odmocnina odpovídá vlastnímu číslu, které je nižší na horní polokouli a vyšší na dolní polokouli, u záporně vzaté odmocniny je to naopak. Zbývá vyřešit soustavu lineárních rovnic pro souřadnice vlastních vektorů. Postup je jednoduchý a přímočarý, využije se pouze vztahu

$$|\langle\uparrow|\phi_S^>\rangle|^2 + |\langle\downarrow|\phi_S^>\rangle|^2 = 1, \quad (2.15)$$

proto zde uvedeme pouze výsledek. Vyjde

$$|\langle \uparrow | \phi_S^{\rightarrow} \rangle|^2 = \frac{1}{2}(1 + b_3/|\vec{b}|), \quad (2.16)$$

resp.

$$|\langle \uparrow | \phi_S^{\leftarrow} \rangle|^2 = \frac{1}{2}(1 - b_3/|\vec{b}|), \quad (2.17)$$

pro horní, resp. dolní polokouli.

Kapitola 3

Speciální volba hamiltoniánu

3.1 Popis hamiltoniánu

Předmětem této práce je studium interakce dvouhladinového systému s prostředím o nějakém rozměru N . Hamiltonián popisující vývoj celkového systému lze vždy zapsat ve tvaru

$$H = H_s \otimes \mathbb{1}_e + \mathbb{1}_s \otimes H_e + H_I, \quad (3.1)$$

kde H_s , resp. H_e , je hamiltonián působící na prostoru systému, resp. prostředí, a H_I je interakční člen. Pro většinu simulací v této práci byl hamiltonián zvolen následovně:

$$H = h_{0s}(\sigma_+ + \sigma_-) \otimes \mathbb{1}_e + h_{0e}\mathbb{1}_s \otimes H_{0e} + g(P_\uparrow \otimes H_e^\uparrow + P_\downarrow \otimes H_e^\downarrow). \quad (3.2)$$

Operátory σ_+ a σ_- jsou posunovacími operátory na prostory dvouhladinového systému. V šipkovém značení formalismu částice se spinem $1/2$ je $\sigma_+ = |\uparrow\rangle\langle\downarrow|$ a $\sigma_- = |\downarrow\rangle\langle\uparrow|$. Indexy popisující příslušnost vektorů k systému jsou zde vynechány a pokud nebude hrozit nedorozumnění, budou konzistentně vynechávány po zbytek práce. Operátory P_\uparrow, P_\downarrow jsou projekční operátory na příslušný stav systému, neboli $P_\uparrow = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$ a $P_\downarrow = |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$. Koefficienty h_{0s}, h_{0e} a g jsou parametry určující sílu jednotlivých členů. V další kapitole budou h_{0q} a h_{0e} někdy nepořádně označovány pouze jako h_0 , v takovém případě si budou vždy rovné. Zvolené indexy napovídají, že bude mít smysl mluvit o rozpisu hamiltoniánu na tvar $H = H_0 + H_I$. Oproti poruchové teorii nás ale bude zajímat spíše oblast, kde dominuje interakční člen ($g \gg h_0$), nebo

jsou alespoň příspěvky od obou částí hamiltoniánu srovnatelné ($g \sim h_0$). Dekoherece totiž potřebuje ke svému působení co nejsilnější vazbu mezi systémem a prostředím. Vliv síly interakce na vývoj, stejně jako vliv dalších parametrů jako je dimenze prostředí, bude studován v následující kapitole. Hamiltoniány H_{0e} , $H_{e\uparrow}$ a $H_{e\downarrow}$ působící na prostoru prostředí jsou brány jako neznámé a v simulacích jsou voleny náhodně. Jak ukazuje výsledek uvedený v kapitole 4, výsledek výpočtu na jejich volbě příliš nezávisí.

Výběr hamiltoniánu byl inspirován pracemi [1] a [2], kde je stejný hamiltonián použit v prvním případě především ke kvalitativnímu popisu evoluce v závislosti na konstantě g a ve druhém případě k dosažení jistého speciálního koncového stavu. Tato bakalářská práce se pokouší testovat vliv širší množiny parametrů na mechanismus dekoherence – v kapitole 4 jsou zkoumány vlivy změn parametrů g, h_0 , dimenze N , $H_{e\uparrow}, H_{e\downarrow}$ a počátečních podmínek na průběh evoluce. Tento hamiltonián si neklade za cíl popisovat konkrétní fyzikální systém, má sloužit především k názorné ukázce mechanismu dekoherence v co nejjednodušším případě. Zároveň je ale dostatečně obecný, aby nebylo možno evoluci vlnové funkce vyřešit analyticky.

Pokusme se popsat jednotlivé členy. První část $h_{0s}(\sigma_+ + \sigma_-) \otimes \mathbb{1}_e$ zachovává stav prostředí a v systému indukuje cyklický vývoj s periodou 2π . Tento člen byl zvolen tak, aby systém podstupoval nějakou netriviální evoluci, i když není momentálně v interakci s prostředím. Druhý člen $h_{0e}\mathbb{1}_s \otimes H_{0e}$ nechává prostředí se vyvíjet, aniž by vznikaly nějaké nové korelace se systémem. Třetí část $g(P_\uparrow \otimes H_e^\uparrow + P_\downarrow \otimes H_e^\downarrow)$ má poměrně speciální tvar a klade si za cíl co nejzřetelněji ukázat mechanismus dekoherence. Záměrem je co nejvíce oddělit část prostředí svázanou s pozitivní projekcí spinu a část svázanou s negativní projekcí spinu. To zaručují rozdílné hamiltoniány $H_{e\uparrow}$ a $H_{e\downarrow}$, které postupně vytvářejí rozdílné korelace pro každou ze dvou částí vlnové funkce.

