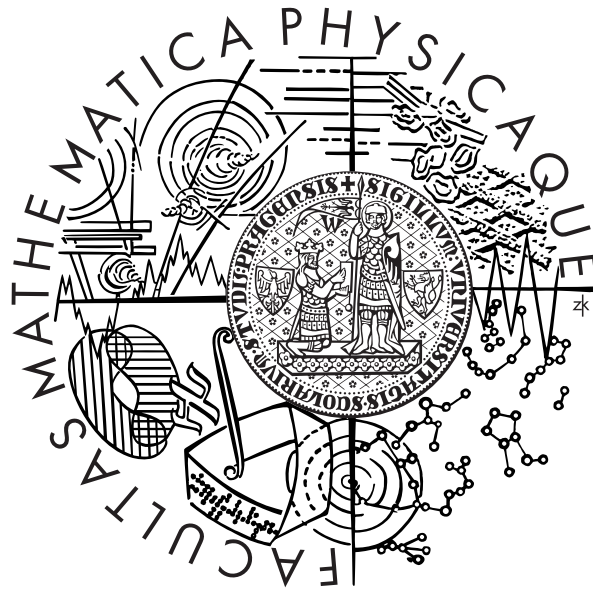


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE



Jiří Pešek

Časová inverze a fluktuace v otevřených kvantových systémech

Time-reversal and fluctuations in open quantum systems

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Karel Netočný, Ph.D.
Studijní program: Fyzika

2008

Rád bych poděkoval svému vedoucímu RNDr. Karlu Netočnému, Ph.D., za čas, rady a velkou dávku trpělivosti při vedení diplomové práce. Dále bych pak rád poděkoval všem svým přátelům za podporu v dobách, kdy práce neubývala tak, jak by měla, a v neposlední řadě bych rád vyjádřil poděkování své rodině za jejich bezmeznou podporu.

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

V Praze dne 1.9.2008

Jiří Pešek

Název práce: Časová inverze a fluktuace v otevřených kvantových systémech

Autor: Jiří Pešek

Katedra (ústav): Ústav teoretické fyziky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Karel Netočný, Ph.D.

e-mail vedoucího: netocny@fzu.cz

Abstrakt: Cílem této práce je analyzovat chování otevřených kvantových systémů vzhledem k časové inverzi. Relevance tohoto problému je dána nedávnými objevy exaktních symetrií ve fluktuacích termodynamických veličin, jako jsou teplo a práce, které jsou důsledkem symetrií vůči časové inverzi pro klasické otevřené systémy. V této práci ukážeme, že analogií symetrie dráhové míry vůči časové inverzi je na kvantové úrovni jistá symetrie dekoherenčního funkcionálu, která je ekvivalentní obecné podmínce detailní rovnováhy v kvantových systémech. Oproti klasickým situacím platí, že proces měření netriviálně ovlivňuje dynamiku systému. Důsledkem toho je, že narušení časové symetrie v kvantových procesech nelze jednoduše interpretovat pomocí veličin jako je disipované teplo, což může vést k narušení klasických fluktuačních relací.

Klíčová slova: časová inverze, detailní rovnováha, kvantová disipace, dekoherenční funkcionál

Title: Time-reversal and fluctuations in open quantum systems

Author: Jiří Pešek

Department: Institute of Theoretical Physics

Supervisor: RNDr. Karel Netočný, Ph.D.

Supervisor's e-mail address: netocny@fzu.cz

Abstract: The objective of this thesis is to analyze the behaviour of open quantum systems with respect to the time-reversal. Our motivation comes from recently discovered relations between time-reversal symmetry (and its breaking) for classical systems and the symmetries in the fluctuations of thermodynamical quantities such as work or heat. Here we show that time-reversal symmetry of the classical path-distribution has a quantum counterpart on the level of the decoherence functional, which is equivalent to the quantum detailed balance condition. In contrast to the classical situation, the measurement process influences the dynamics in general. As a consequence, the time-reversal breaking term in the diagonal part of the decoherence functional may not have an immediate interpretation in terms of a dissipated heat, which may yield to violation of classical fluctuation relations.

Keywords: time-reversal, detailed balance, quantum dissipation, decoherence functional

*Bad people are punished by society's laws,
and good people are punished by Murphy's Law.*

— Georgia L. Lass [Dead Like Me]

Obsah

1	Úvod	1
2	Úvod do klasické nerovnovážné fyziky	4
2.1	Obecný formalismus	4
2.1.1	Mikrostavy a makrostavy	4
2.1.2	Dynamika na fázovém prostoru	6
2.2	Entropie a její změny	9
2.2.1	Entropie	9
2.2.2	Dráhová míra a H -teorém	11
2.3	Markovovské modely otevřených systémů	13
2.4	Od klasického ke kvantovému popisu	17
2.4.1	Makrostavy v kvantové mechanice	17
2.4.2	Dynamika v kvantové mechanice, entropie a fluktuační relace	19
3	Otevřené kvantové systémy	22
3.1	Režim slabé vazby	22
3.2	Vlastnosti generátorů v limitě slabé vazby	27
3.2.1	Stacionární stav	28
3.2.2	Detailní rovnováha	30
4	Symetrie dekoherenčního funkcionálu při časové inverzi	34
4.1	Detailní rovnováha pro obecné dynamiky	34
4.2	Časová inverze a disipativní dynamika	36
4.3	Dekoherenční funkcionál	38
5	Modelové výpočty	42
5.1	Matematická formulace modelu	42
5.1.1	Blochova reprezentace projektorů	43
5.1.2	Obecný Lindbladtův tvar	45
5.1.3	Matice hustoty a vektor hustoty	46
5.2	Dvouhladinový model, $N = 2$	50
5.2.1	Konstrukce dekoherenčního funkcionálu	53
5.2.2	Příklad: Režim čisté dekoherence	62
5.2.3	Příklad: Disipace	68
6	Závěr	73

Dodatky	75
A Důkaz vztahu mezi Gibbsovou a Shannonovou entropií	75
B Vlastnosti antilineárních operátorů. Časová inverze.	77
C Strukturní koeficienty	79
C.1 Seznam strukturních koeficientů	79
C.1.1 Spin $\frac{1}{2}$ tj. $N = 2$	79
C.1.2 Spin 1 tj. $N = 3$	79
C.2 Struktura matice M	80

Kapitola 1

Úvod

Role statické fyziky a nerovnovážných procesů

Fyzika makroskopických procesů se od počátku vyvíjela nezávisle na fyzice hmotných bodů obsažené v Newtonově kinematické teorii, Maxwellově teorii elektromagnetického pole, či později v kvantových teoriích zformulovaných Schrödingerem, Heisenbergem, Diracem, Schwingerem, Feynmanem a dalšími. Všechny tyto teorie v zásadě pracují s úplným popisem uzavřeného systému a jejich rovnice jsou deterministické a v jistém smyslu vždy symetrické vůči záměně minulosti a budoucnosti.

Většina systémů kolem nás jsou však charakteristické velkým počtem stupňů volnosti, který nejenže vylučuje plné analytické či numerické řešení pohybových rovnic, ale v principu je nelze popisovat jinak než vhodně zvoleným a typicky malým souborem makroskopických parametrů. Časový vývoj těchto makroskopických pozorovatelných veličin může být deterministický nebo stochastický, a narozdíl od zákonů mikrosvěta většina jevů okolo nás probíhá nevratným způsobem. Typickými příklady jsou materiálová fyzika a mechanika tekutin. Další základní vlastností makroskopických systémů je, že se zpravidla nevyvíjejí izolovaně, ale interagují se svým okolím — dochází k výměně tepla apod. Mnohé makroskopické pohybové zákony jsou dávno známy: příkladem budiž Navier-Stokesovy rovnice mechaniky kontinua nebo Maxwell-Lorenzovy rovnice popisující interakci elmag. pole s hmotou. Vysvětlení, proč tyto nevratné makroskopické zákony nejsou v rozporu s mikroskopickými zákony, bylo jedním z důležitých objevů 19. století, díky průkopnickým pracím Maxwella a Boltzmannova. 20. století potom přineslo systematickou teorii tepla — statistickou fyziku — a dalo základy porozumění chování systémů složených z velkého počtu částic.

Role fluktuací

Základní veličinou, která v jistém smyslu “měří”, kolika různými mikroskopickými stavy lze zrealizovat tentýž makroskopický stav, je entropie a její ztotožnění s Clausiovou entropií (Boltzmann) udělalo ze statistické fyziky skutečnou mikroskopickou teorii k termodynamice. Druhý termodynamický zákon pak říká, že tato entropie v libovolném uzavřeném systému typicky pouze roste a pravděpodobnost jejího poklesu je v makroskopických systémech naprosto zanedbatelná, stejně jako pravděpodobnost makroskopických fluktuací. S rozvojem technologie na mikro- a nanometrové škále vyvstala otázka, jakou roli fluktuace skutečně hrají — ať už konstruktivní nebo naopak destruktivní — jaké zákony pro ně platí a jakým způsobem je počítat. Původní myšlenky Boltzmannova a jeho současníků si vyžádaly nový pohled a revizi.

Jedním z výsledků těchto snah bylo nové porozumění vztahu mezi změnami entropie a narušením symetrie vůči časové inverzi: změna entropie podél libovolného termodynamického děje je mírou jeho nevratnosti a současně kvantitativně určuje pravděpodobnost poklesu entropie podél náhodné realizace děje. Tyto a podobné úvahy vedli k nalezení nových symetrií ve flukтуаčních zákonech pro změny entropie, disipovaného tepla, práce, apod. (Evans, Gallavotti, Cohen, Jarzynski, ...). Na matematické úrovni pak problém spočívá v důkladném porozumění, jakou roli hraje symetrie vůči časové inverzi a její narušení v otevřených systémech modelovaných jako náhodné procesy.

Od klasické ke kvantové teorii

Základním nedostatkem výše zmíněných nových výsledků je, že jsou zpravidla omezeny na systémy, které se chovají klasicky — typicky jde o mezoskopické procesy, které lze dobře popsat stochastickými (většinou markovovskými) modely. Rozšíření na ryze kvantové systémy, v nichž kvantové koherence hrají nezanedbatelnou roli, není dosud uspokojivě vyřešený problém a existují různé (i vzájemně protikladné) návrhy a postupy. Základní problém spočívá v tom, že disipace termodynamicky otevřených systémů je popsána veličinami, které nezávisí pouze na konkrétním termodynamickém stavu (jako je např. energie, magnetizace, nebo entropie), ale na celé realizaci (termodynamické trajektorii). Na rozdíl od klasických systémů, pojem trajektorie ztrácí dobrý smysl v kvantovém případě a to vede k nejednoznačné definici pojmů jako je fluktuace tepla apod.

Existuje několik způsobů, jak tento problém překlenout. Jednou možností je úplný popis celého termodynamického systému, včetně zahrnutí rezervoárů s nimiž systém interaguje. Řešení spočívá v tom, že teplo vyměněné s každým jednotlivým rezervoárem je v tomto popisu rovno změně energie tohoto rezervoáru, jinými slovy, teplo se tak opět stává stavovou veličinou (resp. rozdílem). Nevýhoda je v tom, že rezervoár je nekonečný systém, což popis výrazně komplikuje. Druhou základní možností je omezit se pouze na (typicky malý) systém a jeho (kvantovou) stochastickou dynamiku a pokusit se rozšířit známé metody pro klasické stochastické procesy. Toto je také cesta, kterou sledujeme v této práci.

Cíle a výsledky

Tato práce si klade za cíl zformulovat základní problémy popisu otevřených kvantových systémů z hlediska jejich vlastností vůči časové inverzi a nastínit některá řešení. Protože problém sám je velmi složitý, omezujeme se jen na některé vybrané aspekty a otázky. Předpokládáme, že systém lze popsat jako kvantový markovovský proces představující zobecnění klasických markovovských modelů, a že popisuje efektivní dynamiku systému navázaného slabě na jeden resp. více rezervoárů. Tato tzv. slabá vazba patří mezi režimy kvantové dynamiky, které jsou nejlépe teoreticky zvládnuté. Mikroskopická dynamika je časově symetrická a jejím důsledkem na úrovni kvantového markovovského procesu je (kvantová) detailní rovnováha. Protože jejím klasickým důsledkem je symetrie dráhové míry vůči časové inverzi na úrovni trajektorií, zkoumáme, jak se tato symetrie projeví pro kvantové zobecnění dráhové míry — tzv. dekoherenční funkcional. Výsledkem je jistá symetrie tohoto funkcionalu, kterou dále diskutujeme a porovnáváme s klasickým případem.

Diagonální elementy dekoherenčního funkcionalu mají specifický fyzikální význam: odpovídají pravděpodobnosti trajektorie generované spojitým měřením ve zvolené bázi. Triviálním režimem je v případě uvažované třídy modelu měření v energetické bázi systému, neboť ne-

ovlivňuje dynamiku systému — diagonální elementy matice hustoty v energetické bázi se vyvíjejí nezávisle podle klasických markovovských pravidel. Netriviální případy, pro něž neexistuje přímá klasická analogie, odpovídají měřením v jiné (obecně časově závislé) bázi. Jak ukazujeme, v těchto případech se výsledky liší od klasických a vrhají tak do určité míry nové světlo na omezení a předpoklady, na nichž stojí dnešní — víceméně klasické — porozumění vztahu narušení symetrie vůči časové inverzi, disipace a nevratnosti. Tyto neklasické modifikace demonstrujeme prostřednictvím nejjednodušších modelů otevřených systémů. Skutečné systematické porozumění těmto kvantovým modifikacím však zůstává otevřeným problémem a bude vyžadovat další studium.

Kapitola 2

Úvod do klasické nerovnovážné fyziky

Cílem bude shrnout základní principy, na nichž stojí fyzika nerovnovážných procesů, a především ukázat, v jakém smyslu v nich dochází k disipaci a změnám entropie. Na závěr uvedeme některé příklady flukтуаčních relací a ukážeme jejich vztah k časové symetrii nerovnovážných systémů. V této části budeme postupovat především ve shodě s [MN03] a [Mae03].

2.1 Obecný formalismus

V této úvodní části zrekapitulujeme standardní konstrukci klasických makrostavů a dynamiky na nich. Především nás bude zajímat konstrukce makroskopické dynamiky z mikroskopické a aspekty okolo detailní rovnováhy.

2.1.1 Mikrostav a makrostav

Začneme konstrukcí makrostavů z mikrostavů a zavedením souvisejících pojmů. Zavedme množinu všech fyzikálních stavů tohoto systému v libovolném čase t a označme ji Ω . Prvky množiny Ω nazveme mikrostavy. Dále je nutné zavést makrostavy. Na množině Ω pak mějme pravděpodobnostní míru ρ . Mějme měřitelnou veličinu A_t , která explicitně závisí na čase a její možné hodnoty jsou $a \in \mathcal{V}(A_t)$. Označme pak Ω_a množinu mikrostavů, které mají hodnotu veličiny A_t rovnu a , tj.

$$\Omega_a = \{q \in \Omega; A_t(q) = a\} \subseteq \Omega,$$

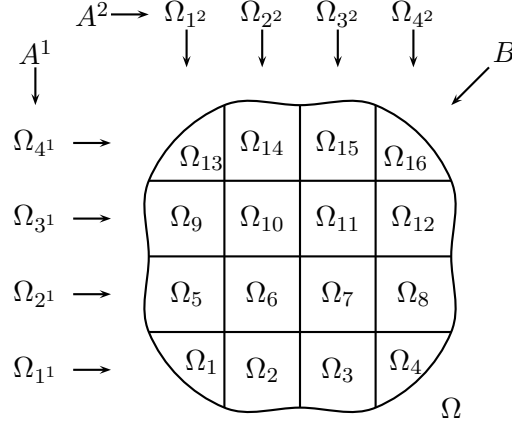
kde $A_t(q)$ je zobrazení z Ω na $\mathcal{V}(A_t)$, charakterizující veličinu A_t . Pokud pro typické Ω_a platí, že jeho velikost roste s velikostí systému charakterizované parametrem N , konkrétněji tedy pokud platí

$$\rho(\Omega_{a_t}) \sim e^{sN},$$

kde s je nějaká reálná konstanta, pak a_t nazveme makrostavy makroskopické veličiny A_t . Záměrně zde nedefinujeme slovo *typické*, protože to se může lišit případ od případu. Pokud chceme definovat sadu makroskopických veličin A_t^i , postupujeme obdobně s tím, že nejprve definujeme pomocnou pozorovatelnou B_t , jejíž jednotlivé hodnoty odpovídají sadám hodnot veličin A_t^i . Formálně pak

$$[a_t^1, a_t^2, a_t^3, \dots] \in \mathcal{V}(A_t^1) \times \mathcal{V}(A_t^2) \times \mathcal{V}(A_t^3) \times \dots = b_t \in \mathcal{V}(B_t) \Leftrightarrow \bigcap_i \Omega_{a_t^i} = \Omega_{b_t}.$$

Názorně to je ukázáno na obr. 2.1. Sada veličin A_t^i je sada makroskopických veličin tehdy, pokud je pomocná pozorovatelná B_t taktéž makroskopická. Za makrostavy v případě více makroskopických veličin pak považujeme prvky množiny Ω_{b_t} .



