Očekávané střední hodnoty

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle \quad \leftarrow \text{obecný návod}$$

otevřené systémy: $\hat{A} = \hat{A}_S \otimes \mathbb{1}_B$

Pozn.: $\left.\begin{array}{l} \mathbb{1}_B \otimes \hat{A}_S \\ \hat{A}_S \otimes \mathbb{1}_B \end{array}\right\}$ je jedno

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{A}_S \otimes \mathbb{1}_B | \Psi(t) \rangle = \sum_{nm} c_n^*(t) \langle \varphi_n(t) | \langle n | \hat{A}_S \otimes \mathbb{1}_B$$

$$\times | m \rangle | \varphi_m(t) \rangle c_m(t)$$

$$= \sum_{nm} \underline{c_n^*(t) c_m(t)} \langle n | \hat{A}_S | m \rangle \underline{\langle \varphi_n(t) | \varphi_m(t) \rangle}$$

$$= \sum_{nm} \underbrace{c_n^*(t) c_m(t) \langle \varphi_n(t) | \varphi_m(t) \rangle}_{\varrho_{mn}(t)} \underbrace{\langle n | \hat{A}_S | m \rangle}_{A^S_{nm}}$$

$A^S_{nm} \leftarrow$ maticové elementy operátoru $\hat{A}_S$

$\varrho_{mn}(t)$:
- operátor na Hilbertově prostoru systému $\mathcal{H}_S$
- nese informaci o stavu systému
- nese relevantní informaci o stavu „lázně"

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{nm} \varrho_{mn}(t) A^S_{nm} = \sum_m \Big(\underbrace{\sum_n \varrho_{mn}(t) A^S_{nm}}_{} \Big)$$

stopa $\qquad \rightarrow$ maticové násobení

$$= Tr\{\hat{\rho}(t)\hat{A}_S\}$$

Redukovaný statistický operátor

nebo (jeho elementům) Redukovaná matice hustoty

Tento operátor shrnuje veškerou informaci o stavu systému S v interakci s B

Redukovaný statistický operátor

Zatím pracujme s elementy

$$\rho_{mn}(t) = c_n^*(t)\, c_m(t)\, \langle \varphi_n(t) | \varphi_m(t) \rangle$$

RDM obsahuje tak „vystředovanou" informaci o lázni

Redukovaný statistický operátor s elementy

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{nm} \rho_{mn}(t)\, |m\rangle\langle n|$$

$$= \sum_m c_m(t)|m\rangle \sum_n c_n^*(t) \langle n| \langle \varphi_n(t) | \varphi_m(t) \rangle$$

vložíme $\sum_a |a\rangle\langle a|$ báze $\mathcal{H}_B$

$$= \sum_a \sum_m c_m(t)|m\rangle \sum_n c_n^*(t)\langle n| \langle \varphi_n(t)|a\rangle\langle a|\varphi_m(t)\rangle$$

$$= \sum_a \left(\sum_m c_m(t)|m\rangle\langle a|\varphi_m(t)\rangle\right)\left(\sum_n c_n^*(t)\langle n|\langle\varphi_n(t)|a\rangle\right)$$

$$= \sum_a \langle a|\underbrace{\left(\sum_m c_m(t)|\varphi_m(t)\rangle|m\rangle\right)}_{|\Psi(t)\rangle}\underbrace{\left(\sum_n c_n^*(t)\langle n|\langle\varphi_n(t)|\right)}_{\langle\Psi(t)|}|a\rangle$$

stavový vektor

$$= Tr_B\left\{\underbrace{|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|}_{\hat{W}(t)}\right\}$$

stopa přes lázeň

statistický operátor celého systému

Tedy:

$$\boxed{\hat{\rho}(t) = Tr_B\left\{\hat{W}(t)\right\}}$$

$$\boxed{\hat{W}(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|}$$

přes lázeň vystředovaný celkový statistický operátor systému.

Pozor! Redukovaný statistický operátor má smysl jen, pokud chceme evaluovat pouze operátory z hilbertova prostoru $\mathcal{H}_S$.

Pohybové rovnice pro otevřené systémy

Pro celkový statistický operátor: Liouville – von Neumann

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

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\hat{W}(t)} = \frac{\partial}{\partial t}\Big(|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|\Big) =$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle\right)\langle\Psi(t)| + |\Psi(t)\rangle\left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi(t)|\right)$$

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

$$= -\frac{i}{\hbar}\Big(H\hat{W}(t) - \hat{W}(t)H\Big) = \boxed{-\frac{i}{\hbar}\left[H, \hat{W}(t)\right]}$$

Časový vývoj

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$$

$$t_0 = 0$$

$$U(t) \equiv U(t,0) = U(t,t_0) \equiv U(t-t_0)$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{W}(t)} = U(t)|\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|U^{\dagger}(t)$$

$$= \boxed{U(t)\hat{W}(0)U^{\dagger}(t)}$$

dopředný časový vývoj je zprostředkován evolučním operátorem působícím zleva i zprava.

Zprava působí hermitovsky sdružený $U(t)$.

Pohybová rovnice pro $\hat{\rho}(t) = Tr_B\{\hat{W}(t)\}$

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

$$= -\frac{i}{\hbar} tr_B\{H\hat{W}(t)\} + \frac{i}{\hbar} tr_B\{\hat{W}(t)H\}$$

nemůžeme udělat cyklické pohození operátorů pod tracem.

speciální (velmi obecný) tvar H

$$H = H_S + H_B + H_{S-B}$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\left(tr_B\{H_S\hat{W}\} - tr_B\{\hat{W}H_S\}\right)$$

$$-\frac{i}{\hbar}\left(tr_B\{H_B W\} - tr_B\{W H_B\}\right) - \frac{i}{\hbar}\left(tr_B\{H_{S-B}W\} - tr_B\{W H_{S-B}\}\right)$$

$$= -\frac{i}{\hbar}[H_S, \hat{\rho}(t)] + \text{členy, které nelze převést na } \rho(t)$$

Podrobněji bude o těchto členech

Obecně vypadá pohybová rovnice takto:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_S, \hat{\rho}(t)] + \hat{R}(\hat{\rho}(t); t)}$$

Operátor a také funkcionál $\hat{\rho}(t)$