V jistém speciálním smyslu se zde dá mluvit o mechanismu „měření“, kde bázi, ve které se měření odehrává, zastupují vektory $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$. Tato báze se zároveň stává Schmidtovou bází na prostoru systému. Podle kodaňské interpretace kvantové mechaniky dochází při měření ke kolapsu vlnové funkce do jednoho z vektorů měřicí báze. Vývoj systému v interakci s prostředím pod výše specifikovaným hamiltoniánem ale umožňuje tento postulát v tomto konkrétním případě obejít, jelikož redukovaná matice hustoty se v „měřicí“ bází diagonalizuje a nadále se chová jako klasický statistický soubor, který se s pravděpodobností p_\uparrow nachází ve stavu $|\uparrow\rangle$ a obdobně pro druhou hladinu. Argumenty pro takovýto vývoj jsou položeny v následující sekci a celý

proces je ilustrován simulacemi v kapitole 3.

3.2 Vývoj redukované matice hustoty

Mějme hamiltonián roven interakčnímu hamiltoniánu $H_I = g(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes H_e^\dagger + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes H_e^\downarrow)$, ostatní členy zanedbejme. To odpovídá situaci $g \gg h_0$, což je případ většiny simulací uvedených v této práci. Pokusme se nahlédnout nějaké skutečnosti o vývoji systému. Evoluční operátor má tvar $\hat{U}(t) = e^{-igt(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes H_e^\dagger + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes H_e^\downarrow)}$ (v celé práci budou konzistentně používány jednotky, ve kterých $\hbar = 1$). Oba členy v hamiltoniánu komutují, předešlý výraz tedy lze zapsat jako součin dvou exponencií.

$$\hat{U}(t) = e^{-igt(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes H_e^\dagger + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes H_e^\downarrow)} = e^{-igt|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes H_e^\dagger} e^{-igt|\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes H_e^\downarrow}$$

Předpokládejme počáteční celkovou vlnovou funkci v separabilním stavu, tedy $|\psi(0)\rangle = |\phi\rangle_s \otimes |\phi\rangle_e$. Vlnová funkce systému nechť je v obecném tvaru $|\phi\rangle_s = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle$, o počáteční vlnové funkci prostředí nic bližšího nevíme. Nechme nyní působit evoluční operátor na celkovou vlnovou funkci:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle &= e^{-igt|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes H_e^\dagger} e^{-igt|\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes H_e^\downarrow} \alpha |\uparrow\rangle |\phi\rangle_e \\ &\quad + e^{-igt|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes H_e^\dagger} e^{-igt|\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes H_e^\downarrow} \beta |\downarrow\rangle |\phi\rangle_e \\ &= \alpha |\uparrow\rangle e^{-igtH_e^\dagger} |\phi\rangle_e + \beta |\downarrow\rangle e^{-igtH_e^\downarrow} |\phi\rangle_e. \end{aligned}$$

Zavedme označení

$$|\phi^\uparrow(t)\rangle_e := e^{-igtH_e^\dagger} |\phi\rangle_e, \quad (3.3)$$

$$|\phi^\downarrow(t)\rangle_e := e^{-igtH_e^\downarrow} |\phi\rangle_e, \quad (3.4)$$

čímž dostaneme

$$\hat{U}(t) |\psi(t)\rangle = \alpha |\uparrow\rangle |\phi^\uparrow(t)\rangle_e + \beta |\downarrow\rangle |\phi^\downarrow(t)\rangle_e. \quad (3.5)$$

Nyní se pokusme popsat redukovanou matici hustoty systému generovanou takovouto evolucí. Obecně je dána předpisem $\hat{\rho}_s = Tr_e \hat{\rho} = \sum_i {}_e \langle i | \hat{\rho} | i \rangle_e$ (vztah (2.4)), kde $|i\rangle_e$ je *libovolná* báze prostoru prostředí. To je důležitá

skutečnost – na volbě báze, přes kterou se tvoří parciální stopa, výsledek nezávisí. Nejprve napíšeme celkovou matici hustoty:

$$\hat{\rho} = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = |\alpha|^2 |\uparrow\rangle\langle\uparrow| |\phi^\uparrow(t)\rangle\langle\phi^\uparrow(t)| + \alpha\beta^* |\uparrow\rangle\langle\downarrow| |\phi^\uparrow(t)\rangle\langle\phi^\downarrow(t)| \\ + \alpha^*\beta |\downarrow\rangle\langle\uparrow| |\phi^\downarrow(t)\rangle\langle\phi^\uparrow(t)| + |\beta|^2 |\downarrow\rangle\langle\downarrow| |\phi^\downarrow(t)\rangle\langle\phi^\downarrow(t)|.$$

Parciální stopu vezměme přes libovolnou ortonormální bázi prostoru prostředí. Pro jednoduchost počítejme jen $[1, 1]$ komponentu $\hat{\rho}_s$, ostatní se udělají naprosto analogicky.

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_s[1, 1] &= \sum_k |\alpha|^2 |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \langle k | \phi^\uparrow(t)\rangle\langle\phi^\uparrow(t) | k\rangle \\ &= \sum_k |\alpha|^2 |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \langle\phi^\uparrow(t) | k\rangle\langle k | \phi^\uparrow(t)\rangle \\ &= |\alpha|^2 |\uparrow\rangle\langle\uparrow|. \end{aligned}$$