Obrázek 2.1: Dvojice pozorovatelných A^1, A^2 a jejich pomocná veličina B .

V klasické mechanice N -částicovému systému odpovídá volba

$$\Omega = \{(\vec{x}_i, \vec{p}_i), i = 1 \dots N\} \subseteq \mathbb{R}^{6N},$$

kde \vec{x}_i je poloha i -té částice a \vec{p}_i je její hybnost. Tedy Ω je fázovým prostorem a ρ je Liouvilleova míra. A jako příklad makroskopické veličiny pak může být střední hustota $n_{\Delta V}(\vec{x})$ v elementárním objemu ΔV okolo bodu $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$, tj.

$$n_{\Delta V}(\vec{x}) = \frac{1}{\Delta V} \sum_i \chi_{\vec{x}, \Delta E}(\vec{x}_i),$$

kde $\chi_{\vec{x}, \Delta E}(\vec{x}_i) \in \{0, 1\}$ je charakteristická funkce dané oblasti. Možné hustoty pak jsou

$$\mathcal{V}(n_{\Delta V}(\vec{x})) = \left\{ \frac{k}{\Delta V}, k = 0 \dots N \right\} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} [0, \infty),$$

kde pro každou hustotu pak objem odpovídajících mikrostavů ve fázovém prostoru je

$$\rho(\Omega_{n_{\Delta V}(\vec{x})}) \sim (\Delta V)^N.$$

Dalším příkladem modelu může být mřížový plyn, kde prostor všech fyzikálních stavů je dán

$$\Omega = \{0, 1\}^N,$$

kde N je počet uzlů mříže a ρ je pak počítací míra. Makroskopickou veličinou bude střední hustota, tentokrát definovaná jako

$$n = \frac{1}{N} \sum_i x_i,$$

kde $x_i \in \{0, 1\}$ je hodnota v uzlu i mříže. Všechny možné naměřitelné výsledky jsou pak

$$\mathcal{V}(n) = \left\{ \frac{i}{N}, i = 0 \dots N \right\} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} [0, 1],$$

a fázový objem jednotlivých makrostavů je pak dán

$$\rho(\Omega_x) = \binom{N}{xN},$$

což pro typické hodnoty $x \approx \frac{1}{2}$ se dá pro velká N rozvinout s použitím Stirlingovy formule do tvaru

$$\begin{aligned} \rho(\Omega_x) &= \frac{\sqrt{2\pi N} N^N}{\sqrt{2\pi x N} \sqrt{2\pi(1-x)N} ((1-x)N)^{(1-x)N} (xN)^{xN}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi x(1-x)N}} e^{N[-(1-x)\ln(1-x) - x\ln x]}, \end{aligned}$$

kde je patrné, že tento rozvoj platí pro všechna $x \in (0, 1)$, a tedy v typických případech velikost makrostavů je opět dána charakteristikou e^{sN} .

2.1.2 Dynamika na fázovém prostoru

Mikroskopická dynamika

Dynamika na mikrostavech je prosté, spojitě zobrazení φ_{t_0, t_1} , kde $t_0, t_1 \in \mathbb{R}$, zobrazující množinu Ω na sebe, splňující grupovou podmínku

$$\varphi_{t_0, t_2} = \varphi_{t_1, t_2} \circ \varphi_{t_0, t_1},$$

a zachovávající míru na prostoru Ω

$$\forall t_0, t_1 \in \mathbb{R} \quad \rho \circ \varphi_{t_0, t_1} = \rho,$$

tj. splňující Liouvilův teorém. Z existence inverze a grupové podmínky pak víme, že platí

$$\varphi_{t_1, t_0}^{-1} = \varphi_{t_0, t_1}.$$

A dále můžeme zavést její generátory

$$\eta_t = \lim_{\Delta t \rightarrow 0^+} \frac{\varphi_{t, t+\Delta t} - \text{id}}{\Delta t}.$$

Dynamiku pak pomocí nich můžeme přepsat do tvaru

$$\varphi_{t, t'} = \overrightarrow{\text{exp}} \left(\int_t^{t'} ds \eta_s \right),$$

kde $\overrightarrow{\text{exp}}$ značí časově uspořádanou exponenciálu.

Takto zavedená dynamika splňuje podmínku mikroreverzibility ve smyslu, že existuje tzv. *opačná dynamika* zavedená dle vztahu

$$\forall t_1 \in \mathbb{R} \quad \overleftarrow{\varphi}_{t_0+t_{fin}-t, t_{fin}} = \pi \circ \varphi_{t_0, t}^{-1} \circ \pi, \quad (2.1.1)$$

kde π je tzv. kinematická inverze (otáčí znaménka u hybností, spinů, ...), což je prosté zobrazení na Ω , je invariantní vůči míře ρ , tj.

$$\rho \circ \pi = \rho \quad (2.1.2)$$

a splňuje $\pi \circ \pi = \text{id}$. t_0, t_{fin} tvoří pevný časový interval $[t_0, t_{fin}]$, vůči kterému je dynamika zavedena. Obecně pak dosazením do definice pro každé $t_1 < t_2 \in [t_0, t_{fin}]$ platí

$$\begin{aligned} \overleftarrow{\varphi}_{t_1, t_2} &= \overleftarrow{\varphi}_{t_1, t_{fin}} \circ \overleftarrow{\varphi}_{t_2, t_{fin}}^{-1} \\ &= \pi \circ \varphi_{t_0, t_0+t_{fin}-t_1}^{-1} \circ \varphi_{t_0, t_0+t_{fin}-t_2} \circ \pi \\ &= \pi \circ \varphi_{t_0+t_{fin}-t_2, t_0+t_{fin}-t_1}^{-1} \circ \pi. \end{aligned}$$

Je patrné, že opačná dynamika, je vždy zavedena vůči nějakému počátečnímu a koncovému stavu, přičemž pro dynamiku explicitně nezávislou na čase se tato závislost vytrácí. Tedy pro dynamiku nezávislou explicitně na čase platí

$$\overleftarrow{\varphi}_{t_1} = \pi \circ \varphi_{t_1}^{-1} \circ \pi.$$

Explicitní tvar opačné dynamiky pak je

$$\overleftarrow{\varphi}_t = \overrightarrow{\exp} \left(- \int_{t_0+t_{fin}-t_2}^{t_0+t_{fin}-t_1} ds \pi \circ \eta_s \circ \pi \right).$$

V případě explicitně časově nezávislého vývoje, za předpokladu, že nezávisí na žádných vnějších magnetických polích, požadujeme po kinematické inverzi

$$\eta = -\pi \circ \eta \circ \pi,$$

čímž dostaneme

$$\overleftarrow{\varphi}_{t, t'} = \varphi_{t, t'}. \quad (2.1.3)$$

Dále se nyní omezíme na makrostavy A_t , takové že jsou vůči π invariantní tj. $A_t \circ \pi = A_t$. Trojice $(\Omega, \varphi_t, \rho)$ pak kompletně popisuje systém a jeho dynamiku.

Detailní rovnováha

Důsledkem mikroskopické reverzibility na makroskopické úrovni je detailní rovnováha pro pravděpodobnosti přechodu mezi jednotlivými makrostavy. Mějme dva makrostavy a_{t_0} , b_{t_1} a k nim odpovídající množiny mikrostavů $\Omega_{a_{t_0}}$ a $\Omega_{b_{t_1}}$. Pak pravděpodobnost, že stav a_{t_0} v čase t_0 přejde na stav b_{t_1} v čase t_1 odpovídá

$$P(a_{t_0} \rightarrow b_{t_1}) = \frac{\rho(\Omega_{b_{t_1}} \cap \varphi_{t_0, t_1}(\Omega_{a_{t_0}}))}{\rho(\Omega_{a_{t_0}})}.$$

Dále se omezme na časový rámec daný těmito časy a zavedme vůči tomuto časovému intervalu opačnou dynamiku. Pokud pak využijeme invariance míry ρ vůči časovému vývoji φ_{t_0, t_1} a časové inverzi π a budeme předpokládat, že makrostavy jsou invariantní vůči časové inverzi (tj. $\pi(\Omega_{a_{t_0}}) = \Omega_{a_{t_0}}$), pak můžeme předešlý vztah dále upravit do tvaru

$$\begin{aligned}
P(a_{t_0} \rightarrow b_{t_1}) &= \frac{\rho(\Omega_{b_{t_1}} \cap \varphi_{t_0, t_1}(\Omega_{a_{t_0}}))}{\rho(\Omega_{a_{t_0}})} \\
&= \frac{\rho(\varphi_{t_0, t_1}^{-1}(\Omega_{b_{t_1}}) \cap \Omega_{a_{t_0}})}{\rho(\Omega_{a_{t_0}})} \\
&= \frac{\rho(\overleftarrow{\varphi}_{t_0, t_1}(\pi(\Omega_{b_{t_1}})) \cap \pi(\Omega_{a_{t_0}}))}{\rho(\Omega_{a_{t_0}})} \\
&= \frac{\rho(\overleftarrow{\varphi}_{t_0, t_1}(\Omega_{b_{t_1}}) \cap \Omega_{a_{t_0}})}{\rho(\Omega_{b_{t_1}})} \frac{\rho(\Omega_{b_{t_1}})}{\rho(\Omega_{a_{t_0}})} \\
&= P(a_{t_0} \leftarrow b_{t_1}) \frac{\rho(\Omega_{b_{t_1}})}{\rho(\Omega_{a_{t_0}})},
\end{aligned}$$

kde $P(a_{t_0} \leftarrow b_{t_1})$ značí pravděpodobnost přechodu od b_{t_1} k a_{t_0} vzhledem k opačné dynamice. Ve výsledku pak máme detailní rovnováhu ve tvaru

$$\frac{P(a_{t_0} \rightarrow b_{t_1})}{P(a_{t_0} \leftarrow b_{t_1})} = \frac{\rho(\Omega_{b_{t_1}})}{\rho(\Omega_{a_{t_0}})}. \quad (2.1.4)$$

Pokud dynamika a makrostavy explicitně nezávisí na čase, tak z (2.1.3) dostaneme detailní rovnováhu ve standardním tvaru

$$\frac{P(a \rightarrow b)}{P(b \rightarrow a)} = \frac{\rho(\Omega_b)}{\rho(\Omega_a)}.$$

Makroskopická dynamika

Vždy lze zavést makroskopickou dynamiku, jako projekci mikroskopické dynamiky na makrostavy, avšak ve vší obecnosti je tato dynamika stochastická. Často však pozorujeme na makroskopických škálech deterministickou mechaniku, zde se tedy budeme věnovat podmínkám nutným k pozorování deterministické mechaniky i na makroskopických škálách. Požadavek na deterministickou mechaniku na makrostavech pak vede na požadavek na to, aby se každý makrostav vlivem mikroskopického časového vývoje zobrazil do jiného makrostavu. Pokud toto mikroskopická dynamika splňuje, pak mluvíme o tzv. *autonomní dynamice*, symbolicky pak

$$\forall t_1 > t_0, \forall a_{t_0}, b_{t_1} : \quad \varphi_{t_0, t_1}(\Omega_{a_{t_0}}) \subseteq \Omega_{b_{t_1}}.$$

Takto striktně zavedená makroskopická dynamika má však některé problémy, jmenovitě se pak jedná o:

Poincarého paradox: Poincarého paradox je tvrzení o tom, že v případě striktně autonomní dynamiky na konečném systému, konečném ve smyslu $\rho(\Omega) < \infty$, nedochází ke změnám entropie a tedy k relaxaci systému do rovnováhy, což je důsledek toho, že všechny makrostavy mají stejnou míru. Na chvíli se nyní omezíme na dynamiku s diskrétním časem. Potom platí, že systém se vrátí do původního makrostavu a nejpozději v časovém kroku $\frac{\rho(\Omega)}{\rho(\Omega_a)}$. Tj. ve vší obecnosti platí

$$\exists t_0 < t_1 < t_2 \in \mathbb{R} \exists a, b : \varphi_{t_0, t_2}(\Omega_a) \subseteq \varphi_{t_1, t_2}(\Omega_b) \subseteq \Omega_a,$$

ze které již jednoznačně plyne $\varphi_{t_0, t_1}(\Omega_a) \equiv \Omega_b$ a z invariance míry vůči dynamice nám pak plyne požadované tvrzení. *Pozn.: Explicitní časová závislost toto neovlivní.*

Lochschmidtův paradox: Lochschmidtův paradox je pak vyjádřením nekonzistence autonomní dynamiky s existencí mikroskopické reverzibility. Tj. opět nedostaneme relaxaci u uzavřených systémů, kterou často pozorujeme u reálných makroskopických systémů. Tento výsledek plyne ze stejných principů jako princip detailní rovnováhy. Mějme makrostavy a a b , pro něž platí $\varphi_{t_0, t_1}(\Omega_a) \subseteq \Omega_b$, a $x \in \Omega_a$, a dále se omezme na případ, kdy platí $\overleftarrow{\varphi} = \varphi$, pak platí

$$\forall x \in \Omega_a : \varphi_{t_0, t_1} \circ \underbrace{\pi \circ \overbrace{\varphi_{t_0, t_1}(x)}^{\in \Omega_b}}_{\in \Omega_b} \equiv \pi(x) \in \Omega_a.$$

Tj. dochází k rezonanci a tím pádem k tomu, že se makrostavy vůbec nevyvíjejí.

Problémy jež má *autonomní dynamika*, řeší předpoklad, že makroskopická dynamika je autonomní v méně restriktivním smyslu. Řekněme, že systém má nějaký parametr reprezentující jeho velikost, označme ho N (N typicky reprezentuje počet částic, objem, rozměr atd.). Je zřejmé, že dynamika, fázový prostor i míra závisí na parametru N . Pak dynamiku nazveme *makroskopicky autonomní*, když platí

$$\forall t_0 < t_1 \in \mathbb{R} \quad \forall a \quad \exists b : \lim_{N \rightarrow \infty} \rho^N(\varphi_{t_0, t_1}^N(x) \in \Omega_b^N \mid x \in \Omega_a^N) = 1,$$

tj. když je dynamika autonomní v limitě nekonečně velkého systému. Makroskopická dynamika pak je definována vzhledem k limitní dynamice. Typickými příklady takových dynamik jsou dynamiky řízené Boltzmanovou rovnicí nebo Navier-Stokesovými rovnicemi.

2.2 Entropie a její změny

V této sekci pak ukážeme standradní argument, že 2. termodynamická věta je konzistentní s mikroskopickou reverzibilitou, kde klíčovou roli hraje pojem entropie a její změny pak charakterizují relaxaci systému do rovnováhy.

2.2.1 Entropie

Ještě před samotným zavedením entropie zavedeme některé pomocné pojmy. Prvním z nich je projekce distribuce na mikrostavech na distribuci na makrostavech. Zavedme funkci \hat{p} zobrazující distribuci na mikrostavech μ na distribuci na makrostavech (jedná se v podstatě o projekci a budeme je značit se stříškou) následujícím předpisem

$$\hat{p}[\mu](a) = \mu(\Omega_a). \quad (2.2.1)$$

A obdobně provedeme rozšíření distribuce na makrostavech $\hat{\nu}$ na distribuci na mikrostavech x

$$[\hat{\nu} \times \rho](A) = \int_A d\rho(x) \frac{\hat{\nu}(M(x))}{\rho(\Omega_{M(x)})}, \quad (2.2.2)$$

kde $M(x)$ přiřadí mikrostavu x odpovídající makrostav (srovnej se sekcí 2.1.1). Z definic je patrné, že platí $\hat{p}[\hat{\nu} \times \rho] = \hat{\nu}$.

Nyní zavedeme entropii. Začneme *Shannonovou entropií*, kterou definujeme jako

$$S(\mu) = - \int_{\Omega} d\mu(x) \ln \frac{d\mu}{d\rho}(x), \quad (2.2.3)$$

kde $\mu(x)$ je libovolná pravděpodobnostní distribuce. Pozn.: Ve fyzice se entropie definuje pomocí přirozeného logaritmu a pokládá se úměrně Boltzmanově konstantě (zde pro jednoduchost $k_B = 1$), naproti tomu v informatice se často používá logaritmus o základu 2. Obdobně pak zavedeme Shannonovu entropii pro makroskopickou distribuci

$$S(\hat{\mu}) = - \sum_a \hat{\mu}(a) \ln \hat{\mu}(a).$$

Termodynamicky významější je *Gibbsova entropie* zavedená podle vztahu

$$S_G(\hat{\mu}) = S(\hat{\mu} \times \rho). \quad (2.2.4)$$

Pro Gibbsovu entropii odvodíme ještě jeden tvar dosazením do definičního vztahu definice Shannonovy entropie (2.2.3) a definice (2.2.2).

$$\begin{aligned} S_G(\hat{\mu}) &= - \int_{\Omega} d[\hat{\mu} \times \rho](x) \ln \frac{d[\hat{\mu} \times \rho]}{d\rho}(x) \\ &= - \int_{\Omega} d\rho(x) \frac{\hat{\mu}(M(x))}{\rho(\Omega_{M(x)})} [\ln \hat{\mu}(M(x)) - \ln \rho(\Omega_{M(x)})] \\ &= - \sum_m \hat{\mu}(m) \ln \hat{\mu}(m) + \sum_m \hat{\mu}(m) \underbrace{\ln \rho(\Omega_m)}_{=S_B(m)} \\ &= S(\hat{\mu}) + \sum_m \hat{\mu}(m) S_B(m) \\ S_G(\hat{\mu}) &= S(\hat{\mu}) + \langle S_B \rangle_{\hat{\mu}}. \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

Tedy ve výsledku pak máme, že Gibbsova entropie je součtem Shannonovy entropie na makrostavech a střední *Boltzmanovy entropie*, kterou jsme zavedli vztahem

$$S_B(m) = \ln \rho(\Omega_m). \quad (2.2.6)$$

Abychom pochopili fyzikální význam jednotlivých entropií je třeba si uvědomit, proč se provádí dělení na makro- a mikro-stavy. Typickou fyzikální situací je, že máme nějaký makroskopický systém, u kterého jsme schopni sledovat pouze některé (převážně právě makroskopické) charakteristiky. Těmto naměřeným hodnotám pak odpovídá určitý makrostav, avšak fyzikální stav (tomu odpovídá právě jeden mikrostav) systému tak není určen jednoznačně.

