Superoperátorová reprezentace

Formální podobnost mezi Schrödingerovou a Liouvillo–von Neumannovou rovnicí

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} H |\Psi(t)\rangle$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \hat{\rho}(t)] = -\frac{i}{\hbar}(\text{něco působící na})\,\hat{\rho}(t)$$

tím co působí je komutátor

V reprezentaci

elementy vektoru

$$\frac{\partial}{\partial t} c_n(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_m H_{nm}\, c_m(t)$$

matice

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{nm}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_k \left(H_{nk}\rho_{km} - \rho_{nk}H_{km}\right)$$

Přepišme druhou rovnici tak, aby se v ní sčítalo přes oba indexy ρ_{nm}

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{nm}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_{kl}\left(H_{nk}\delta_{ml}\rho_{kl} - \rho_{lk}H_{km}\delta_{ln}\right)$$

$l \Leftrightarrow k$

$$= -\frac{i}{\hbar}\sum_{kl}\underbrace{\left(H_{nk}\delta_{ml} - H_{lm}\delta_{kn}\right)}_{\mathcal{H}_{nmkl}}\rho_{kl}(t)$$

Naše rovnice vypadá

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{(nm)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_{(kl)}\mathcal{H}_{(nm)(kl)}\,\rho_{(kl)}$$

Indexy jsou jen značky: můžeme udělat zobrazení

$$(n,m) \to I$$

napč:

$$\begin{array}{llll} (0,0)\to 0 & (1,0)\to 4 & & \\ (0,1)\to 1 & (1,1)\to 5 & \text{atd.} \\ (0,2)\to 2 & (1,2)\to 6 & \\ (0,3)\to 3 & (1,3)\to 7 & \end{array}$$

Můžeme psát

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho_I(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_J \mathcal{H}_{IJ}\rho_J}$$

matice

vektor

Máme vektory $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ (prvky Hilbertova prostoru)

matice/operátory $\hat{A}, \hat{\rho}$, které působí na vektory z Hilbertova prostoru

zároveň tvoří tzv. Liouvilleův prostor

Na Liouvilleově prostoru působí

tzv. superoperátory!

= operátory na operátorech

Superoperátory mají 4 indexy nebo dva multi-indexy

$$\mathcal{H}_{klmn} \to \mathcal{H}_{IJ}$$

Liouvillián:

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{\rho}(t)\right] \equiv -i\mathcal{L}\hat{\rho}(t)$$

$$\mathcal{L}\hat{A} \equiv \frac{1}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{A}\right] \leftarrow \text{definice}$$

v bázi

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ij}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_{k}\left(H_{ik}\rho_{kj} - \rho_{ik}H_{kj}\right)$$

$$= -i\sum_{kl}\mathcal{L}_{ijkl}\rho_{kl}(t)$$

Evoluční superoperátor:

Schrödingerova rovnice

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}H|\Psi(t)\rangle \Rightarrow \quad |\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$$

analogicky

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = -i\mathcal{L}\hat{\rho}(t) \Rightarrow \quad \hat{\rho}(t) = \mathcal{U}(t)\hat{\rho}(0)$$

zároveň víme, že platí

$$\hat{\rho}(t) = U(t)\hat{\rho}(0)U^{+}(t)$$

Takže:

$$\boxed{\mathcal{U}(t)\hat{A} = U(t)\hat{A}U^{+}(t)}$$

Použijme platnost $\mathcal{U}(t)$

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = -i\hat{\mathcal{L}}\hat{\rho}(t)$$

$$\longrightarrow \frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = -i\hat{\mathcal{L}}\hat{\rho} + R\hat{\rho}$$

relaxační jevy, které nelze popsat Liouvilliánem a nevyskytují se ve Schrödingerově rovnici.

$$\mathcal{U}(t) = e^{-i\hat{\mathcal{L}}t}$$

$$\longrightarrow \mathcal{U}(t) = e^{-i(\mathcal{L}+iR)t}$$

Pomocí $\mathcal{U}(t)$ lze vyjádřit libovolný časový vývoj redukované matice hustoty.