Shrňme výsledek v bázi $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$:

$$\hat{\rho}_s(t) = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* \langle\phi^\downarrow(t) | \phi^\uparrow(t)\rangle \\ \alpha^*\beta \langle\phi^\uparrow(t) | \phi^\downarrow(t)\rangle & |\beta|^2 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Na závěr položíme

$$r(t) = \langle\phi^\downarrow(t) | \phi^\uparrow(t)\rangle, \quad (3.7)$$

čímž dostaneme finální tvar

$$\hat{\rho}_s(t) = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* r(t) \\ \alpha^*\beta r^*(t) & |\beta|^2 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Jak je vidět, diagonální členy na čase nezávisí a proto se pravděpodobnosti nalezení systému ve stavech $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ nemění. To koresponduje se zachováním projekce spinu. Co lze říci o velikosti mimodiagonálních členů, spjatých s veličinou $r(t)$? Především, $r(0) = 1$, tedy na počátku evoluce nabývá r nejvyšší hodnotu. Jeho velikost je úměrná skalárnímu součinu dvou vektorů, které jsou původně shodné, ale vlivem evoluce se od sebe oddalují a skalární součin se zmenšuje. V případě prostředí o malé dimenzi by při náhodné evoluci po nějaké době začalo docházet k jeho opětovnému nárůstu. S rostoucí hodnotou dimenze je nicméně tento efekt stále více potlačován a v limitě nekonečně rozměrného prostředí se koeficient $r(t)$ v asymptotě nuluje a redukovaná matice hustoty systému se tím pádem diagonalizuje. V případě konečných dimenzí použitých v modelu prezentovaném níže dochází k pouze přibližné diagonalizaci $\hat{\rho}_s$, kdy mimodiagonální členy jsou malé, nikoli však nulové, a souřadnice Schmidtových vektorů stále jemně fluktuují.

Kapitola 4

Simulace

4.1 Popis výpočetního modelu

Ke všem výpočtům byl použit jednoduchý model napsaný v programu MAPLE 11. Na počátku je stvořena celková vlnová funkce v separabilním tvaru (2.1), která je unitárně vyvíjena působením hamiltoniánu popsaného v kapitole 3. V každém časovém kroku je spočtena redukovaná matice hustoty pomocí techniky parciální stopy a z ní jsou dopočteny hledané veličiny. Nejčastěji se jedná o souřadnice Schmidtových vektorů, jejichž vývoj tak může být v čase sledován.

Hamiltoniány H_{0e} , $H_{e\uparrow}$ a $H_{e\downarrow}$ o rozměrech $N \times N$ jsou voleny jako reálné symetrické matice. Jejich prvky jsou náhodné veličiny s následujícím rozdělením:

- i Mimodiagonální členy mají normální rozdělení $f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$ s parametry $\mu = 0$ a $\sigma = 1$.
- ii Diagonální členy mají normální rozdělení s parametry $\mu = 0$ a $\sigma = \sqrt{2}$.

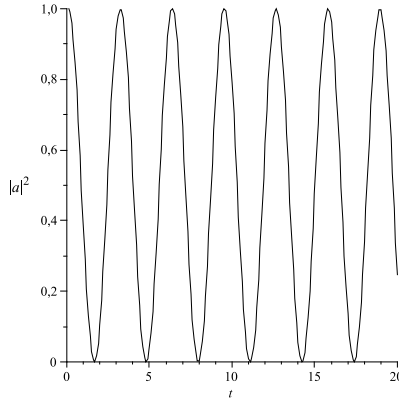
Takto vytvořený typ matic spadá pod tzv. GOE (Gaussian Orthogonal Ensemble), více se o něm lze dočíst např. v knize [4]. Rozdělení pravděpodobnosti prvků těchto matic je charakterizováno invariancí vůči unitárním (v reálném případně ortogonálním) transformacím, tedy i vůči všem přechodům mezi ortonormálními bazemi. Na generování nového hamiltoniánu pomocí GOE se tak lze dívat jako na rotování stávající báze. To s sebou nese užitečný efekt – není třeba pro každý výpočet generovat novou iniciální funkci prostředí a zároveň nový hamiltonián, jelikož změna energetické báze

zaručuje i nové počáteční podmínky, jejich další změna by tak byla redundantní. Pokud je někdy celkový hamiltonián držen konstantní, je počáteční stav prostředí volen náhodně pomocí komplexních čísel s reálnou i imaginární částí uniformně rozdělenou na zvoleném intervalu a následně je provedena normalizace vektoru. Počáteční vlnová funkce systému je do výpočtu vždy vložena a její souřadnice jsou v bázi $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ reálné.

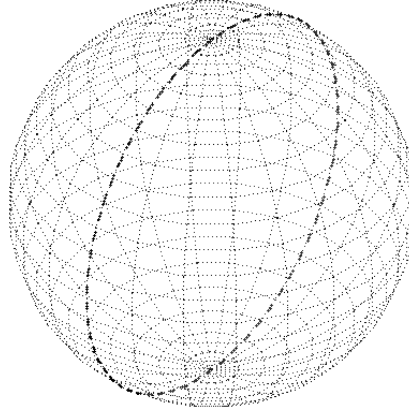
Pro ilustraci výstupů se nejprve podíváme na situaci, kdy je $g = 0$ a neprobíhá tedy interakce mezi systémem a prostředím. Počáteční stav systému je vektor $|\uparrow\rangle$, zbylé parametry jsou nastaveny následovně:

$$h_{0s} = h_{0e} = 1, N = 25. \quad (4.1)$$

Obrázek 4.1 znázorňuje evoluci Schmidtova vektoru $|\phi_S^>\rangle$, zavedenému v kapitole o Blochově sféře. Jedná se o vektor příslušející většímu z vlastních čísel $\hat{\rho}_s$. V pracovní bázi nechť má rozvoj $|\phi_S^>\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$, kde opět předpokládáme ortonormalitu, pro komplexní koeficienty a, b tedy platí $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Vynášenou proměnnou je $|\langle\uparrow|\phi_S^>\rangle|^2 = |a|^2$. Pro záznam časového vývoje této veličiny se někdy používá označení Schmidtova trajektorie. Dle očekávání pozorujeme cyklický vývoj. Obrázek 4.2 znázorňuje evoluci redukované matice hustoty $\hat{\rho}_s$ vynesenu na Blochově sféře. Vývoj začíná v souřadnici $(0,0,1)$ a probíhá pouze na povrchu sféry, takže není narušena čistota stavu.