Pak požadavek na autonomní resp. makroskopicky autonomní dynamiku znamená, že z daného makrostavu jsme schopni určit makrostav další (případně jsme ho schopni odhadnout s velkou pravděpodobností). Tj. není nutné znát konkrétní mikroskopický fyzikální stav k sledování vývoje systému.

Začneme od konce a to entropií Boltzmanovou. Ta je definována pouze pro konkrétní makrostav a odpovídá Shannonově entropii pro případ rovnoměrného rozdělení na zvoleném makrostavu. Dá se ukázat, že je to zároveň maximální Shannonova entropie pro případ, kdy jsme omezeni na jeden makrostav (důkaz obecnějšího tvrzení je v dodatku A). Zároveň je Boltzmanova entropie rovná Gibbsově entropii ve speciálním případě distribuce

$$\hat{\mu}_m(a) = \begin{cases} 1 & a = m \\ 0 & \text{jinak} \end{cases},$$

tj. v případě ostré lokalizace do jednoho makrostavu. To předurčuje její použití jako entropie jednoho makrostavu, respektive je to maximální entropie pro daný makrostav.

Nyní poukážeme na další z důležitých vztahů mezi Gibbsovou a Shannonovaou entropií a to

$$S_G(\hat{\mu}) = \sup_{\nu: \hat{p}[\nu]=\hat{\mu}} S(\nu) \equiv - \inf_{\nu: \hat{p}[\nu]=\hat{\mu}} \int_{\Omega} d\nu(x) \ln \frac{d\nu}{d\rho}(x). \quad (2.2.7)$$

Důkaz je proveden v dodatku A. Tedy Gibbsova entropie maximalizuje Shannonovu pro případ daného rozdělení na makrostavech, které je často jedinou informací, kterou o systému máme. Jak se ukáže později je Gibbsova entropie právě ta pro kterou platí H -teorém. Narozdíl však od Boltzmanovy entropie ji neumíme měřit přímo, protože v případě jednoho měření vždy sledujeme určitou trajektorii makrostavů a tedy koncový makrostav je jednoznačně určen. Gibbsovu entropii pak typicky musíme určit podle rovnice (2.2.5), často však stačí určit Boltzmanovu entropii. Důvod je ten, že Boltzmanova entropie na typických makrostavech je extenzivní veličinou, a tedy je úměrná velikosti systému. Naproti tomu Shannonova entropie na makrostavech, typicky extenzivní veličinou není, neboť se nedá předpokládat, že v běžných systémech počet makrostavů roste exponenciálně s velikostí systému. Tím je pak dáno, že distribuce na makrostavech v limitě nekonečného systému pak vybírá ostrou hodnotu. Je tedy jasné, že v typických případech je Boltzmanova entropie dominantní.

$$S_G \doteq S_B + o(N).$$

2.2.2 Dráhová míra a H -teorém

Doposud jsme se v této části zabývali pouze definicí jednotlivých entropií a vztahy mezi nimi bez ohledu jak na mikroskopickou tak makroskopickou dynamiku. V této části, kde budeme postupovat ve shodě s [Mae03] a [MN03], zavedeme dráhovou míru a formulujeme H -teorém.

Jak jsme avizovali, zavedeme nejprve dráhovou míru. K tomu je potřeba zavést trajektorii na makrostavech $\omega(t)$ z času t_0 do t_{fin} , jako funkce času na sadě makrostavů, a k ní trajektorii časově invertovanou

$$\Theta\omega(t) = \pi\omega(t_{fin} + t_0 - t), \quad (2.2.8)$$

kde π je kinematická inverze na ma makrostavech. Dráhovou míru vůči počátečnímu distribuci makrostavů $\hat{\mu}$ pak definujeme jako

$$P_{\hat{\mu},\varphi}(\omega) = [\hat{\mu} \times \rho] \left(\bigcap_{t \in [t_0, t_{fin}]} \varphi_{t, t_{fin}}(\Omega_{\omega(t)}) \right). \quad (2.2.9)$$

Potom pokud budeme uvažovat poměr

$$\frac{P_{\hat{\mu},\varphi}(\omega)}{P_{\hat{\nu}\circ\pi,\overleftarrow{\varphi}}(\Theta\omega)} = \frac{\hat{\mu}(\omega(t_0))}{\hat{\nu}(\omega(t_{fin}))} \frac{\rho(\Omega_{\omega(t_{fin})})}{\rho(\Omega_{\omega(t_0)})} \frac{\rho\left(\bigcap_{t\in[t_0,t_{fin}]} \varphi_{t,t_{fin}}(\Omega_{\omega(t)})\right)}{\rho\left(\bigcap_{t\in[t_0,t_{fin}]} \overleftarrow{\varphi}_{t,t_{fin}}(\Omega_{\Theta\omega(t)})\right)},$$

kde jsme již pro zjednodušení použili vlastnosti, že kinematická inverze je sama sobě inverzí a dosadili z definice (2.2.2). Výraz pak upravíme dále s použitím definic (2.1.1) a (2.2.8) do tvaru

$$\frac{P_{\hat{\mu},\varphi}(\omega)}{P_{\hat{\nu}\circ\pi,\overleftarrow{\varphi}}(\Theta\omega)} = \frac{\hat{\mu}(\omega(t_0))}{\hat{\nu}(\omega(t_{fin}))} \frac{\rho(\Omega_{\omega(t_{fin})})}{\rho(\Omega_{\omega(t_0)})} \frac{\rho\left(\bigcap_{t\in[t_0,t_{fin}]} \varphi_{t,t_{fin}}(\Omega_{\omega(t)})\right)}{\rho\left(\bigcap_{t\in[t_0,t_{fin}]} \pi \circ \varphi_{t,t_{fin}}^{-1}(\Omega_{\omega(t_{fin}+t_0-t)})\right)},$$

což dále pak s použitím vlastností kinematické inverze π upravíme do konečného tvaru

$$\frac{P_{\hat{\mu},\varphi}(\omega)}{P_{\hat{\nu}\circ\pi,\overleftarrow{\varphi}}(\Theta\omega)} = \frac{\hat{\mu}(\omega(t_0))}{\hat{\nu}(\omega(t_{fin}))} \frac{\rho(\Omega_{\omega(t_{fin})})}{\rho(\Omega_{\omega(t_0)})}. \quad (2.2.10)$$

V logaritmickém tvaru pak dostáváme

$$\ln \frac{P_{\hat{\mu},\varphi}(\omega)}{P_{\hat{\nu}\circ\pi,\overleftarrow{\varphi}}(\Theta\omega)} = S_B(\omega(t)) - S_B(\omega(t_0)) + \ln \hat{\mu}(\omega(t_0)) - \ln \hat{\nu}(\omega(t)),$$

kde poprvé pozorujeme rozdíl entropií. Tento tvar poměru dráhových měř platí ve vsí obecnosti.

Uvažujme nyní stochastickou dynamiku u_{t_{fin},t_0} na makrostavech, a speciální volbu

$$\hat{\nu} = \hat{\mu}_{t_{fin}} = u_{t_{fin},t_0}(\hat{\mu}_{t_0}).$$

Kde makroskopická dynamika u_{t_{fin},t_0} je pomocí mikroskopické zavedena jako

$$\sum_{\omega(t_0)} \hat{\mu}_{t_0}(\omega(t_0)) \frac{\rho(\varphi_{t_0,t_{fin}}(\Omega_{\omega(t_0)}) \cap \Omega_{\omega(t_{fin})})}{\rho(\Omega_{\omega(t_0)})} = \hat{\mu}_{t_{fin}}(\omega(t_{fin})), \quad (2.2.11)$$

kde druhý člen odpovídá podmíněné pravděpodobnosti přechodu z makrostavu $\omega(t_0)$ do makrostavu $\omega(t_{fin})$. Dále platí

$$1 = \sum_{\omega} P_{\hat{\mu}_{t_0},\varphi}(\omega) \frac{P_{\hat{\mu}_{t_{fin}},\overleftarrow{\varphi}}(\Theta\omega)}{P_{\hat{\mu}_{t_0},\varphi}(\omega)} \geq \exp \left[\sum_{\omega} P_{\hat{\mu}_{t_0},\varphi}(\omega) \ln \frac{P_{\hat{\mu}_{t_{fin}},\overleftarrow{\varphi}}(\omega)}{P_{\hat{\mu}_{t_0},\varphi}(\omega)} \right],$$

kde jsme použili Jensenovu nerovnost ve tvaru

$$\langle e^x \rangle \geq e^{\langle x \rangle}.$$

Dosazením pak logaritmického tvaru (2.2.10) do předešlé rovnice dostaneme

$$\sum_{\omega} P_{\hat{\mu}_{t_0}, \varphi}(\omega) (S_B(\omega(t_0)) - S_B(\omega(t_{fin})) + \ln \hat{\mu}_{t_{fin}}(\omega(t_{fin})) - \ln \hat{\mu}_{t_0}(\omega(t_0))) \leq 0,$$

kde si všimneme, že pravá strana závisí pouze na krajních bodech trajektorie, a tedy desazením definice dráhové míry (2.2.8) a (2.2.2) získáme

$$\begin{aligned} \sum_{\omega(t_0), \omega(t_{fin})} \frac{\hat{\mu}_{t_0}(\omega(t_0))}{\rho(\Omega_{\omega(t_0)})} \rho(\varphi_{t_0, t_{fin}}(\Omega_{\omega(t_0)}) \cap \Omega_{\omega(t_{fin})}) \times \\ \times (S_B(\omega(t_0)) - S_B(\omega(t_{fin})) + \ln \hat{\mu}_{t_{fin}}(\omega(t_{fin})) - \ln \hat{\mu}_{t_0}(\omega(t_0))) \leq 0, \end{aligned}$$

což můžeme dále rozdělit na

$$\begin{aligned} \langle S_B \rangle_{t_0} - \sum_{\omega(t_0)} \hat{\mu}_{t_0} \ln \hat{\mu}_{t_0}(\omega(t_0)) \leq \\ \sum_{\omega(t_0), \omega(t_{fin})} \frac{\hat{\mu}_{t_0}(\omega(t_0))}{\rho(\Omega_{\omega(t_0)})} \rho(\varphi_{t_0, t_{fin}}(\Omega_{\omega(t_0)}) \cap \Omega_{\omega(t_{fin})}) (S_B(\omega(t_{fin})) - \ln \hat{\mu}_{t_{fin}}(\omega(t_{fin}))), \end{aligned}$$

kde nalevo dostáváme Gibbsovu entropii v čase t_0 . Dále pak použijeme vztah 2.2.11 a dostáváme H -teorém ve tvaru

$$S_G(t_0) \leq S_G(t_{fin}), \quad (2.2.12)$$

kde vidíme, že Gibbsova entropie neklesá. Logaritmický podíl mezi dráhovými mírami trajektorie a její časově inverze pak můžeme chápat jako změnu entropie podél dané trajektorie. V případě, že máme makroskopicky autonomní dynamiku, tak dostáváme situaci, kdy Boltzmannova entropie neklesá, což je již přímo měřitelná veličina. Argumentem pro toto tvrzení, je že typicky Shanonova entropie není extenzivní veličinou a tedy v limitě nekonečného systému distribuce na makrostavech konverguje k ostré hodnotě.

Ukázali jsme tedy, že dráhové míry otevřených systémů mají jistou symetrii vůči časové inverzi, v níž podstatnou roli hraje změna entropie. Dále jsme demonstrovali jak využitím této symetrie lze odvodit řadu flukтуаčních relací platných pro vekou třídu reálných systémů.

2.3 Markovovské modely otevřených systémů

Doposud jsme se zabývali pouze uzavřenými systémy, popisem jejich dynamiky a některými vlastnostmi. Nyní rozšíříme náš popis i o aspekty otevřených systémů v Markovovském přiblížení. V této části budeme převážně vycházet z prací [Cro98] a [Cro00], které navazují na práci Jarzynského. Další možné odvození pak najdeme například v [Mae03].

Jak jsme v předchozích částech uvedli kompletní popis systému je tvořen trojicí (Ω, φ, ρ) , kde Ω je fázový prostor, φ je popis dynamiky na systému a ρ je stacionární distribuce. Tato trojice se liší od modelu k modelu, avšak některé charakteristiky mají jak pro uzavřené tak otevřené systémy společné. Zatímco v uzavřených systémech byla dynamika na mikrostavech φ deterministická, nyní ji musíme nahradit dynamikou stochastickou. Dalším rozdílem pak je samotná stacionární distribuce, jež je charakterizována inverzní teplotou β , příslušného

tepelného rezervoáru, se kterým je systém svázán. Stacionární distribuce na mikrostavech pak odpovídá příslušné kanonické distribuci.

$$\rho(x) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(x)} = \exp[\beta F - \beta E(x)],$$

kde $E(x)$ je energie příslušného mikrostavu x , Z je partiční suma a F je volná energie definovaná jako

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z.$$

Pokud se dále omezíme na markovovské modely otevřených systémů, pak samotnou dynamiku můžeme popsat pomocí rychlostí přechodů $M(x(t + \Delta t), x(t); t)$ mezi jednotlivými stavy charakterizovanou

$$M(x(t + \Delta t), x(t); t) = P(x(t + \Delta t) | x(t)),$$

Často pak můžeme přejít od dynamiky v diskrétním čase k dynamice se spojitým časem pomocí vhodně provedené limity $\Delta t \rightarrow 0$. Pokud je systém konečný, můžeme pak rychlost přechodů považovat za matici přechodů $M_{ij}(t)$, i a j označují koncový a počáteční vztah. Pro danou matici pak musí platit

$$\forall i, j, t: \quad M_{ij}(t) \geq 0,$$

z positivity a normování pravděpodobnosti pak plyne

$$\forall j, t: \quad \sum_i M_{ij}(t) = 1.$$

Pro vývoj libovolné pravděpodobnostní distribuce na mikrostavech charakterizovanou vektorem $\rho(t)$ pak platí

$$\rho(t') = \overrightarrow{\exp} \left[\int_{t_0}^{t'} dt M(t) \right] \cdot \rho(t_0),$$

kde exponenciálu uvažujeme časově uspořádanou. Takto zavedené matice přechodu tedy plně charakterizují markovovskou dynamiku.

Pro stacionární distribuci $\pi(t)$ pak platí,

$$\pi(t) = M(t) \cdot \pi(t).$$

Kde stacionaritu uvažujeme ve smyslu, že systém se od času t dále vyvíjí podle matice $M(t)$. Dále v textu pak budeme navíc předpokládat, že takováto stacionární distribuce v každém čase odpovídá kanonické distribuci, kde $E(x)$ nahradíme $E(x; t)$ tj. energie systému může explicitně záviset na čase. Pokud tvrdíme, že stacionární distribuce splňuje detailní rovnováhu, pak splňuje podmínku

$$M_{ij}^T(t) \pi_i(t) = M_{ij}(t) \pi_j(t),$$

kde M^T je transponovaná matice k matici M . Jak je patrné detailní rovnováha platí v obdobné podobě jako v předchozí části (2.1.4).

Vraťme se na chvíli zpět k systémům v diskrétním čase. Pokud pak budeme vyšetřovat celkovou změnu energie ΔE během jednoho časového skoku, můžeme dospět k tomu, že změna celkové energie je dána dvěma příspěvky. První z nich je pak dána tím, že systém přejde ze

stavu $x(t)$ do stavu $x(t + \Delta t)$, což může být spojeno se změnou energie systému a druhý je samotná změna energie v důsledku vnějších vlivů. První část pak považujeme za disipované teplo během přeskočení a druhou část za disipovanou práci. Pro N takových časových kroků a jednu trajektorii x pak dostáváme

$$Q[x] = \sum_{i=0}^{N-1} [E(x(t + (i+1)\Delta t), t + i\Delta t) - E(x(t + i\Delta t), t + i\Delta t)],$$

$$W[x] = \sum_{i=0}^{N-1} [E(x(t + (i+1)\Delta t), t + (i+1)\Delta t) - E(x(t + (i+1)\Delta t), t + i\Delta t)],$$

$$\Delta E[x] = Q[x] + W[x],$$

dále pak zavedeme vratnou práci

$$W_R = F(\beta, E(t)) - F(t, E(t_0)),$$

což je rozdíl volných energií definovaných skrze kanonické rozdělení, avšak vůči různým energetickým spektrům. Je to zároveň nejmenší možná práce nutná k přechodu mezi těmito distribucemi. Disipativní část práce pak chápeme rozdíl celkové práce a vratné práce. Ve spojitém čase je teplo dáno změnou (derivací) pravděpodobnostní distribuce v čase a práce změnou energie v průběhu času.

Dále pak zavedeme časově obrácenou trajektorii jakožto

$$\Theta x(t) = x(T - t),$$

kde T je celková doba procesu, který nás zajímá, a otočíme protokol udávající hodnoty vnějších veličin, což se nám projeví v podobě opačné časové závislosti energie tj. mějme

$$E_{\#}(x; t) = E(x; T - t).$$

Taktéž je třeba zavést časově obrácenou dynamiku a to následující způsobem

$$M_{ij}^{\#}(t) = \pi_i(T - t) M_{ji}(T - t) \frac{1}{\pi_j(T - t)}, \quad (2.3.1)$$

takto zavedená matice automaticky splňuje požadavky na dynamiku. Požadavek na pozitivitu z toho, že M je pozitivní a

$$\sum_i M_{ij}^{\#}(t) = \frac{\pi_j(T - t)}{\pi_j(T - t)} = 1$$

ze stacionarity π . Dále pak pro stacionární distribuci platí

$$\left[M^{\#}(t) \cdot \pi(T - t) \right]_i = \sum_j M_{ji}(T - t) \pi_j(T - t) = \pi_i(T - t),$$

tj. $\pi(T - t)$ je stacionární k $M^{\#}(t)$, což vzhledem k definici časové inverze energie se dá přeformulovat jako

$$M^{\#}(t) \cdot \pi^{\#}(t) = \pi^{\#}(t).$$

A v případě, že stacionární distribuce splňuje detailní rovnováhu pak platí

$$M^{\#}(t) = M(T - t).$$

Opět se budeme zajímat o poměr dráhových měř $P(x|x(0), M)$, což je pravděpodobnost trajektorie x , za předpokladu, že začínáme v $x(0)$ a časový vývoj je řízen maticí M , a $P(\Theta x|\Theta x(0), M^\#)$.

$$\begin{aligned}
\frac{P(x|x(0), M)}{P(\Theta x|\Theta x(0), M^\#)} &= \frac{\prod_{t=0}^{(N-1)\Delta t} P[x(t) \rightarrow x(t+\Delta t)]}{\prod_{t=0}^{(N-1)\Delta t} P[\Theta x(t) \rightarrow \Theta x(t+\Delta t)]} \\
&= \prod_{t=0}^{(N-1)\Delta t} \frac{\pi(x(t+\Delta t); t)}{\pi(x(t); t)} \\
&= \exp\left(-\beta \sum_{t=0}^{(N-1)\Delta t} [E(x(t+\Delta t); t) - E(x(t); t)]\right) \\
&= \exp(-\beta Q[x]), \tag{2.3.2}
\end{aligned}$$

kde v prvním kroku jsme použili Markovovskost dynamiky, v druhém pak definici (2.3.1) a nakonec jsme dosadili z definice kanonické matice hustoty a získali podle definice teplo. Jak je vidět, zatímco v případě uzavřených systémů se jedná o změnu entropie, mezi krajními polohami systému, zde dostáváme přímo entropii v podobě disipovaného tepla.

Pokusíme se výše odvozené symetrie využít a poukázat na její důsledky v podobě konkrétních příkladů. Obecná střední hodnota funkce X závislé na trajektoriích je definována jako

$$\langle X \rangle = \sum_x \pi(x(0) | \beta, E(0)) P[x|x(0), M] X[x].$$

Dále s využitím symetrie (2.3.2) a použitím podmínek mikroskopické reverzibility dostaneme

$$\frac{\rho(x(0) | \beta, E(0)) P[x|x(0), M]}{\rho^\#(\Theta x(0) | \beta, E^\#(0)) P[\Theta x|\Theta x(0), M^\#]} = e^{\beta\Delta E - \beta\Delta F - \beta Q[x]} = e^{\beta W[x] - \beta\Delta F} = e^{\beta W_D[x]},$$

kde $W_D[x]$ značíme disipativní část práce. Dosazením pak do střední hodnoty plyne symetrie

$$\langle X e^{-\beta W_D} \rangle = \langle X^\# \rangle_\#, \tag{2.3.3}$$

kde index $\#$ značí, že dynamika je časově invertovaná stejně jako veškeré veličiny. Tj. prohodíme časovou osu ($t \rightarrow T - t$) a otočíme znaménka hybností, momentů hybností a dalších veličin, jež při časové inverzi mění znaménko.

Jarzynského flukтуаční relace Jarzynského flukтуаční relaci dostaneme dosazením za X identitu. Tj. máme relaci

$$\langle e^{-\beta W_D} \rangle = 1,$$

což můžeme přepsat do příhodnějšího tvaru jako

$$\langle e^{-\beta W_D} \rangle = e^{-\beta\Delta F}.$$

Pokud nás pak budou zajímat fluktuace veličin závislé na práci tj. $f(W)$ tak dostaneme relace v podobě

$$e^{-\beta\Delta F} = \frac{\langle f(W) \rangle}{\langle f(-W) e^{-\beta W} \rangle_\#}.$$

Tranzientní flukuační teorém Tento vyjadřuje vztah pro pravděpodobnostní distribuce disipativní části práce. Pokud zvolíme

$$f(W) = \delta(\beta W_D - \beta W_D[x]),$$

pak

$$f_{\#}(W) = \delta(\beta W_D + \beta W_D[x]),$$

a dosazením do symetrie (2.3.3) dostaneme

$$P(\beta W_D) e^{-\beta W_D} = P_{\#}(-\beta W_D),$$

tj. disipativní část práce při časově inverzním procesu má pro kladné βW_D pravděpodobnost nižší faktorem $\exp[-\beta W_D]$.

Podářilo se nám tedy ukázat, že jak v případě otevřených systému tak v případě uzavřených systému, platí určitá symetrie mezi dráhovými mírami a jejich časovou inverzí s typickým parametrem v podobě entropie. Dále se ukazuje, že využitím této základní symetrie dostaneme celou řadu užitečných flukuačních relací, které platí pro velkou třídu reálných systémů.

2.4 Od klasického ke kvantovému popisu

V první části této úvodní kapitoly jsme se věnovali klasickým systémům, zavedení a popisu dynamiky mikro a makrostavů. Dále jsme se zaměřili na pojem detailní rovnováhy, entropie a dráhové míry, které se ukázali klíčové pro formulaci disipace, narušení časové symetrie na makroskopické úrovni a dále pak pro formulaci flukuačních relací pro práci. V této části se budeme nejprve věnovat kvantovým uzavřeným systémům, zavedení makrostavů, entropie a konstrukci práce a tepla v kvantových systémech. Je to příprava pro další kapitoly, kde se věnujeme důkladně otevřeným kvantovým systémům a ukazujeme některé jejich charakteristiky a problémy s nimi spojené.

2.4.1 Makrostavy v kvantové mechanice

Abychom mohli postupovat obdobně jako v první části, je nejprve nutné vyjasnit některé pojmy ohledně stavového prostoru a dynamiky. Budeme postupovat obdobně jako v [CRJ⁺04].

V kvantové mechanice pojem fázového prostoru přechází na obecný Hilbertův prostor, kde jednotlivé vektory reprezentují fyzikální (mikro) stavy. Z těchto vektorů je možné zkonstruovat matici hustoty ρ vyjadřující stav celého systému a reprezentující distribuci na mikrostavech. Poslední podstatnou klasickou veličinou pro popis stavů byla stacionární míra na fázovém prostoru. Ta je v případě kvantové mechaniky nahrazena stopou s příslušnou maticí hustoty.

Po připomenutí základních pojmů se nyní můžeme věnovat definici makrostavů. Mějme Hilbertův prostor \mathcal{H}^N , kde N značí velikost systému. Dále mějme nějakou měřitelnou veličinu A^N na prostoru \mathcal{H}^N , jejíž spektrum odpovídá měřitelným hodnotám. Každé hodnotě α ze spektra pak přísluší projektor $P^N(\alpha)$. Veličinu A^N pak budeme považovat za makroskopickou, pokud pro typická α platí

$$\text{Tr } P^N(\alpha) \sim e^{sN}.$$

A podprostory příslušné jednotlivým vlastním číslům pak budeme považovat za makrostavy. Tato definice se tedy velmi dobře shoduje s tím, co jsme zavedli pro potřeby klasické fyziky, hlavní změnou, která zde je, že obecně všechny makroskopické veličiny spolu nekomutují

a tedy nemusí existovat vhodná báze, ve které lze popsat všechny relevantní makroskopické aspekty. Přesto pro řadu typických veličin platí, že v jistém smyslu skoro komutují, tj. pro $N \rightarrow \infty$ jde jejich komutátor k nule. Jedním z takových případů je střední magnetizace ve spinovém modelu

$$\vec{m} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i,$$

kde N je počet spinů a S je operátor spinu příslušné částice. Platí totiž

$$[m_x, m_y] = i \frac{1}{N} m_z,$$

což je důsledek komutačních relací pro spin a toho, že používáme hustoty. Hustoty používáme, ze dvou důvodů, typicky částice reagují na hustotu polí v nějakém místě, nikoliv na jejich celkovou velikost, a druhý důvod je, že mají typicky omezené spektrum.

Úvahu nad skoro komutujícími veličinami se nyní pokusíme o něco zformalizovat v duchu práce [CRJ⁺04]. Mějme sadu fyzikálních veličin $\vec{X}^N = X_k^N$, kde N určuje velikost systému, dále mějme sadu projektorů P^N . Pokud pro sadu hodnot x_k a libovolnou spojitou funkci $f \in C(\mathbb{R})$ platí

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr} (f(X_k^N) P^N)}{\text{Tr} P^N} = f(x_k),$$

pak tvrdíme, že sada projektorů P^N koncentruje do \vec{x} . Pokud taková sada projektorů existuje pro všechny možné hodnoty \vec{x} , pak tvrdíme, že pro sadu operátorů X_k existuje sada navzájem komutujících operátorů \vec{X}_k , které je v dobrém smyslu aproximují. Pokud navíc velikost daných podprostorů vykazuje příslušnou závislost na velikosti systému, budeme o projektorech P^N mluvit jako o projekcích do makrostavů. Zde je navíc další podstaný rozdíl oproti klasické mechanice, kde nám makrostavy rozkládaly prostor disjunktně. To v kvantové mechanice nemusí platit, avšak překryv musí s velikostí systému limitně vymizet.

Je vhodné ještě vyšetřit chování takovéto sady projektorů na nekomutativních funkcích. Pro jednoduchost se omezme na omezené analytické funkce definované jako

$$g(\vec{X}^N) = \sum_{m \geq 0} \sum_{(k_1, \dots, k_m) \in \mathcal{I}} g(k_1, \dots, k_m) X_{k_1}^N \dots X_{k_m}^N,$$

kde m je řád rozvoje a \mathcal{I} je indexová množina. Pak platí

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr} (f(\vec{X}^N) P^N)}{\text{Tr} P^N} = g(\vec{x}),$$

kde důkaz stačí omezit na $g(k_1, \dots, k_m) = 1$. V tomto případě pak platí

$$\begin{aligned} \left| \frac{\text{Tr} ((Y^N X_{k_m}^N - y x_{k_m}) P^N)}{\text{Tr} P^N} \right| &= \left| \frac{\text{Tr} (Y^N (X_{k_m}^N - x_{k_m}) P^N)}{\text{Tr} P^N} + \frac{\text{Tr} ((Y^N - y) x_{k_m} P^N)}{\text{Tr} P^N} \right| \\ &= \|Y^N\| \left(\frac{\text{Tr} ((X_{k_m}^N - x_{k_m})^2 P^N)}{\text{Tr} P^N} \right)^{\frac{1}{2}} + |x_{k_m}| \left| \frac{\text{Tr} ((Y^N - y) P^N)}{\text{Tr} P^N} \right| \rightarrow 0, \end{aligned}$$

kde jsme označili celou první část polynomu Y a pak jsme použili nejprve trojúhelníkovou nerovnost pro absolutní hodnotu, a dále u prvního členu Schwarzovu nerovnost. První člen jde k nule z definice koncentrujících projekcí, zatímco druhý má řád o jedna menší, tedy postupujeme indukcí.

Pro případ otevřených systémů pak místo projekcí můžeme definovat koncentrující stavy ω^N jež dávají odpovídající střední hodnoty. Tím zobecníme pojem makrostavu i na otevřené systémy, kde není vždy ostrá hodnota přesně určena. Tímto bysme uzavřeli část věnující se makrostavům a pokročili k dynamice a entropii.

2.4.2 Dynamika v kvantové mechanice, entropie a flukтуаční relace

V této části se omezíme pouze na unitární dynamiku, neboť disipativní dynamika v režimu slabé vazby je diskutována v dalších kapitolách. Tedy budeme se věnovat uzavřeným systémům v kvantové mechanice s hamiltonovskou dynamikou. V první řadě nás bude zajímat jak zkonstruovat obdobu mikroskopické dynamiky φ v kvantovém případě. V těchto systémech je časový vývoj řízen Schrödingerovu rovnicí

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)],$$

kde $H(t)$ je hamiltonián v čase t a $\rho(t)$ je matice hustoty, která obsahuje úplnou informaci o systému. Pokud pak zavedeme unitární operátor časového vývoje $U(t, t_0)$ tak, že platí

$$\begin{aligned}\rho(t) &= U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0), \\ U(t_2, t_0) &= U(t_2, t_1) U(t_1, t_0), \\ U^\dagger(t_1, t_0) &= U(t_0, t_1),\end{aligned}$$

dostaneme, že daný unitární operátor musí splňovat i rovnici

$$i\hbar \frac{dU(t, t_0)}{dt} = H(t) U(t, t_0).$$

Operátor $U(t, t_0)$ působí již přímo na vektory hilbertova prostoru, které reprezentují jednotlivé stavy systému. Tedy unitární operátor časové evoluce na stavech v rámci hilbertova prostoru, je obdobou naší mikroskopické dynamiky v klasických systémech.

Budeme pokračovat v našem hledání analogií s klasickou fyzikou dále. Entropii pak zavedeme obdobně jako v klasickém případě, tedy Boltzmanova entropie v klasickém případě odpovídala logaritmu objemu daného stavu ve fázového prostoru. Vzhledem k tomu, že v kvantové mechanice roli Liouvilovy míry plní stopa zavedeme Boltzmanovu entropii jako

$$S_B(\psi) = \ln \text{Tr } P(\psi),$$

kde $P(\psi)$ je projektor do stavu ψ , kde velikost stavu je tedy dána dimenzí projektoru. Dále zavedeme kvantovou obdobu Shannonovy entropie na mikrostavech v podobě

$$S_S(\rho) = -\text{Tr } \rho \ln \rho,$$

kde ρ je matice hustoty. Abychom ukázali souvislost s Shannonovou entropií v klasické fyzice, tak do definice entropie dosadíme diagonalizovanou matici hustoty (tj. provedeme spektrální

rozklad na nějakou třídu projektorů)

$$\begin{aligned}
 S_S(\rho) &= -\text{Tr} \sum_{\psi} p(\psi) P(\psi) \ln \left(\sum_{\psi'} p(\psi') P(\psi') \right) \\
 &= -\sum_{\psi} p(\psi) \text{Tr} P(\psi) \ln (p(\psi) P(\psi)) \\
 &= -\sum_{\psi} d_{\psi} p(\psi) \ln p(\psi),
 \end{aligned}$$

kde jsme označili $p(\psi)$ pravděpodobnost nalezení systému ve stavu ψ a d_{ψ} je dimenze projektoru $P(\psi)$, tj. $d_{\psi} = \text{Tr} P(\psi)$. Při odvození jsme použili vzájemnou ortogonalitu projektorů a vlastnost $P(\psi)^2 = P(\psi)$. A dalším kroku pak jsme použili vlastnost $\ln P(\psi) = 0$, čímž jsme nakonec dostali klasickou Shannonovu entropii, pro rozdělení $p(\psi)$. Dalším přirozeným krokem je zavedení obdoby Gibbsovy entropie, která se v kvantovém případě nazývá Gibbs-Neumannovou entropií. Definici tentokrát provede přes extremalizaci Shannonovy entropie za určitých omezujících podmínek. Mějme množinu stavů α s pravděpodobnostním rozdělením $p(\alpha)$ pak Gibbs-Neumanova entropie je definována jako

$$S_N(p(\alpha)) = \sup_{\rho: \text{Tr} \rho P(\alpha) = p(\alpha)} S_S(\rho),$$

explicitně, pak dosazením z Shannonovy entropie a využitím metody Lagrangeových multiplikátorů, dostaneme explicitní tvar

$$S_N(p(\alpha)) = \langle S_B(\alpha) \rangle_{p(\alpha)} + S_S(p(\alpha)).$$

Je vidět, že Gibbs-Neumanova entropie má shodné charakteristiky s Gibbsovou entropií.