Obrázek 4.1: Vývoj $|\langle\uparrow|\phi_S^>\rangle|^2$ bez interakce.



Obrázek 4.2: Vývoj $\hat{\rho}_s$ bez interakce.

Přejděme nyní k zajímavějšímu případu.

4.2 Režim $g \gg h_0$

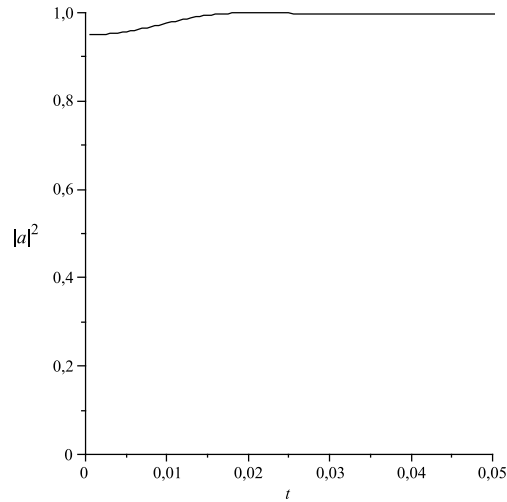
Pro tento případ se interakční člen hamiltoniánu (3.2) stává dominujícím a oba self-hamiltoniány působící na podsystémy lze přibližně zanedbat. Taková situace byla diskutována v kapitole 3.2 a bylo vyvozeno, že pro dostatečně velká prostředí dochází k diagonalizaci redukované matice hustoty systému v bázi $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Dochází tedy ke vzniku časově stabilní Schmidtovy báze. Tato sekce se zabývá podpořením tohoto výsledku simulacemi prováděnými s různými množinami parametrů problému.

Nejprve přistupme ke zkoumání Schmidtových trajektorií v modelu s následujícími parametry:

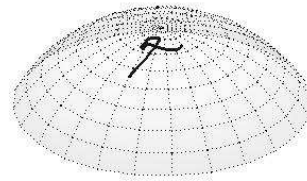
$$h_{0s} = h_{0e} = 0.1, g = 15, N = 25. \quad (4.2)$$

Počáteční stav systému byl položen $|\phi\rangle_s = \sqrt{0.95} |\uparrow\rangle + \sqrt{0.05} |\downarrow\rangle$. Obrázek 4.3 zobrazuje trajektorii Schmidtových vektorů. Je vidět, že systém z počáteční hodnoty $|\langle\uparrow|\phi_s^z\rangle|^2 = 0.95$ velmi rychle zrelaxuje (ve srovnání s periodou self-evoluce, která je rovna $T = \frac{2\pi}{h_{0s}} = 20\pi \approx 63$) a dochází k vytvoření Schmidtovy báze popsané výše. Obrázek 4.4 zobrazuje evoluci redukované matice hustoty spolu s vnesenou částí Blochovy sféry. Z obrázku to pravděpodobně není příliš patrné, ale počátek evoluce leží na povrchu sféry a s plynoucím časem se $\hat{\rho}_s$ rychle dostane ve vnitřku sféry do blízkosti

osy z , okolo níž po zbytek vývoje fluktuuje (výpočet bylo jednoduché prodloužit na velké časy a vždy bylo pozorováno oscilační chování okolo osy z). Další skutečností, která není z obrázku patrná, je vývoj stavového vektoru velmi blízko roviny $z = konst.$ To není tolik překvapivé, jelikož interakční část hamiltoniánu (3.2) komutuje s operátorem \hat{J}_z na prostoru systému a tudíž zachovává projekci spinu. Nicméně, projekce spinu *není* přesně zachována, jelikož self-hamiltonián systému obsahuje členy s $\hat{\sigma}_+$ a $\hat{\sigma}_-$. Efekt této části hamiltoniánu je ale v nyní diskutovaném režimu velmi malý.



Obrázek 4.3: Vývoj $|\langle \uparrow | \phi_S^z \rangle|^2$ v režimu $g \gg h_0$.



Obrázek 4.4: Vývoj $\hat{\rho}_s$ v režimu $g \gg h_0$.

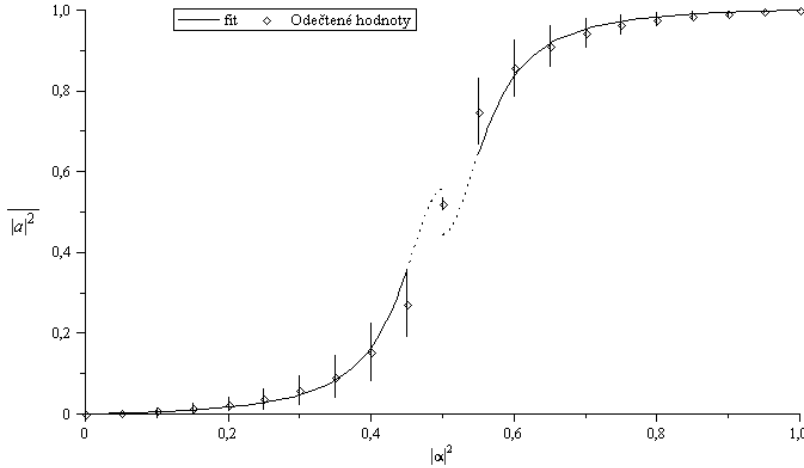
V minulé ukázce byl počáteční stav byl zvolen velmi blízko $|\uparrow\rangle$. Je možno pozorovat stejnou konvergenci Schmidtových vektorů i pro vzdálenější stavy? Podle argumentů položených v kapitole 3.2 tomu tak pro velmi velké dimenze prostředí být musí. Podívejme se nyní ale, jak konvergují Schmidtovy trajektorie pro dimenzi použitou v předchozím výpočtu ($N = 25$). Při simulaci byla měněna počáteční souřadnice $|\alpha|^2 =: p$ (platí $|\phi\rangle_s = \sqrt{p}|\uparrow\rangle + \sqrt{1-p}|\downarrow\rangle$) v kroku po 0.05. Na obrázku 4.5 je vynesena střední časová hodnota výrazu $|\langle\uparrow|\phi_S^>\rangle|^2$:

$$\overline{|a|^2} = \frac{1}{T} \int_0^T |\langle\uparrow|\phi_S(t)\rangle|^2 dt. \quad (4.3)$$

Evoluce probíhala po dobu $T = 1$. Jako chyba je vynesena časová střední hodnota variace:

$$\Delta\overline{|a|^2} = \frac{1}{T} \int_0^T ||a|^2(t) - \overline{|a|^2}| dt. \quad (4.4)$$

Účelem zavedení této veličiny je poskytnout informaci o míře konvergence. Pro velmi silné fluktuace se totiž už nedá mluvit o vzniku stabilních Schmidtových vektorů a vytvoření preferované báze. Graf 4.5 zobrazuje výsledek. Data byla fitována křivkami (4.6) a (4.8) uvedenými níže v textu.



Obrázek 4.5: Konvergence Schmidtových trajektorií pro proměnný počáteční stav s fitovanými křivkami.

Z grafu je vidět, že pro hodnoty blízke okrajům zkoumaného intervalu dochází ke konvergenci k bázi $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Pro hodnoty bližší ke středu intervalu

Schmidty trajektorie také konvergují, nicméně k rozdílné bázi. Trajektorie velmi blízko souřadnic $p = 0.5$ navíc velmi výrazně fluktuují a už se ani nedá mluvit o oscilacích okolo střední hodnoty. Tento výpočet byl proveden i pro jiné hodnoty dimenze prostředí N . Bylo pozorováno, že se vzrůstajícím N se křivka na grafu 4.5 blíží skokové funkci, což je očekávaný jev. Tvar této křivky pro konečnou dimenzi lze odhadnout pomocí poměrně hrubého postupu, který nicméně vede na rozumnou shodu s daty z krajních oblastí. Pro odvození tohoto výsledku se vraťme se k diskuzi v sekci 3.2. Jejím závěrem byl popis evoluce redukované matice hustoty systému následujícím způsobem:

$$\hat{\rho}_s(t) = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^*r(t) \\ \alpha^*\beta r^*(t) & |\beta|^2 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Už samotná tato rovnice je pouze přibližná, jelikož koeficienty h_{0s} a h_{0e} jsou nyní sice malé, ale nenulové. Výpočet se redukuje na nalezení vlastních čísel a vlastních vektorů této matice. Postup je přímočarý, nicméně rovněž zdlouhavý, proto uveďme pouze výsledek. Při výpočtu se systematicky zanedbávají členy s mocninou $|r(t)|$ vyšší než dvě (pro velké dimenze prostředí jde o odůvodněný předpoklad, velikost $|r(t)|$ byla diskutována v sekci 3.2). Zajímá nás veličina $|\langle \uparrow | \phi_S^{\rangle} \rangle|^2$ počítaná asymptoticky pro velké časy pro Schmidtův vektor příslušející *většímu* z vlastních čísel. Vyjde

$$|\langle \uparrow | \phi_S^{\rangle} \rangle|^2 = \left(\frac{1+z}{1+\frac{3z}{2}} \right)^2, \quad (4.6)$$

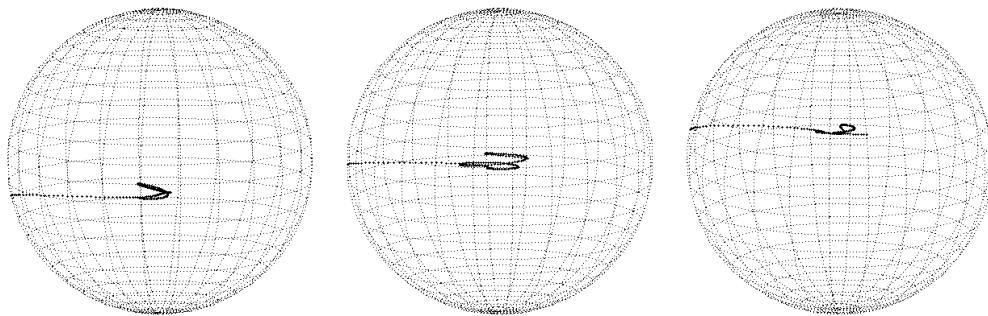
kde

$$z = \frac{|\alpha|^2|\beta|^2|r|^2}{(|\alpha|^2 - |\beta|^2)^2}. \quad (4.7)$$

Tento výsledek platí na intervalu $|\alpha|^2 \in (0.5, 1)$. To je z toho důvodu, že výraz (4.6) určuje asymptotiku pouze jednoho z vlastních čísel, ale pro druhou část intervalu souřadnic počátečních vlnových funkcí se toto číslo stává menším. V oblasti parametrů $|\alpha|^2 \in (0, 0.5)$ je tedy

$$|\langle \uparrow | \phi_S^{\rangle} \rangle|^2 = 1 - \left(\frac{1+z}{1+\frac{3z}{2}} \right)^2 = \frac{z(\frac{5z}{4} + 1)}{(\frac{3z}{2} + 1)^2}, \quad (4.8)$$

kde z má stejný význam jako výše. Jak již bylo diskutováno, veličina $|r|^2$ v konečnědimenzionálních prostorech díky kvaziperiodicitě stále jemně fluktuuje a nikdy se nevynuluje. Nicméně, pokud ji budeme v asymptotě považovat za nezávislou na čase, což je velmi hrubý předpoklad, lze ji vzít za



Obrázek 4.6: Evoluce $\hat{\rho}_s$ ve vnitřku Blochovy sféry pro proměnný počáteční stav. Levá část obrázku odpovídá souřadnici počátečního stavu $\alpha = \sqrt{0.4}$, prostřední $\alpha = \sqrt{0.5}$ a pravá $\alpha = \sqrt{0.6}$.

parametr křivek (4.6) a (4.8) a je s ní možno provést fit. Výsledné křivky s parametrem

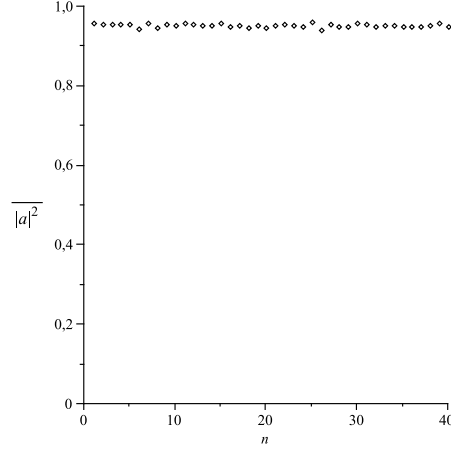
$$|r|^2 = 0,039 \pm 0,005.$$

jsou proloženy body v grafu (4.5). Jak je vidět, pro krajní body panuje dobrá shoda, ale pro oblast počátečních vektorů okolo $\frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle$ tento jednoduchý postup selhává. Pro tuto oblast jsou křivky v 4.5 pouze naznačeny.

Graf 4.5 se dá snáze interpretovat, pokud si pod jednotlivými body představíme odpovídající průběhy evoluce matice hustoty systému vynesené na vnitřku Blochovy sféry. Tři takové body zobrazuje graf 4.6. Všechny pohledy jsou mírně svrchu, aby byl vidět vývoj v blízkosti osy z . Z této volby perspektivy potom není patrné, že vývoj opět probíhá přibližně v rovině $z = konst.$ (opět tomu tak ale není zcela). V sekci o Blochově sféře bylo vyvozeno, že pro veličinu $|a|^2 = |\langle \uparrow | \phi_S^> \rangle|^2$ platí jeden ze vztahů (2.16), (2.17). Jelikož b_3 , vynášené jako souřadnice z , se v čase příliš nemění, je $|\vec{b}|$ přímo úměrné vzdálenosti stavu redukované matice hustoty od osy z . Veličina $|a|^2$ tím pádem rovněž poskytuje informaci o vzdálenosti od osy z .

Z dosavadních výsledků je vidět, že průběh evoluce velmi výrazně závisí na počátečním stavu systému. Při výpočtech jsou ale náhodně voleny hamiltoniány prostředí v interakční části celkového hamiltoniánu (3.2). Jak tyto volby ovlivňují vývoj systému? Pro pět hodnot souřadnic počátečních funkcí z grafu 4.5 bylo provedeno čtyřicet cyklů výpočtů, pokaždé s náhodně zvolenými hamiltoniány prostředí. Zjišťovala se opět časová střední hodnota výrazu $|\langle \uparrow | \phi_S^> \rangle|^2$ a hledaným výsledkem bylo, nakolik se může tato veličina lišit pro různé náhodné volby $H_{e\uparrow}$ a $H_{e\downarrow}$. Ukázalo se, že největší citlivost na těchto parametrech vykazoval systém poblíž stavu $\frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle$. I tak ale

činila směrodatná odchylka od průměrné hodnoty všech čtyřiceti výsledků pouze $\sigma = 0,01$. Vliv náhodně volené energetické báze prostředí je tak komparativně menší než vliv změn v iniciálním stavu systému. Tato skutečnost je pravděpodobně pouze záležitostí dimenzí, pro rostoucí rozměr prostředí N by se vliv jeho počátečních podmínek dále umenšoval.

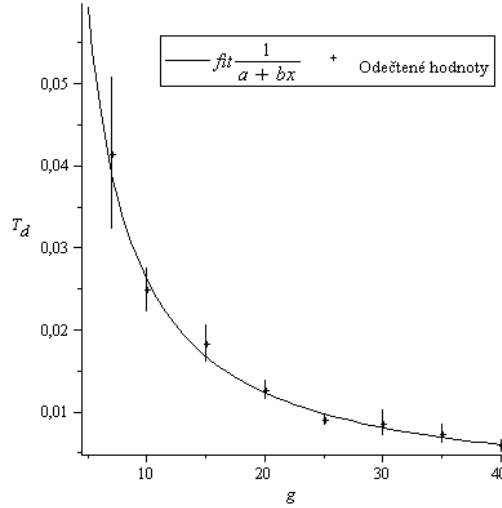


Obrázek 4.7: Ukázka vlivu různých hamiltoniánů prostředí na asymptotiku Schmidtových vektorů při $|\phi\rangle_s = \sqrt{0.7} |\uparrow\rangle + \sqrt{0.3} |\downarrow\rangle$. Hamiltoniány generované metodou GOE jsou číslovány indexem n ($= 1 \dots 40$) na vodorovné ose a k nim odpovídající hodnota $\overline{|a|^2}$ je vynesena na svislé ose.