Pokud bychom nás zajímal H -teorém v kvantovém případě, potřebovali bychom zavést ekvivalent dráhové míry. S tím souvisí některé problémy, které probereme v kapitole 4, kde dané zobecnění i zavedeme.

Poslední věci, které jsme v části o klasické fyzice rekapitulovali, byly flukтуаční symetrie. V rámci kvantové teorie byla učiněna řada pokusů o jejich konstrukci, namátkou jen [RM04], [Kur00] a [AN04], z níž řada je navzájem protichůdných, a dodnes neexistuje všeobecně přijímaný konsenzus. Tyto přístupy se především liší v tom co považují za disipované teplo a práci. My zde rozebereme některé takové případy:

1. Prvním přístupem uvedený v [Kur00] uvažuje pouze dvoubodová měření energií, tj. energii změříme na začátku a na konci a porovnáme rozdíl. Na těchto rozdílech zavedeme pravděpodobnostní rozdělení

$$\xi_{\alpha}(\Delta E) = \sum_{\beta} \delta(\Delta E - (E_{\beta} - E_{\alpha})) |\langle \beta | U(t, t_0) | \alpha \rangle|^2,$$

kde sčítáme přes všechny koncové stavy. Prakticky tedy zjišťujeme distribuci rozdílu střední energie na konci časového vývoje vůči energii na začátku. Samotná flukтуаční symetrie se pak týká právě těchto pravděpodobnostních distribucí. Hlavními nevýhodami tohoto přístupu jsou uvažování pouze volného časového vývoje a to, že ke změnám energie, které nás v případě disipujícího systému typicky zajímají, dochází v nekonečných rezervoárech.

2. Další postup uvedený v [RM04] přímo vychází z 1. termodynamické věty pro časovou změnu střední energie ve tvaru

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = \text{Tr} \frac{d\rho}{dt} H + \text{Tr} \frac{dH}{dt} \rho,$$

kde první člen považujeme za střední disipované teplo a druhý člen pak za střední disipovanou práci. Tento přístup je ekvivalentní klasickému přístupu, rozdílem pak je, že v kvantové mechanice neexistují trajektorie. Jedním z pokusů jak opět zavést trajektorie v kvantové mechanice, je zavést trajektorii jako posloupnost naměřených hodnot v určitých diskrétních časech a předpokládat, že výsledná pravděpodobnost takové trajektorie je dána součinem pravděpodobností úseků mezi jednotlivými měřeními. Tato podmínka je silnější než markovovskost v kvantovém slova smyslu a tedy je otázkou nakolik odpovídá reálným situacím. Dalším pokusem, jak řešit neexistenci trajektorií, je zkonstruování operátoru práce, který závisí na dvou časech. Problém s takovýmto operátorem na hilbertově prostoru je ten, že jeho spektrum neodpovídá žádné pozorovatelné, a tedy jeho interpretace je značně nejednoznačná.

3. Posledním zde diskutovaným případem je postup dle [AN04]. Tento přístup uvažuje rozklad kvantové soubory na jednotlivé podsoubory (subensámby) a trajektorie definujeme na těchto souborech. Ukazuje se, že v typických netriviálních případech to vede k narušení fluktuálních symetrií, tak jak je známe z klasické fyziky. Takto zavedené soubory ve skutečnosti odpovídají tomu, že systém neustále měříme (limita spojitého měření) a tedy neumožňujeme systému žádný volný vývoj. Navíc v citované práci se omezují pouze na případ jednorozměrných podsouborů a nediskutují možnost rozkladu na makroskopičtější soubory v podobě makrostavů.

Evidentně každý ze zvolených přístupů má jak výhody tak nevýhody a jisté problémy. Je tedy vhodné, aby snaze o obecné pochopení těchto problémů a pokusu o jejich vyřešení, předcházela snaha o pochopení těchto problémů na vhodně zvolené třídě modelů. Jako vhodnou třídu modelů s disipací, na nichž budeme některé specifické otázky studovat detailně, dále uvažujeme modely se slabou vazbou na tepelný rezervoár.

Kapitola 3

Otevřené kvantové systémy

V případě kvantových otevřených systémů, lze explicitní konstrukci mezoskopické dynamiky provést pouze v některých případech. Jedním z těchto případů je režim slabé vazby mezi studovaným systémem a okolím, kde v tomto případě taková konstrukce vychází z Daviesovy teorie slabé vazby.

3.1 Režim slabé vazby

V odvození budeme postupovat ve shodě s [Roe06]. Další možná odvození i v jiných režimech jsou pak obsažena v [BP02]. Na začátku máme systém s odpovídajícím hilbertovým prostorem \mathcal{H}_S a rezervoír s hilbertovým prostorem označeným \mathcal{H}_R , které spolu interagují skrze interakční hamiltonián H_I , tj. na začátku vycházíme z unitární dynamiky s hamiltoniánem ve tvaru

$$H = H_S + H_R + \kappa H_I,$$

kde κ je pomocná konstanta určující sílu interakce a tedy v limitě slabé vazby jde k nule. Omezíme se na případ, kdy interakce splňuje podmínku

$$\text{Tr}_R [\rho_R H_I] = 0, \tag{3.1.1}$$

pokud tato podmínka neplatí, není problémem provést přeznačení a tím zaručit její splnění

$$\begin{aligned} H_S &\rightarrow H_S + \text{Tr}_R [\rho_R H_I] \\ H_I &\rightarrow H_I - \text{Tr}_R [\rho_R H_I] \end{aligned}$$

Dále zavedeme souhrnné označení

$$H_0 = H_S + H_R.$$

Pak platí, že vývoj matice hustoty v diracově interakčním obraze, je ve tvaru

$$\rho(t) = e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)H_0} e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)H} \rho(t_0) e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)H} e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)H_0},$$

což můžeme s pomocí Hausdorfovy formule přepsat jako

$$\rho(t) = e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H, \cdot]} \rho(t_0).$$

Protože nás však zajímá efektivní vývoj pouze samotného systému bez rezervoáru, je vhodné zavést projekční operátor (někdy také zvaný projekční superoperátor, protože účinkuje na prostoru operátorů)

$$\mathcal{P} = \rho_B \otimes \text{Tr}_R [\cdot].$$

Zavedeme pak operátory efektivního časového vývoje na systému

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^*(t, t_0) &= \mathcal{P} e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H, \cdot]} \mathcal{P}, \\ \tilde{\mathcal{L}}^*(t, t_0) &= (1 - \mathcal{P}) e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H, \cdot]} \mathcal{P}.\end{aligned}\tag{3.1.2}$$

Odpovídající časové derivace pak jsou

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{L}^*(t, t_0)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \mathcal{P} e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} [H_I, \cdot] e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H, \cdot]} \mathcal{P}, \\ \frac{d\tilde{\mathcal{L}}^*(t, t_0)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} (1 - \mathcal{P}) e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} [H_I, \cdot] e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H, \cdot]} \mathcal{P}.\end{aligned}$$

Po několika drobných úpravách dostaneme

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{L}^*(t, t_0)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \mathcal{P} e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} [H_I, \cdot] e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} \mathcal{P} \mathcal{L}^*(t, t_0) + \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar} \mathcal{P} e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} [H_I, \cdot] e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} (1 - \mathcal{P}) \tilde{\mathcal{L}}^*(t, t_0), \\ \frac{d\tilde{\mathcal{L}}^*(t, t_0)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} (1 - \mathcal{P}) e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} [H_I, \cdot] e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} \mathcal{P} \mathcal{L}^*(t, t_0) + \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar} (1 - \mathcal{P}) e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} [H_I, \cdot] e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} (1 - \mathcal{P}) \tilde{\mathcal{L}}^*(t, t_0).\end{aligned}$$

Nyní si všimneme, že platí

$$e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} [H_I, \cdot] e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} = \left[e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} H_I, \cdot \right] = [H_I(t-t_0), \cdot],$$

kde $H_I(t)$ značí interakční hamiltonián v diracově obraze v čase t . Po zjednodušení pak dostaneme

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{L}^*(t, t_0)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \mathcal{P} [H_I(t-t_0), \cdot] \mathcal{P} \mathcal{L}^*(t, t_0) + \frac{1}{i\hbar} \mathcal{P} [H_I(t-t_0), \cdot] (1 - \mathcal{P}) \tilde{\mathcal{L}}^*(t, t_0), \\ \frac{d\tilde{\mathcal{L}}^*(t, t_0)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} (1 - \mathcal{P}) [H_I(t-t_0), \cdot] \mathcal{P} \mathcal{L}^*(t, t_0) + \frac{1}{i\hbar} (1 - \mathcal{P}) [H_I(t-t_0), \cdot] (1 - \mathcal{P}) \tilde{\mathcal{L}}^*(t, t_0).\end{aligned}$$

Další pozorování se pak týká výrazu

$$\mathcal{P} [H_I(t-t_0), \cdot] \mathcal{P} = 0,$$

který je nulový z podmínky (3.1.1) a stacionarity stavu ρ_R . První generátor se nám tedy podstatně zjednoduší a druhý upravíme do integrálního tvaru

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{L}^*(t, t_0)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \mathcal{P} [H_I(t-t_0), \cdot] (1 - \mathcal{P}) \tilde{\mathcal{L}}^*(t, t_0), \\ \tilde{\mathcal{L}}^*(t, t_0) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t ds (1 - \mathcal{P}) [H_I(s-t_0), \cdot] \mathcal{P} \mathcal{L}^*(s, t_0) + \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t ds (1 - \mathcal{P}) [H_I(s-t_0), \cdot] (1 - \mathcal{P}) \tilde{\mathcal{L}}^*(s, t_0).\end{aligned}$$

Rekurzivním dosazováním $\tilde{\mathcal{L}}^*(t, t_0)$ do první rovnice pak dostáváme Dysonův rozvoj ve tvaru

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{L}^*(t, t_0)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \mathcal{P} [H_I(t - t_0), \cdot] \times \\ &\times \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \prod_{i=1}^n ((1 - \mathcal{P}) [H(t_i - t_0), \cdot]) \mathcal{P} \mathcal{L}^*(t_n, t_0) \right), \end{aligned}$$

kde součin $\prod_{i=1}^n ((1 - \mathcal{P}) [H_I(t_i - t_0), \cdot])$ považujeme za časově uspořádaný. Respektive s využitím stacionarity v podobě relace

$$e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]} \mathcal{P} = e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_S, \cdot]} \mathcal{P} = \mathcal{P} e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_S, \cdot]} = \mathcal{P} e^{\frac{1}{i\hbar}(t-t_0)[H_0, \cdot]},$$

výsledek nabývá tvar

$$\frac{d\mathcal{L}^*(t, t_0)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t ds e^{-\frac{1}{i\hbar}(s-t_0)[H_S, \cdot]} \mathcal{K}(t-s) e^{\frac{1}{i\hbar}(s-t_0)[H_S, \cdot]} \mathcal{L}^*(s, t_0), \quad (3.1.3)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(t-s) &= \mathcal{P} [H_I(t-s), \cdot] \times \\ &\times \left(\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \prod_{i=1}^n ((1 - \mathcal{P}) [H_I(t_i - s), \cdot]) \right) \times \\ &\times (1 - \mathcal{P}) [H_I, \cdot] \mathcal{P}. \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

Nyní provedeme sadu aproximací.

1. Bornova aproximace Z Dysonovy řady vezmeme pouze nejnižší řád. Tedy konvoluční jádro se rovná

$$\mathcal{K}(t-s) = \mathcal{P} [H_I(t-s), \cdot] (1 - \mathcal{P}) [H_I, \cdot] \mathcal{P}.$$

2. Markovovská aproximace Předpokládáme, že jádro $\mathcal{K}(t-s)$ rychle ubývá s argumentem. Rovnici (3.1.3) nejprve přepíšeme do tvaru

$$\frac{d\mathcal{L}^*(t, t_0)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t ds e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-s)[H_S, \cdot]} \mathcal{K}(s-t_0) e^{\frac{1}{i\hbar}(t-s)[H_S, \cdot]} \mathcal{L}^*(t, s),$$

kde jsme provedli záměnu $s - t_0 \rightarrow t - s$ a použili $\mathcal{L}^*(t, t_0) = \mathcal{L}^*(t - t_0)$, což je patrné přímo z definice (3.1.2). Nyní provedeme aproximaci

$$\frac{d\mathcal{L}^*(t, t_0)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^{\infty} ds e^{-\frac{1}{i\hbar}(t-s)[H_S, \cdot]} \mathcal{K}(s-t_0) e^{\frac{1}{i\hbar}(t-s)[H_S, \cdot]} \mathcal{L}^*(t, t_0).$$

3. “Rotating wave” aproximace Posledním přiblížením je předpoklad na to, že časový interval, ve kterém se $\mathcal{K}(s - t_0)$ výrazně změní, je výrazně delší než charakteristický čas oscilací daných \mathcal{H}_S . Tj. můžeme brát pouze diagonální členy

$$\frac{d\mathcal{L}^*(t, t_0)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\omega} 1_{\hbar\omega}([H_S, \cdot]) \left[\int_0^{\infty} ds \mathcal{K}(s) \right] 1_{\hbar\omega}([H_S, \cdot]) \mathcal{L}^*(t, t_0), \quad (3.1.5)$$

kde $1_{\hbar\omega}([H_S, \cdot])$ je projektor do podprostoru vlastních vektorů operátoru $[H_S, \cdot]$ příslušných vlastnímu číslu $\hbar\omega$.

Dá se snadno ukázat, že operátory

$$X(\omega) = \sum_{\epsilon - \epsilon' = \hbar\omega} P(\epsilon) X P(\epsilon')$$

jsou vlastními vektory operátoru $[H_S, \cdot]$ příslušné vlastnímu číslu $\hbar\omega$, kde sumací přes ω získáme opět $X = \sum_{\omega} X(\omega)$. A tedy projektor $1_{\hbar\omega}([H_S, \cdot])$ provádí zobrazení $X \rightarrow X(\omega)$.

Dosazením do (3.1.5) pak dostáváme rovnici

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\omega} \sum_{\substack{\epsilon_1 - \epsilon_2 = \hbar\omega, \\ \epsilon_3 - \epsilon_4 = \hbar\omega}} P(\epsilon_1) \int_0^{\infty} ds \text{Tr}_R([H_I(s), [H_I, P(\epsilon_3) \rho_S(t) P(\epsilon_4) \otimes \rho_R]]) P(\epsilon_2).$$

Rozepíšeme ji dále do tvaru

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} = & -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\epsilon_1 - \epsilon_2 = \epsilon_3 - \epsilon_4} P(\epsilon_1) \int_0^{\infty} ds \left[\text{Tr}_R \left(H_I^\dagger(s) H_I(P(\epsilon_3) \rho_S(t) P(\epsilon_4) \otimes \rho_R) \right) - \right. \\ & - \text{Tr}_R \left(H_I(s) (P(\epsilon_3) \rho_S(t) P(\epsilon_4) \otimes \rho_R) H_I^\dagger(s) \right) - \\ & - \text{Tr}_R \left(H_I(P(\epsilon_3) \rho_S(t) P(\epsilon_4) \otimes \rho_R) H_I^\dagger(s) \right) + \\ & \left. + \text{Tr}_R \left((P(\epsilon_3) \rho_S(t) P(\epsilon_4) \otimes \rho_R) H_I^\dagger H_I(s) \right) \right] P(\epsilon_2). \end{aligned}$$

Nyní budeme předpokládat, že interakční hamiltonián je ve tvaru

$$H_I = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha} = \sum_{\omega, \alpha} A_{\alpha}(\omega) \otimes B_{\alpha},$$

kde A_{α} je libovolný operátor na prostoru \mathcal{H}_S a B_{α} je libovolný operátor na prostoru \mathcal{H}_R a $A_{\alpha}(\omega)$ jsou pak příslušné projekce vůči operátoru $1_{\hbar\omega}([H_S, \cdot])$. Tento tvar je výhodný z hlediska časového vývoje

$$H_I(s) = \sum_{\omega, \alpha} e^{i\omega s} A_{\alpha}(\omega) B_{\alpha}(s).$$

Dosazením těchto tvarů pak získáme

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha,\beta} \int_0^\infty ds \left[- \sum_{\epsilon,\omega,\omega'} e^{-i\omega s} P(\epsilon) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega') P(\epsilon) \rho_S(t) \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger(s) B_\beta \rho_R \right] + \right. \\ \left. + \sum_{\epsilon_1-\epsilon_2=\epsilon_3-\epsilon_4} \sum_{\omega,\omega'} P(\epsilon_1) A_\beta(\omega) P(\epsilon_2) \rho_S(t) P(\epsilon_3) A_\alpha^\dagger(\omega') P(\epsilon_4) \times \right. \\ \left. \times \left(e^{i\omega s} \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger B_\beta(s) \rho_R \right] + e^{-i\omega s} \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger(s) B_\beta \rho_R \right] \right) - \right. \\ \left. - \sum_{\epsilon,\omega,\omega'} e^{i\omega s} \rho_S(t) P(\epsilon) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega') P(\epsilon) \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger B_\beta(s) \rho_R \right] \right]. \end{aligned}$$

Vzhledem k definici $A_\alpha(\omega)$ lze pak řadu indexů sloučit do jediného a výsledkem pak bude

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \int_0^\infty ds \left[-e^{-i\omega s} A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \rho_S(t) \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger(s) B_\beta \rho_R \right] + \right. \\ \left. + A_\beta(\omega) \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega) \left(e^{i\omega s} \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger B_\beta(s) \rho_R \right] + e^{-i\omega s} \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger(s) B_\beta \rho_R \right] \right) - \right. \\ \left. - e^{i\omega s} \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger B_\beta(s) \rho_R \right] \right]. \end{aligned}$$

Označíme

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) &= \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty ds \left(e^{i\omega s} \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger B_\beta(s) \rho_R \right] + e^{-i\omega s} \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger(s) B_\beta \rho_R \right] \right) \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^\infty ds e^{-i\omega s} \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger(s) B_\beta \rho_R \right], \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

kde jsme využili stacionarity ρ_R , a dále označíme

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) &= \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty ds \left(e^{i\omega s} \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger B_\beta(s) \rho_R \right] - e^{-i\omega s} \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger(s) B_\beta \rho_R \right] \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^\infty ds \text{sgn}(s) e^{-i\omega s} \text{Tr}_R \left[B_\alpha^\dagger(s) B_\beta \rho_R \right]. \end{aligned}$$

Platí, že obě matice jsou hermitovské.