Asymptotika Schmidtových vektorů není jedinou zajímavou veličinou, jejíž závislost na parametrech lze v modelu sledovat. Z pohledu využití dekoherence k vysvětlení procesu měření a kolapsu vlnové funkce by bylo užitečné moci něco pronést o závislosti rychlosti relaxace systému na velikosti dimenze prostředí N , případně na síle interakce, v našem případě vyjádřené konstantou g . Nicméně, čas potřebný k dekoherenci T_d je minimálně v rámci této práce dosti vágně definovaná veličina. V grafu 4.3 by se jí dal označit pomyslný bod, kdy se křivka vyrovnává a dále se již příliš nemění, i při hladkém průběhu dekoherence je však odečítání takového bodu dosti obtížné. Zbylá část této sekce má tak spíše orientační charakter s cílem naznačit vliv parametrů na čas relaxace. Pro hlubší rozbor a potvrzení pozorovaných závislostí by bylo potřeba rigoróznějšího kritéria pro určení T_d .

Pro studium závislosti T_d na g byl vybrán počáteční stav systému $|\phi\rangle_s = \sqrt{0.9} |\uparrow\rangle + \sqrt{0.1} |\downarrow\rangle$, jelikož pro hodnotu takto blízkou ketu $|\uparrow\rangle$ dochází k hladkému výběru Schmidtovy báze a hodnoty T_d lze jednodušeji odečítat.

Pro každý bod bylo provedeno pět simulací a vynesena je průměrná hodnota a směrodatná odchylka vypočtená z obdržného souboru. Vliv na velikost chyby mají kromě problematického odečtu hodnoty i hamiltoniány prostředí, které jsou pro vždy nově náhodně volené (v tomto smyslu je přes ně výsledný bod vystředován).



Obrázek 4.8: Graf závislosti T_d na g .

Fitovanou křivkou je $T_d(g) = \frac{1}{a+bg}$, hodnoty parametrů vyšly:

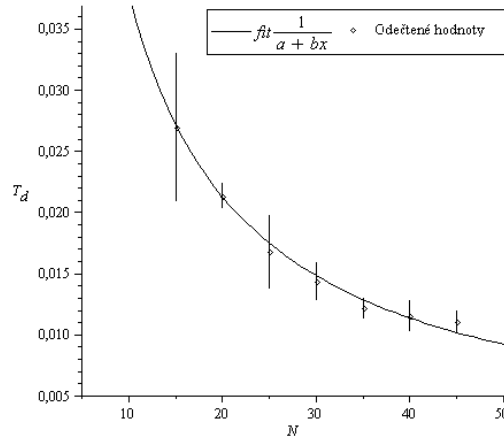
$$a = -4.47 \pm 3.21, \quad b = 4.27 \pm 0.20.$$

Výběr tohoto typu křivky byl motivován dobrou shodou se získanými body.

Obdobným způsobem byla zkoumána i závislost T_d na dimenzi prostředí N . Iniciální stav systému byl vybrán stejný jako výše, tedy $|\phi\rangle_s = \sqrt{0.9} |\uparrow\rangle + \sqrt{0.1} |\downarrow\rangle$. Hodnota interakční síly je držena na hodnotě $g = 15$, konstanta stojící u self-hamiltoniánů je v stejné jako v celé této sekci rovna $h_0 = 0.1$. Opět bylo pro každý bod provedeno pět nezávislých simulací. Pro nízké hodnoty N už nebylo možno T_d dobře odečíst, data proto končí u $N = 15$.

Jako nejvhodnější křivka se opět jevila $T_d(g) = \frac{1}{a+bg}$ s parametry:

$$a = 6.0 \pm 2.9, \quad b = 2.05 \pm 0.13.$$



Obrázek 4.9: Graf závislosti T_d na N .

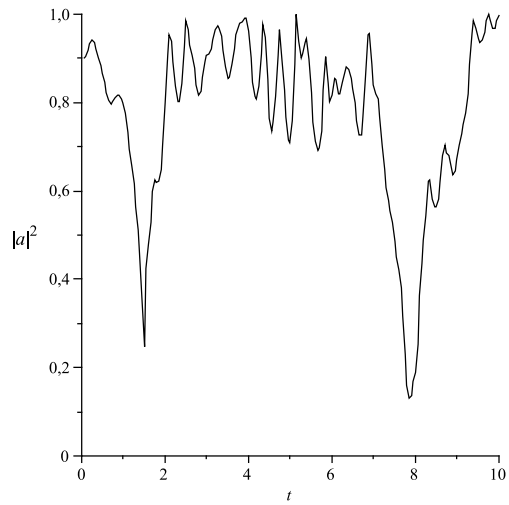
4.3 Ukázky dalších typů evolucí

Až do této chvíle jsme zkoumali typy vývoje, které byly navrženy pro sledování průběhu dekoherence. Dominantním členem v hamiltoniánu (3.2) byla interakční část, která zajišťovala dostatečně rychlé ustálení Schmidtovské báze. Takový hamiltonián je ale poměrně speciální. Nabízí se otázka, jak bude evoluce vypadat pro jiný rozsah parametrů nebo dokonce pro nějaký obecný hamiltonián. Představu o chování při široké třídě parametrů za dimenze prostředí držené na hodnotě $N = 12$ si lze udělat z článku [1]. V této práci je také naznačeno, že s rostoucím poměrem h_0/g a s klesajícím N přestává docházet k vytváření dlouhodobých korelací mezi systémem a prostředím a Schmidtovy trajektorie nekonvergují. To potvrzují i simulace provedené v rámci této bakalářské práce. Jako příklad uveďme vývoj s následujícími parametry:

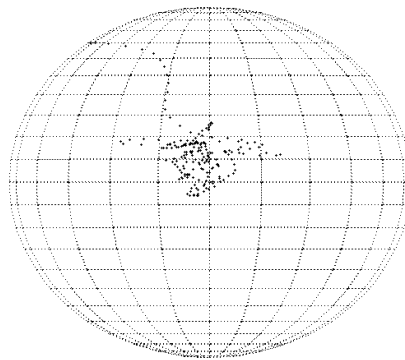
$$h_{0s} = h_{0e} = g = 1, \quad N = 25.$$

Iniciální stav systému je položen $|\phi\rangle_s = \sqrt{0.9} |\uparrow\rangle + \sqrt{0.1} |\downarrow\rangle$. Graf 4.10 ukazuje výsledek. Vynášenou veličinou je stejně jako dříve $|\langle \uparrow | \phi_S^{\downarrow} \rangle|^2 = |a|^2$. Časová škála byla tentokrát zvolena delší než v předchozích ukázkách, aby lépe vyniklo nekonvergentní chování.