Výsledný tvar Lindbladových generátorů v limitě slabé vazby je pak dán disipativní částí a efektivním hamiltoniánem. Disipativní část pak má tvar

$$\mathcal{D}^*[\rho(t)] = \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left(A_\beta(\omega) \rho(t) A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \rho(t) \right\} \right). \quad (3.1.7)$$

A Hamiltonián nabývá tvaru

$$H_L = \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega). \quad (3.1.8)$$

Navíc pro něj platí, že komutuje s Hamiltoniánem systému tj.

$$[H_L, H_S] = 0.$$

Tedy časový vývoj řízený efektivním hamiltoniánem nemíchá diagonální a off-diagonální bloky. Totéž platí pro míchání diagonálních a off-diagonálních bloků v případě disipační části. Důkaz lze provést poměrně přímočarým výpočtem

$$\begin{aligned} P(\epsilon) \mathcal{D}^* [\rho(t)] P(\epsilon') &= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) [P(\epsilon) A_{\beta} P(\epsilon + \omega) \rho(t) P(\epsilon' + \omega) A_{\alpha} P(\epsilon')] \\ &\quad - \frac{1}{2} P(\epsilon) A_{\alpha} P(\epsilon - \omega) A_{\beta} P(\epsilon) \rho(t) P(\epsilon') \\ &\quad - \frac{1}{2} P(\epsilon') \rho(t) P(\epsilon') A_{\alpha} P(\epsilon' - \omega) A_{\beta} P(\epsilon')], \end{aligned}$$

kde stojí za povšimnutí, že diagonální bloky spolu souvisí vždy po diagonálách rovnoběžných s hlavní diagonálou. Toho lze využít pro hledání stacionárního stavu, kde stačí předpokládat, že matice je hustoty je blokově diagonální.

Pro úplnost pak uvedeme duální tvar generátorů, konkrétně pak jejich disipativní části

$$\mathcal{D}[X] = \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left(A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) X A_{\beta}(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), X \right\} \right), \quad (3.1.9)$$

pro kterou přímo z definice plyne

$$\mathcal{D}[\mathbb{I}] = 0$$

3.2 Vlastnosti generátorů v limitě slabé vazby

V předchozí části jsme zavedli operátory $A_{\alpha}(\omega)$ jako “vlastní vektory” operátoru $[H_S, \cdot]$. Snadno nahlédneme, že explicitní tvar takto zavedených operátorů je

$$A_{\alpha}(\omega) \equiv \sum_{\epsilon' - \epsilon = \hbar\omega} P(\epsilon') A_{\alpha} P(\epsilon) = A_{\bar{\alpha}}^{\dagger}(-\omega), \quad (3.2.1)$$

kde $\bar{\alpha}$ značí index odpovídající hermitovskému sdruženému operátoru A_{α} , tj. platí

$$A_{\bar{\alpha}} = A_{\alpha}^{\dagger}.$$

Ve speciálním případě, kdy A_{α} je hermitovské, pak platí jednodušší relace

$$A_{\alpha}(\omega) = A_{\alpha}^{\dagger}(-\omega).$$

První důležitou vlastností korelační matice pro případ rezervoaru v rovnováze na teplotě β_R je symetrie

$$\gamma_{\beta\alpha}(-\omega) = e^{\beta_R \hbar\omega} \gamma_{\bar{\alpha}\bar{\beta}}(\omega). \quad (3.2.2)$$

Tato vlastnost je klíčová pro určení stacionárních stavů a formulaci detailní rovnováhy, a mimo jiné z ní plyne symetričnost matice $\gamma_{\alpha\beta}(0)$ v případě hermitovských operátorů A_{α} .

Symetrie (3.2.2) plyne z definice (3.1.6), viz

$$\begin{aligned}
\gamma_{\beta\alpha}(-\omega) &= \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \text{Tr}_R \left[A_{\beta}^{\dagger}(t) A_{\alpha} \frac{1}{Z} e^{-\beta_R H_S} \right] \\
&= \frac{1}{Z\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \text{Tr}_R \left[e^{-\frac{1}{i\hbar} H_S t} A_{\beta}^{\dagger} e^{\frac{1}{i\hbar} H_S t} A_{\alpha} e^{-\beta_R H_S} \right] \\
&= \frac{1}{Z\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \text{Tr}_R \left[e^{-\frac{1}{i\hbar} H_S(t+i\hbar\beta_R)} A_{\beta}^{\dagger} e^{\frac{1}{i\hbar} H_S(t+i\hbar\beta_R)} e^{-\beta_R H_S} A_{\alpha} \right] \\
&= \frac{1}{Z\hbar^2} \int_{-\infty-i\hbar\beta_R}^{\infty-i\hbar\beta_R} dt e^{-i\omega(t+i\hbar\beta_R)} \text{Tr}_R \left[e^{-\frac{1}{i\hbar} H_S t} A_{\alpha} e^{\frac{1}{i\hbar} H_S t} A_{\beta}^{\dagger} e^{-\beta_R H_S} \right] \\
&= e^{\beta_R \hbar \omega} \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \text{Tr}_R \left[A_{\alpha}(t) A_{\beta}^{\dagger} \rho_R \right].
\end{aligned}$$

3.2.1 Stacionární stav

Využijeme nyní odvozený tvar spolu se symetrií (3.2.2) pro explicitní nalezení stacionárních stavů. Hledíme stacionární stavy ve tvaru

$$\rho_S = \sum_{\epsilon} f(\epsilon) P(\epsilon).$$

Takovýto tvar komutuje jak s H_S tak s H_L tj. stačí splnit $\mathcal{D}^*[\rho_S] = 0$. Nejprve tedy upravíme tvar (3.1.7) s pomocí relace (3.2.1) do tvaru

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}^*[\rho_S] &= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \left(\gamma_{\alpha\beta}(\omega) A_{\beta}(\omega) \rho_S A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), \rho_S \right\} \right) \\
&= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \left(\gamma_{\alpha\beta}(\omega) A_{\beta}^{\dagger}(-\omega) \rho_S A_{\bar{\alpha}}(-\omega) - \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), \rho_S \right\} \right) \\
&= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \left(\gamma_{\bar{\alpha}\bar{\beta}}(-\omega) A_{\beta}^{\dagger}(\omega) \rho_S A_{\alpha}(\omega) - \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), \rho_S \right\} \right) \\
&= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \left(\gamma_{\bar{\beta}\bar{\alpha}}(-\omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \rho_S A_{\beta}(\omega) - \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), \rho_S \right\} \right).
\end{aligned}$$

Do takto upraveného tvaru pak dosadíme předpokládaný tvar stacionární matice hustoty a dostaneme

$$\begin{aligned}
P(\epsilon) \mathcal{D}^*[\rho_S] P(\epsilon) &= \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} [\gamma_{\bar{\beta}\bar{\alpha}}(-\omega) f(\epsilon + \hbar\omega) P(\epsilon) A_{\alpha} P(\epsilon + \hbar\omega) A_{\beta} P(\epsilon) \\
&\quad - \gamma_{\alpha\beta}(\omega) f(\epsilon) P(\epsilon) A_{\alpha} P(\epsilon + \hbar\omega) A_{\beta} P(\epsilon)],
\end{aligned}$$

kde vidíme, že operátory jsou stejné až na prefaktor. Tedy podmínka stacionarity se redukuje na nulovost rovnice pro prefaktory, kterou s využitím symetrie (3.2.2) pro korelační matici získáme ve tvaru

$$e^{\beta_R \hbar \omega} f(\epsilon + \hbar \omega) = f(\epsilon). \quad (3.2.3)$$

A tedy stacionární stav je

$$\rho_S = \frac{1}{Z} e^{-\beta_R H_S}. \quad (3.2.4)$$

Jednoznačnost takového stavu je pak dána nenulovostí prvků korelační matice. Pro konkrétnější vyšetření pak zavedme množinu M takovou, že

$$M = \{\omega : \exists \alpha, \beta \quad \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \neq 0\}.$$

Tuto množinu můžeme pak setřídit a přistupovat ke všem prvkům pomocí indexu tj. M_i je i -tý nejmenší prvek množiny M . Dále pak zavedme množiny $N(\epsilon)$, které reprezentují množiny všech stavů ϵ' takových, že se tam můžu pomocí přeskoků z množiny M , dostat. Tj.

$$N(\epsilon) = \left\{ \epsilon' : \exists k \in \mathbb{N}^{|M|} \quad \epsilon' = \sum_{i=1}^{|M|} k_i M_i \right\},$$

kde $|M|$ značí počet prvků množiny M . Pro tyto množiny pak platí

$$\forall \epsilon, \epsilon' : \quad N(\epsilon) = N(\epsilon') \vee N(\epsilon) \cap N(\epsilon') = \emptyset.$$

Tj. množiny jsou buďto shodné nebo disjunkt ní a dělí nám tedy disjunkt ně energetické spektrum na domény. V rámci takovýchto domén je pak stacionární stav jednoznačně dán, respektive poměr vah jednotlivých energetických podprostorů je jednoznačně určen, což plyne z (3.2.3), a jednotlivým doménám pak lze přiřadit libovolné váhy. V takovémto případě, kdy stacionární stav není jednoznačně určen, je stacionární stav (3.2.4) pouze jedním z mnoha.

Pro takto definovanou stacionární distribuci, pak s využitím symetrie (3.2.2) platí

$$\mathcal{D}^* [X\rho] = \mathcal{D} [X] \rho, \quad (3.2.5)$$

kde ρ je stacionární distribuce podle (3.2.4). Tato věta se dá i obrátit a to tak, že pokud platí (3.2.5) pro nějakou distribuci ρ , pak distribuce ρ je vůči disipátoru stacionární. Viz

$$\mathcal{D}^* [\rho] = \mathcal{D} [\mathbb{I}] \rho = 0,$$

což plyne přímo z duálního tvaru disipátoru (3.1.9). Rovnice (3.2.5) se někdy v literatuře (viz [Aga73] nebo [KFGV77]) označuje již přímo jako detailní rovnováha, jak později ukážeme, je to ekvivalentní s formulací detailní rovnováhy v podobě symetrie pro korelační funkce. Důkaz

tvrzení (3.2.5) pak provedeme opět přímým výpočtem s využitím relací (3.2.1) a (3.2.2)

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}^* [X\rho] &= \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_{\beta}(\omega) X\rho A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), X\rho \right\} \right] \\
&= \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_{\beta}(\omega) X A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \rho e^{-\beta_R \hbar \omega} - \frac{1}{2} \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), X \right\} \rho \right] \\
&= \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[e^{-\beta_R \hbar \omega} A_{\beta}(\omega) X A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), X \right\} \right] \rho \\
&= \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \left[\gamma_{\alpha\beta}(\omega) e^{-\beta_R \hbar \omega} A_{\beta}^{\dagger}(-\omega) X A_{\bar{\alpha}}(-\omega) - \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \frac{1}{2} \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), X \right\} \right] \rho \\
&= \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \left[\gamma_{\bar{\beta}\bar{\alpha}}(-\omega) e^{-\beta_R \hbar \omega} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) X A_{\beta}(\omega) - \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), X \right\} \right] \rho \\
&= \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) X A_{\beta}(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), X \right\} \right] \rho \\
&= \mathcal{D}[X] \rho.
\end{aligned}$$

Dalším faktem je, že rovnice (3.2.5) přímo implikuje rovnici

$$\mathcal{D}^* [\rho X] = \rho \mathcal{D}[X].$$

Důkaz je opět jednoduchý a využívá cykličnosti stopy

$$\begin{aligned}
\text{Tr} (\mathcal{D}^* [\rho X] Y) &= \text{Tr} (\rho X \mathcal{D}[Y]) = \text{Tr} (X \mathcal{D}[Y] \rho) = \\
&= \text{Tr} (X \mathcal{D}^* [Y \rho]) = \text{Tr} (\mathcal{D}[X] Y \rho) = \text{Tr} (\rho \mathcal{D}[X] Y).
\end{aligned}$$

3.2.2 Detailní rovnováha

Zde se pokusíme formulovat detailní rovnováhu jako analogii ke klasické detailní rovnováze (2.1.4), přičemž se prozatím omezíme pouze na situaci čisté disipace. Nejprve vyšetříme stacionaritu stavu ρ_S v podobě rovnice

$$\text{Tr} [P(\epsilon, \vec{a}) \mathcal{D}^* \rho_S] = 0,$$

kde $P(\epsilon, \vec{a})$ je projektor do stavu s energií ϵ , kde hamiltonián doplníme sadou měřitelných veličin A_i do úplné množiny pozorovatelných, přičemž hodnoty těchto veličin označíme souhrně jako \vec{a} . Pokud podmínku stacionarity matice hustoty ρ_S rozdělíme na část s antikomutátorem, tzv. kompenzátořem, a zbytek a dosadíme explicitní tvar stacionárního stavu, pak dostaneme výše uvedenou rovnici ve tvaru

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_{\epsilon', \vec{b}} \frac{e^{-\beta_R \epsilon'}}{Z} \sum_{\alpha, \beta} \text{Tr} \left[\gamma_{\alpha\beta}(\epsilon - \epsilon') P(\epsilon, \vec{a}) A_{\beta} P(\epsilon', \vec{b}) A_{\alpha}^{\dagger} - \right. \\
&\quad \left. - \delta(\epsilon - \epsilon') \delta(\vec{a} - \vec{b}) P(\epsilon, \vec{a}) \sum_{\omega} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega) \right].
\end{aligned}$$

Po dalších úpravách dostáváme s pomocí (3.2.2)

$$\begin{aligned} \sum_{\epsilon', \vec{b}} \frac{e^{-\beta_R \epsilon}}{Z} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta} (\epsilon' - \epsilon) \text{Tr} \left[P(\epsilon, \vec{a}) A_\alpha^\dagger P(\epsilon', \vec{b}) A_\beta \right] &= \\ &= \sum_{\epsilon', \vec{b}} \frac{e^{-\beta_R \epsilon'}}{Z} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta} (\epsilon - \epsilon') \text{Tr} \left[P(\epsilon', \vec{b}) A_\alpha^\dagger P(\epsilon, \vec{a}) A_\beta \right], \end{aligned}$$

což je stacionarita známá z klasické fyziky ve tvaru

$$\sum_b p(a) W(b|a) = \sum_b W(a|b) p(b),$$

kde jsme zavedli nové souhrné označení a pro celý stav reprezentovaný hodnotami pozorovatelných A_i a energií ϵ , pak pod $p(a)$ rozumíme pravděpodobnost naměření hodnot odpovídající stavu a , přičemž tato pravděpodobnost, jak se ukazuje, závisí pouze na energii stavu a za předpokladu, že jsme ve stacionárním stavu, a W jsou rychlosti přechodů ve tvaru

$$W(a|b) = \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta} (E(a) - E(b)) \text{Tr} \left[P(b) A_\alpha^\dagger P(a) A_\beta \right],$$

kde $P(a)$ je projektor do stavu a . Samotná detailní rovnováha se pak týká takto určených rychlostí přechodu a plyne ze symetrie (3.2.2). Provedme následující úpravy

$$\begin{aligned} W(a|b) &= \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta} (E(a) - E(b)) \text{Tr} \left[P(b) A_\alpha^\dagger P(a) A_\beta \right] \\ &= e^{\beta_R (E(b) - E(a))} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\beta\alpha} (E(b) - E(a)) \text{Tr} \left[P(b) A_\alpha^\dagger P(a) A_\beta \right] \\ &= \frac{p(a)}{p(b)} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta} (E(b) - E(a)) \text{Tr} \left[P(b) A_\beta P(a) A_\alpha^\dagger \right] \\ &= \frac{p(a)}{p(b)} W(b|a), \end{aligned}$$

kde klíčový krok je ve využití zmiňované symetrie a ve výsledku pak dostáváme detailní rovnováhu v klasickém tvaru. Klíčové pro fungování detailní rovnováhy v této podobě je, že vybrané stavy komutují s hamiltoniánem systému (avšak můžu z nich vybrat libovolné) a platí symetrie (3.2.2). Další zajímavý fakt je, že pro hamiltonián systému úplně degenerovaný, tj. $H_S \sim \mathbb{I}$ je korelační matice *reálná a symetrická* a detailní rovnováha platí pro stavy v *libovolné bázi*.

Detailní rovnováhu však můžeme dostat i ve tvaru

$$\text{Tr} \left(\rho e^{tD} [X^\dagger] Y \right) = \text{Tr} \left(\rho e^{tD} [Y^\dagger] X \right)^* = \text{Tr} \left(\rho X^\dagger e^{tD} [Y] \right), \quad (3.2.6)$$

kde X, Y jsou libovolné operátory a ρ je stacionární matice hustoty, pro kterou platí (3.2.5).

Odvození je pak jednoduché

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left(\rho e^{t\mathcal{D}} [X^\dagger] Y \right) &= \text{Tr} \left(e^{t\mathcal{D}^*} [\rho X^\dagger] Y \right) \\
&= \text{Tr} \left(\rho X^\dagger e^{t\mathcal{D}} [Y] \right) \\
&= \text{Tr} \left((e^{t\mathcal{D}} [Y])^\dagger X \rho \right)^* \\
&= \text{Tr} \left(\rho e^{t\mathcal{D}} [Y^\dagger] X \right)^*,
\end{aligned}$$

kde jsme nepoužili nic jiného, než vztah (3.2.5), cykličnost stopy a vztah stopy vůči komplexnímu sdružení. Z detailní rovnováhy v tomto tvaru vzhledem k libovůli operátorů X a Y opět plyne rovnice (3.2.5), která je tedy s detailní rovnováhou ekvivalentní.

Zbývá ještě ukázat, jaký je vztah takto formulované detailní rovnováhy k detailní rovnováze ve tvaru

$$W(a|b) = \frac{p(a)}{p(b)} W(b|a).$$

Pokud dosadíme do (3.2.6) v diferenciálním tvaru za X a Y projektory do stavů, ve kterých je stacionární matice hustoty ρ diagonální, pak dostáváme

$$\begin{aligned}
\text{Tr} (\rho \mathcal{D} [P(a)] P(b)) &= p(b) \text{Tr} (P(b) \mathcal{D} [P(a)]) \\
&= p(b) \text{Tr} \left(P(b) \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) P(a) A_{\beta}(\omega) - \frac{1}{2} \{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), P(a) \} \right] \right) \\
&= p(b) \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta} (E(a) - E(b)) \text{Tr} \left(P(b) A_{\alpha}^{\dagger} P(a) A_{\beta} \right) - \\
&\quad - \frac{1}{2} p(b) \sum_{\alpha, \beta, c} \gamma_{\alpha\beta} (E(c) - E(a)) \text{Tr} \left(P(b) A_{\alpha}^{\dagger} P(c) A_{\beta} P(a) \right) - \\
&\quad - \frac{1}{2} p(b) \sum_{\alpha, \beta, c} \gamma_{\alpha\beta} (E(c) - E(a)) \text{Tr} \left(P(a) A_{\alpha} P(c) A_{\beta} P(b) \right),
\end{aligned}$$

kde poslední dva členy jsou pro různá a a b nulová a první člen dává rychlost přechodu $W(a|b)$. Obdobně pak dosazením do pravé strany a porovnáním získáme detailní rovnováhu ve tvaru

$$W(a|b) p(b) = W(b|a) p(a), \quad (3.2.7)$$

která je speciálním případem detailní rovnováhy (3.2.6).

V této kapitole jsme odvodili efektivní dynamiku otevřených systémů v případě limity slabé vazby. Přestože se jedná o nejjednodušší režim otevřených systémů, ukazuje se, že tato třída je poměrně široká. Dále jsme se věnovali popisu systému v kontaktu s teplotním rezervoírem v rovnováze při inverzní teplotě β a ukázali jsme, jak tento předpoklad generuje symetrii pro korelační matice a indukuje explicitní tvar stacionárního stavu systému v kanonickém tvaru. Tuto symetrii jsme dále využili pro formulaci detailní rovnováhy pro čistě disipativní mechaniku systému. Detailní rovnováhu jsme formulovali několika odlišnými způsoby a přesvědčili se v jakém smyslu jsou ekvivalentní. Ukazuje se, že nejobecnější formulace detailní rovnováhy je skrze rovnici (3.2.5), ze které již zbylé formy (jedná se o relace (3.2.6)

a (3.2.7)) detailní rovnováhy plynou. V další části ukážeme jak lze tuto identitu zobecnit zahrnutím volného hamiltonovského vývoje. To využijeme k odvození jistých symetrií na úrovni dekoherenčního funkcionálu, zobecňujícího klasickou dráhovou míru (2.2.9).

Kapitola 4

Symetrie dekoherenčního funkcionálu při časové inverzi

Řada vztahů v předchozí části uvedených v jistých obměnách platí obecně nejen pro disipativní dynamiku reprezentovanou zde Lindbladovými generátory, ale i pro mnohem obecnější časový vývoj zahrnující nejen unitární dynamiku. Klíčovou změnou je pak především zvážení vlivu časové inverze, jak na hamiltonovský vývoj, tak na disipativní část, kde se ukazuje, že mají řadu klíčových charakteristik společných. Jedná se především o zobečnění idejí uvedených v [CRJ⁺04] na disipativní mechaniku, spolu s opravou symetrie u dekoherenčního funkcionálu a zahrnutí poznatků z [KFGV77] a [Aga73]. Další část je pak věnována zavedení dekoherenčního funkcionálu jakožto zobečnění dráhové míry (2.2.9) a zobečnění relace (2.2.10). Hlavním výsledkem této kapitoly pak bude odvození symetrie tohoto funkcionálu vůči časové inverzi. Ukážeme také, jak je tato symetrie narušena v nestacionárních procesech.

4.1 Detailní rovnováha pro obecné dynamiky

Zavedme tedy nyní obecnou markovovskou dynamiku na kvantových systémech. Konkrétně pak uvažujme obecný generátor časového vývoje \mathcal{L}^* a jeho duál \mathcal{L} ve smyslu

$$\text{Tr} (X\mathcal{L}^* [\rho]) = \text{Tr} (\mathcal{L} [X] \rho).$$

Dále generátor časového vývoje splňuje invarianci vůči hermitovskému sdružení a podmínku na vývoj identity

$$\mathcal{L} [X]^\dagger = \mathcal{L} [X^\dagger], \quad (4.1.1)$$

$$\mathcal{L} [\mathbb{I}] = 0, \quad (4.1.2)$$

kde druhá podmínka pak zaručuje zachování stopy matice hustoty

$$0 = \text{Tr} (\mathcal{L}^* [\rho]) = \text{Tr} (\mathcal{L} [\mathbb{I}] \rho),$$

pro každou matici hustoty ρ , respektive obecněji zaručuje invarianci stopy vůči časovému vývoji, což je ekvivalentní v klasickém případě $\rho \circ \varphi_{t_0,t} = \rho$

$$\text{Tr} \left[e^{\mathcal{L}^*(t-t_0)} (X) \right] = \text{Tr} \left[X e^{\mathcal{L}(t-t_0)} (\mathbb{I}) \right] = \text{Tr} [X].$$

Ke každému časovému vývoji pak definujeme vývoj časově inverzní označený $\mathcal{L}_\#$ ev. $\mathcal{L}_\#^*$, definovaný pomocí operátoru časové inverze \mathbb{T} podle vztahu

$$\mathcal{L}_\#^* [\rho] = \mathbb{T}^\dagger \mathcal{L}_D^* \left[\mathbb{T} \rho \mathbb{T}^\dagger \right] \mathbb{T} - \mathbb{T}^\dagger \mathcal{L}_H^* \left[\mathbb{T} \rho \mathbb{T}^\dagger \right] \mathbb{T},$$

kde \mathcal{L}_D^* je disipativní část generátoru \mathcal{L}^* a \mathcal{L}_H^* odpovídá unitární dynamice. Můžeme to také chápat tak, že disipativní část dynamiky má sudou paritu vůči prohození počátečního a koncového času, kdežto unitární část ji má lichou. Nebo lépe, že musíme otočit hamiltonovské toky v systému, kdežto toky odpovídající disipaci, se vůči časové inverzi zachovávají. Takto zavedená časová inverze pak zaručuje, že $\mathbb{T} \rho \mathbb{T}^\dagger$ je stacionárním stavem $\mathcal{L}_\#$, pouze pokud je ρ stacionární jak pro hamiltonovskou část generátoru \mathcal{L} tak pro disipativní část generátoru \mathcal{L} .

Nyní se již podíváme na formulaci detailní rovnováhy. Mějme takovou matici hustoty ρ , že pro ni platí

$$\mathbb{T} \mathcal{L}^* [X \rho] \mathbb{T}^\dagger = \mathcal{L}_\# [X_\#] \mathbb{T} \rho \mathbb{T}^\dagger, \quad (4.1.3)$$

kde $X_\#$ značí časově invertovaný operátor X tj.

$$X_\# = \mathbb{T}^\dagger X \mathbb{T} = \mathbb{T} X \mathbb{T}^\dagger, \quad (4.1.4)$$

kde poslední rovnost plyne z rovnice (B.5). Rovnice (4.1.3) je tedy zobecněním (3.2.5) a platí, že ρ splňující výše uvedenou rovnici je stacionární. Důkaz provedeme opět analogickým způsobem jako v případě (3.2.5) tj.

$$\mathcal{L}^* [\rho] = \mathbb{T}^\dagger \mathcal{L}_\# [\mathbb{I}] \rho \mathbb{T} = 0.$$

Pak pro ρ platí detailní rovnováha ve tvaru

$$\text{Tr} \left(\rho e^{t\mathcal{L}} [X^\dagger] Y \right) = \text{Tr} \left(\mathbb{T} \rho \mathbb{T}^\dagger e^{t\mathcal{L}_\#} [Y_\#^\dagger] X_\# \right). \quad (4.1.5)$$

Odvození pak proběhne podle očekávání přímým výpočtem s tím, že se využije vlastností (4.1.3), (4.1.4), (B.7) a (B.6).

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(\rho e^{t\mathcal{L}} [X^\dagger] Y \right) &= \text{Tr} \left(e^{t\mathcal{L}} [X^\dagger] Y \rho \right) \\ &= \text{Tr} \left(X^\dagger e^{t\mathcal{L}^*} [Y \rho] \right) \\ &= \text{Tr} \left(X^\dagger \mathbb{T}^\dagger \mathbb{T} e^{t\mathcal{L}^*} [Y \rho] \mathbb{T}^\dagger \mathbb{T} \right) \\ &= \text{Tr} \left(X^\dagger \mathbb{T}^\dagger e^{t\mathcal{L}_\#} [Y_\#] \mathbb{T} \rho \mathbb{T}^\dagger \mathbb{T} \right) \\ &= \text{Tr} \left(\mathbb{T}^\dagger X_\#^\dagger e^{t\mathcal{L}_\#} [Y_\#] \mathbb{T} \rho \mathbb{T}^\dagger \mathbb{T} \right) \\ &= \text{Tr} \left(\left(X_\#^\dagger e^{t\mathcal{L}_\#} [Y_\#] \mathbb{T} \rho \mathbb{T}^\dagger \right)^\dagger \right) \\ &= \text{Tr} \left(\mathbb{T} \rho \mathbb{T}^\dagger e^{t\mathcal{L}_\#} [Y_\#^\dagger] X_\# \right). \end{aligned}$$

Platí však i opačná relace, tj. že z rovnice (4.1.5) plyne podmínka (4.1.3). Při odvození tohoto faktu nejprve upravíme rovnici (4.1.5) do tvaru

$$\text{Tr} \left(\rho e^{t\mathcal{L}} [X^\dagger] Y \right) = \text{Tr} \left(e^{t\mathcal{L}_\#^*} [X_\# \mathbb{T} \rho \mathbb{T}^\dagger] Y_\#^\dagger \right),$$

kde dále provedeme záměnu $\rho \rightarrow \mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger$, $X \rightarrow X_\#$ a $\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L}_\#$. Tím dostáváme rovnici do tvaru

$$\mathrm{Tr} \left(\mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger e^{t\mathcal{L}_\#} \left[X_\#^\dagger \right] Y \right) = \mathrm{Tr} \left(e^{t\mathcal{L}^*} [X\rho] Y_\#^\dagger \right),$$

a použijeme vztahy (B.7), (B.6) čímž dostáváme relaci

$$\mathrm{Tr} \left(\mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger e^{t\mathcal{L}_\#} \left[X_\#^\dagger \right] Y \right) = \mathrm{Tr} \left(\mathbb{T}e^{t\mathcal{L}^*} \left[\rho X^\dagger \right] \mathbb{T}^\dagger Y \right),$$

což je již rovnice (4.1.3) v integrálním tvaru s tím, že Y volíme ve tvaru

$$Y = |\phi\rangle\langle\psi|.$$

Tedy detailní rovnováha v podobě symetrie pro korelační funkce (4.1.5) je ekvivalentní podmínce (4.1.3).

4.2 Časová inverze a disipativní dynamika

Jak bylo předem avizováno, takto zavedená dynamika je obecná, ale je přirozenou otázkou, jestli v modelu markovovské otevřené dynamiky v limitě slabé vazby zavedené v předchozí části, existuje stacionární matice hustoty ρ splňující detailní rovnováhu. Jako první vyšetříme část dynamiky odpovídající unitárnímu vývoji, tj. jako první situaci vezmeme generátory ve tvaru

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^*[\rho] &= \frac{1}{i\hbar} [H, \rho], \\ \mathcal{L}[X] &= \frac{1}{i\hbar} [X, H] \end{aligned}$$

a k nim odpovídající časové inverze

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\#^*[\rho] &= -\mathbb{T}^\dagger \mathcal{L}^* \left[\mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger \right] \mathbb{T} = -\mathbb{T}^\dagger \frac{1}{i\hbar} [H, \mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger] \mathbb{T} = \frac{1}{i\hbar} \left[\mathbb{T}^\dagger H \mathbb{T}, \rho \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} [H_\#, \rho], \\ \mathcal{L}_\#[X] &= -\mathbb{T}^\dagger \mathcal{L} \left[\mathbb{T}X\mathbb{T}^\dagger \right] \mathbb{T} = \mathbb{T}^\dagger \frac{1}{i\hbar} [H, \mathbb{T}X\mathbb{T}^\dagger] \mathbb{T} = -\frac{1}{i\hbar} \left[\mathbb{T}^\dagger H \mathbb{T}, X \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} [X, H_\#]. \end{aligned}$$

Takováto dynamika již automaticky splňuje podmínky (4.1.2) a (4.1.1), zbývá tedy ověřit podmínku, že existuje takový stacionární stav ρ , pro který platí (4.1.3). Vezměme nejprve libovolný stacionární stav ρ , tj. $[H, \rho] = 0$, a přímým výpočtem s využitím (B.6) odvodíme následující relaci

$$\begin{aligned} \mathbb{T} \mathcal{L}^* [X\rho] \mathbb{T}^\dagger &= \mathbb{T} \mathcal{L}^* [X\rho] \mathbb{T}^\dagger \\ &= \mathbb{T} \frac{1}{i\hbar} [H, X\rho] \mathbb{T}^\dagger \\ &= \mathbb{T} \frac{1}{i\hbar} [H, X] \rho \mathbb{T}^\dagger \\ &= \frac{1}{i\hbar} [X_\#, H_\#] \mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger \\ &= \mathcal{L}_\#[X_\#] \mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger. \end{aligned}$$

Vzhledem k tomu, že rovnice (4.1.3) platí pro libovolné stacionární ρ značí, že podmínka detailní rovnováhy v případě unitárního vývoje je ekvivalentní stacionaritě.