Jakékoliv korelace, které vytvoří interakční hamiltonián, jsou rozrušeny působením hamiltoniánů působících odděleně na oba subsystémy. Názorná je i ukázka stejného vývoje vyneseno do Blochovy sféry na obrázku 4.11.



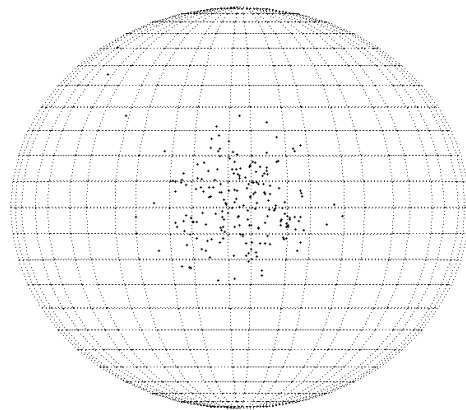
Obrázek 4.10: Vývoj $|\langle \uparrow | \phi_S^{\rightarrow} \rangle|^2$ v režimu $g \sim h_0$.



Obrázek 4.11: Vývoj $\hat{\rho}_s$ v režimu $g \sim h_0$ vyneseny do vnitřku Blochovy sféry.

Nejvýraznějším rozdílem oproti grafům typu 4.4 je evoluce výrazně mimo rovinu konstantního z . Stejně jako v odkazovaném grafu, vývoj zde z počátečního čistého stavu také směřuje k ose z , ale tam potom výrazně osciluje ve všech třech prostorových směrech. Systém se po většinu času nachází poblíž středu koule, tedy v blízkosti stavu s nejvyšší entropií. Takovýto typ evoluce už je blízký obecné evoluci, vyvolané náhodně voleným hamiltoniánem. Podívejme se na tento případ.

Dimenze je držena stejná jako výše, tj. $N = 25$, stejný je i iniciální stav systému. Hamiltonián je tentokrát zvolen jako $2N \times 2N$ náhodná symetrická matice generovaná pomocí GOE metody. Graf 4.12 ukazuje výsledek. Tento výpočet byl proveden vícekrát vždy s novým hamiltoniánem a výsledky se kvalitativně neliší (pouze se mírně posouvá „těžiště“, okolo kterého $\hat{\rho}_s$ fluktuuje). Model umožňoval sledovat i entropii systému, která se po určitém čase zespondu přimkla k hodnotě $\ln 2$ (viz kapitolu o Blochově sféře) a po zbytek evoluce pod ní oscilovala.



Obrázek 4.12: Vývoj matice $\hat{\rho}_s$ podrobené náhodnému hamiltoniánu.

Kapitola 5

Závěr

Práce byla zahájena představením pojmu a mechanismu dekoherence a osvětlením rozdílu mezi koherentní směsí a klasickým statistickým souborem. Ve druhé kapitole byl zaveden formalismus nutný ke zkoumání celého jevu, včetně klíčových pojmů redukované matice hustoty a Schmidtova rozkladu. Představena byla i Blochova sféra jako užitečný nástroj pro zobrazování evoluce dvouhladinového systému. Ve třetí kapitole byl podrobně popsán použitý hamiltonián a byl semianalyticky odhadnut vývoj redukované matice hustoty.

Ve většině čtvrté kapitoly byl zkoumán vývoj systému podléhajícímu hamiltoniánu s dominantní interakční složkou. Byly sledovány vlivy různých parametrů modelu na průběh evoluce. Z výsledků se dá soudit, že konvergence Schmidtových trajektorií příliš nezávisí na počátečním stavu prostředí a na volených hamiltoniánech H_{0e} , $H_{e\uparrow}$ a $H_{e\downarrow}$ a naopak silně závisí na dimenzi prostředí N , relativní síle interakce g/h_0 a na počátečním stavu systému. Na závěr byly představeny příklady evolucí, které zastupují obecnější typy hamiltoniánů a které nevykazují vznik jakékoli preferované báze. Tato skutečnost naznačuje, že k pozorování dekoherence je zapotřebí speciální tvar hamiltoniánu.

Literatura

- [1] Albrecht A., 1992, Phys. Rev. **D46**, 5504–5520.
- [2] Albrecht A., 1993, Phys. Rev. **D48**, 3768–3778.
- [3] Joos, E., H. D. Zeh, 1985, Z. Phys. **B59**, 223-243.
- [4] Mehta, M. L., 1991, *Random Matrices*, 3rd ed. New York: Academic Press.
- [5] Schlosshauer M. A., 2007, *Decoherence and the Quantum-To-Classical Transition*, Springer, Berlin.
- [6] Zeh H.D., 1992, *The physical Basis for the Direction of Time*, Springer, Berlin.
- [7] Zurek, W. H., 1981, Phys. Rev. **D24**, 1516–1525.
- [8] Zurek W. H., 2003, Rev. Mod. Phys., **75**(3).
- [9] Zurek W. H., 2003, *Decoherence and the Transition from Quantum to Classical - Revisited*, eprint arXiv:quant-ph/0306072v1.