Zbývá tedy vyšetřit zda-li existuje taková matice hustoty i pro disipativní část. Podmínka (4.1.1) je automaticky splněna díky tvaru rovnice (3.1.7) a hermitovskosti korelační matice $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$. Další podmínkou v řadě je podmínka (4.1.2), která je taktéž automaticky splněna z tvaru Lindbladových generátorů, tentokrát však v jejich duální formě (3.1.9). Poslední podmínka je pak zobecněním vztahu (3.2.5). Nejprve provedeme několik pomocných výpočtů, které nám pomohou zjistit, jak se disipátor chová vůči časové inverzi. Snadno pak zjistíme, že platí

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\gamma, A_\alpha(\omega)}^* [\mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger] &= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_\beta(\omega) \mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger \right\} \right] \\ &= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \mathbb{T} \left[\mathbb{T}^\dagger A_\beta(\omega) \mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger A_\alpha^\dagger(\omega) \mathbb{T} - \frac{1}{2} \left\{ \mathbb{T}^\dagger A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \mathbb{T}, \rho \right\} \right] \mathbb{T}^\dagger \\ &= \mathbb{T} \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}^T(\omega) \left[A_\beta^\#(\omega) \rho \left(A_\alpha^\#(\omega) \right)^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \left(A_\alpha^\#(\omega) \right)^\dagger A_\beta^\#(\omega), \rho \right\} \right] \mathbb{T}^\dagger \\ &= \mathbb{T} D_{\gamma^\#, A_\alpha^\#(\omega)}^* [\rho] \mathbb{T}^\dagger \end{aligned}$$

kde $\gamma^\#$ značí matici transponovanou (či komplexně sdruženou, díky hermitovskosti matice) a $A_\alpha^\#(\omega)$ značí časově invertované operátory $A_\alpha(\omega)$. Při výpočtu jsme použili výsledků z dodatku B, konkrétně pak jejich aplikací ve vztahu (4.1.1). Obdobně pak odvodíme stejný vztah i pro $\mathcal{D}_{\gamma, A_\alpha(\omega)}$ tj. ve výsledku pak máme rovnice

$$\mathcal{D}_{\gamma, A_\alpha(\omega)}^* [\mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger] = \mathbb{T} D_{\gamma^T, A_\alpha^\#(\omega)}^* [\rho] \mathbb{T}^\dagger, \quad (4.2.1)$$

$$\mathcal{D}_{\gamma, A_\alpha(\omega)} [X_\#] = \mathbb{T}^\dagger D_{\gamma^T, A_\alpha^\#(\omega)} [X] \mathbb{T}. \quad (4.2.2)$$

Z rovnice (4.2.2) pak plyne důsledek $\mathcal{D}_{\gamma^T, A_\alpha^\#(\omega)} [\mathbb{I}] = 0$. Ověříme opět přímým výpočtem

$$0 = \mathcal{D}_{\gamma, A_\alpha(\omega)} [\mathbb{I}] = \mathbb{T} \mathcal{D}_{\gamma^T, A_\alpha^\#(\omega)} [\mathbb{T}^\dagger \mathbb{T}] \mathbb{T}^\dagger = \mathbb{T} \mathcal{D}_{\gamma^T, A_\alpha^\#(\omega)} [\mathbb{I}] \mathbb{T}^\dagger.$$

A nakonec zobecníme rovnici (3.2.5), kterou převedeme do tvaru

$$\mathbb{T} \mathcal{D}_{\gamma, A_\alpha(\omega)}^* [X\rho] \mathbb{T}^\dagger = \mathbb{T}^\dagger \mathcal{D}_{\gamma, A_\alpha(\omega)} [X] \mathbb{T} \mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger = \mathcal{D}_{\gamma^T, A_\alpha^\#(\omega)} [X_\#] \mathbb{T}\rho\mathbb{T}^\dagger,$$

což je tvar ekvivalentní s (4.1.3). Jediný problém by mohl nastat, pokud matice hustoty pro unitární a disipativní část jsou různé. Avšak při odvozování detailní rovnováhy pro disipativní část jsme použili rovnice (3.2.5), která ovšem platí pouze v režimu, kdy je tepelný rezervoár v rovnováze. Za této podmínky jsme také v části 3.2.1 odvodili, že stacionární stav odpovídá kanonickému stavu a tedy komutuje s hamiltoniánem systému. Tedy situace, kdy matice hustoty pro unitární a disipativní část se liší v tomto režimu, nenastává.

Je vidět, že se nám podařilo zformulovat detailní rovnováhu dostatečně obecně, pouze s pomocí značně obecné podmínky (4.1.3). Tento přístup je odlišný od přístupu v [Roe06], kde se nediskutuje časová inverze, dále je pak nahrazena sada tří podmínek, vedoucí k detailní rovnováze, podmínkou jedinou. V některých publikacích se podmínka (4.1.3) již považuje za detailní rovnováhu, viz např. [KFGV77] a [Aga73], přičemž jsme ukázali, že tato podmínka a detailní rovnováha formulovaná v podobě (4.1.5) jsou ekvivalentní.

4.3 Dekoherenční funkcionál

V úvodní části, kde jsme se zabývali klasickou nerovnovážnou fyzikou, jsme odvodili symetrii (2.2.10) pro dráhové míry (2.2.9). Tato symetrie pak dále hraje klíčovou roli při formulování flukтуаčních relací (2.3.3). Vzhledem k tomu, že v kvantové mechanice trajektorie jakožto přirozený prostředek pro úplný popis časového vývoje systému skrze dráhovou míru ztrácí tuto svou schopnost. Je tedy otázkou, jestli existuje nějaké zobecnění dráhové míry v kvantové mechanice, které má dobrý smysl.

Ukazuje se, že takovým vhodným zobecněním dráhové míry (2.2.9), které poskytuje úplný popis časového vývoje systému, je dekoherenční funkcionál $\mathcal{D}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega, \omega')$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega, \omega') &= \text{Tr} \left[P(\omega_N) e^{(t_N - t_{N-1})\mathcal{L}^*} \left[P(\omega_{N-1}) e^{(t_{N-1} - t_{N-2})\mathcal{L}^*} \left[P(\omega_{N-2}) \dots \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. \dots P(\omega_1) e^{(t_1 - t_0)\mathcal{L}^*} \left[P(\omega_0) \rho(t_0) P(\omega'_0) \right] P(\omega'_1) \dots P(\omega'_{N-2}) \right] P(\omega'_{N-1}) \right] P(\omega'_N) \right], \end{aligned}$$

kde ω (resp. ω') jsou trajektorie stavů ω_i (resp. ω'_i) v časech t_i , a $P(\omega_i)$ jsou pak projektory do příslušných stavů (resp. podprostorů - nemusí být nutně jednodimenzionální), které však ve vší obecnosti nemusí pro různá ω_i komutovat. Stejně jako $P(\omega_i)$ a $P(\omega'_i)$ nemusí spolu komutovat.

Trajektorie stavů ω v sobě obsahují dva druhy informací, první je protokol, co se na systému v jednotlivých časech měří a druhou věcí jsou pak výsledky těchto měření. Pokud pak budeme mluvit o sčítání přes všechny trajektorie, máme tím vždy na mysli, sčítání přes všechny trajektorie výsledků měření pro pevný protokol měření. V tomto kontextu pak platí rovnice

$$\sum_{\omega, \omega' : \omega(t_N) = \omega'(t_N) = \alpha} \mathcal{D}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega, \omega') = \text{Tr} [P(\alpha) \rho(t_N)],$$

kde $\rho(t_N)$ je matice hustoty volně, tj. bez žádného provedeního měření cestou, do času t_N . Z požadavku na hermitovskost generátorů časového vývoje pak také rovnou vidíme, že dekoherenční funkcionál je v jistém smyslu hermitovský, neboť platí

$$\mathcal{D}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega, \omega')^* = \mathcal{D}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega', \omega),$$

a tedy $\mathcal{D}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega, \omega)$ jsou reálné a z (4.1.2) pro ně platí

$$\sum_{\omega} \mathcal{D}(\omega, \omega) = 1.$$

Je tedy patrné, že diagonální členy odpovídají dráhové míře (2.2.9), ve smyslu pravděpodobnost trajektorie ω při časovém vývoji rušeném měřením. Tímto jsme ukázali, že dekoherenční funkcionál obsahuje, jak informaci o časovém vývoji vyrušovaným občasným měřením, tak i o volné časovém vývoji.

Dále ukážeme, že pro dekoherenční funkcionál platí obdoba relace (2.2.10). Mějme $\rho(t_0) = \rho$ vyhovující podmínce detailní rovnováhy (4.1.3) a dále necht' tato stacionární matice hustoty komutuje alespoň s jednou trajektorií, např. s ω , pod čímž rozumíme

$$\forall i : [P(\omega_i), \rho] = 0,$$

čím však stále nevylučujeme, že $P(\omega_i)$ pro různá i nemusí komutovat, stejně tak nemusí být projekce stále jednorozměrné. Jako ilustrace pak může posloužit situace částice se spinem

bez přítomnosti vnějšího magnetického pole, pak má typicky degenerované energetické hladiny, a pokud matice hustoty splňující detailní rovnováhu závisí pouze na energiích, projektoři $P(\omega_i)$ mohou pak být projekce do spinů v různých směrech. S využitím výše zmíněné detailní rovnováhy a jejím rekurzivním použitím pak dostaneme

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega, \omega') &= \text{Tr} \left[P(\omega_N) e^{(t_N - t_{N-1})\mathcal{L}^*} \left[P(\omega_{N-1}) e^{(t_{N-1} - t_{N-2})\mathcal{L}^*} \left[P(\omega_{N-2}) \dots \right. \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. P(\omega_1) e^{(t_1 - t_0)\mathcal{L}^*} \left[\rho P(\omega_0) P(\omega'_0) \right] P(\omega'_1) \dots P(\omega'_{N-2}) \right] P(\omega'_{N-1}) \right] P(\omega'_N) \right] \\
&= \text{Tr} \left[P(\omega_N) e^{(t_N - t_{N-1})\mathcal{L}^*} \left[P(\omega_{N-1}) e^{(t_{N-1} - t_{N-2})\mathcal{L}^*} \left[P(\omega_{N-2}) \dots \right. \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. P(\omega_1) \rho \mathbb{T}^\dagger e^{(t_1 - t_0)\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_0) P(\pi\omega'_0) \right] \mathbb{T} P(\omega'_1) \dots P(\omega'_{N-2}) \right] P(\omega'_{N-1}) \right] P(\omega'_N) \right] \\
&= \text{Tr} \left[P(\omega_N) e^{(t_N - t_{N-1})\mathcal{L}^*} \left[P(\omega_{N-1}) e^{(t_{N-1} - t_{N-2})\mathcal{L}^*} \left[P(\omega_{N-2}) \dots \right. \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. \rho \mathbb{T}^\dagger e^{(t_2 - t_1)\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_1) e^{(t_1 - t_0)\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_0) P(\pi\omega'_0) \right] P(\pi\omega'_1) \right] \mathbb{T} \dots \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. P(\omega'_{N-2}) \right] P(\omega'_{N-1}) \right] P(\omega'_N) \right] \\
&= \text{Tr} \left[\rho \mathbb{T}^\dagger P(\pi\omega_N) e^{(t_N - t_{N-1})\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_{N-1}) e^{(t_{N-1} - t_{N-2})\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_{N-2}) \dots \right. \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. e^{(t_2 - t_1)\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_1) e^{(t_1 - t_0)\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_0) P(\pi\omega'_0) \right] P(\pi\omega'_1) \right] \dots \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. P(\pi\omega'_{N-2}) \right] P(\pi\omega'_{N-1}) \right] P(\pi\omega'_N) \mathbb{T} \right],
\end{aligned}$$

kde pomocí $\pi\omega_i$ značíme časově invertovaný stav ke stavu ω_i . Konkrétně tedy platí

$$\mathbb{T} P(\omega_i) \mathbb{T}^\dagger = P(\pi\omega_i).$$

A nakonec přerovnáme zpět do tvaru podobného původnímu s využitím (B.7) a cykličnosti stopy

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega, \omega') &= \text{Tr} \left[\mathbb{T}^\dagger \mathbb{T} \rho \mathbb{T}^\dagger P(\pi\omega_N) e^{(t_N - t_{N-1})\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_{N-1}) e^{(t_{N-1} - t_{N-2})\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_{N-2}) \dots \right. \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. e^{(t_2 - t_1)\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_1) e^{(t_1 - t_0)\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_0) P(\pi\omega'_0) \right] P(\pi\omega'_1) \right] \dots \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. P(\pi\omega'_{N-2}) \right] P(\pi\omega'_{N-1}) \right] P(\pi\omega'_N) \mathbb{T} \right] \\
&= \text{Tr} \left[P(\pi\omega'_N) e^{(t_N - t_{N-1})\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega'_{N-1}) e^{(t_{N-1} - t_{N-2})\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega'_{N-2}) \dots \right. \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. e^{(t_2 - t_1)\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega'_1) e^{(t_1 - t_0)\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega'_0) P(\pi\omega_0) \right] P(\pi\omega_1) \right] \dots \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. P(\pi\omega_{N-2}) \right] P(\pi\omega_{N-1}) \right] P(\pi\omega_N) \rho \right] \\
&= \text{Tr} \left[P(\pi\omega_0) e^{(t_1 - t_0)\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_1) e^{(t_2 - t_1)\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_2) \dots \right. \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. P(\pi\omega_{N-1}) e^{(t_N - t_{N-1})\mathcal{L}_\#} \left[P(\pi\omega_N) \rho \right] P(\pi\omega'_N) \right] P(\pi\omega'_{N-1}) \dots \right. \right. \\
&\dots \left. \left. \left. P(\pi\omega'_2) \right] P(\pi\omega'_1) \right] P(\pi\omega'_0) \right],
\end{aligned}$$

kde $\rho_{\#}$ značí časovou inverzi stacionární matice hustoty ρ a poslední výraz pak můžeme přepsat opět pomocí definice a dostáváme relaci

$$\mathcal{D}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega, \omega') = \mathcal{D}_{\rho_{\#}, \mathcal{L}_{\#}}(\Theta\omega, \Theta\omega'), \quad (4.3.1)$$

kde $\Theta\omega$ značí časově invertovanou cestu tj. $(\Theta\omega)_i = \pi\omega_{N-i}$. Tento výsledek je obdobou relace odvozené v [CRJ⁺04], avšak je v řadě aspektů obecnější. Relace zde uvedená platí pro obecnou dyniku splňující charakteristiky (4.1.1) a (4.1.2), a obecnou matici splňující detailní rovnováhu (4.1.5). Jediným omezením na trajektorie je pak fakt, že alespoň jedna z nich musí být kompatibilní s touto stacionární maticí hustoty. Je stále otevřenou otázkou, zda-li se toto omezení dá nějak obejít, ale zatím se jeví, že stacionární matice splňující detailní rovnováhu vybírá určitou preferovanou bázi.

Diagonální tvar dekoherenčního funkcionálu se pak dá zapsat ve tvaru

$$\frac{\mathcal{D}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega, \omega')}{\mathcal{D}_{\rho_{\#}, \mathcal{L}_{\#}}(\Theta\omega, \Theta\omega')} = 1, \quad (4.3.2)$$

kde je patrné, že tato rovnice je obdobou ve speciální případě klasické rovnice (2.2.10). Pokud se dále omezíme na takové trajektorie, které mají koncové a počáteční měření v bázi diagonalizující matici hustoty, tedy platí

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{\alpha} p_{\alpha} P(\alpha), \\ P(\omega_0) \rho P(\omega_0) &= P(\omega_0) \text{Tr} [\rho P(\omega_0)], \\ P(\omega_N) \rho P(\omega_N) &= P(\omega_N) \text{Tr} [\rho P(\omega_N)], \end{aligned}$$

pak můžeme danou symetrii zapsat jako symetrii pro dráhovou míru $\mathcal{P}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega) = \mathcal{D}_{\rho, \mathcal{L}}(\omega, \omega)$ ve tvaru,

$$\frac{\mathcal{P}_{\frac{1}{d}\mathbb{I}, \mathcal{L}}(\omega)}{\mathcal{P}_{\frac{1}{d}\mathbb{I}, \mathcal{L}_{\#}}(\Theta\omega)} = \frac{\text{Tr} [\mathbb{T}\rho\mathbb{T}^{\dagger} P(\pi\omega_N)]}{\text{Tr} [\rho P(\omega_0)]} = \frac{\text{Tr} [\rho P(\omega_N)]}{\text{Tr} [\rho P(\omega_0)]},$$

kde d je dimenze Hilbertova prostoru, a $\mathcal{P}_{\frac{1}{d}\mathbb{I}, \mathcal{L}_{\#}}$ jsou pak podmíněné pravděpodobnosti trajektorie ω . Pokud pak máme libovolné matice hustoty, pro které platí

$$\begin{aligned} P(\omega_0) \nu(t_0) P(\omega_0) &= P(\omega_0) \nu(\omega_0; t_0), \\ P(\omega_N) \nu(t_N) P(\omega_N) &= P(\omega_N) \nu(\omega_N; t_N), \end{aligned}$$

pak ze vztahu pro podmíněné hustoty plyne symetrie pro dráhovou míru ve tvaru

$$\frac{\mathcal{P}_{\nu(t_0), \mathcal{L}}}{\mathcal{P}_{\nu_{\#}(t_N), \mathcal{L}_{\#}}} = \frac{\nu(\omega_0; t_0)}{\rho(\omega_0)} \frac{\rho(\omega_N)}{\nu(\omega_N; t_N)}.$$

To můžeme považovat za zobecnění rovnice (2.2.10) pro danou specifickou třídu matic hustoty. Tedy na rozdíl od klasické mechaniky detailní rovnováha nám omezuje množinu pozorovatelných, a tedy i třídu matic hustoty a trajektorií pro kterou uvedená relace platí. Otázka, zda-li se dají tyto restriktivní podmínky obejít, je shodná s otázkou možného zobecnění rovnice (4.3.1).

Pokud tedy shrneme výsledky této sekce, tak zjišťujeme, že konzistentně jsme schopni formulovat detailní rovnováhu, jak pro disipativní mechaniku popsanou Lindbladovými generátory, tak i pro hamiltonovskou mechaniku, ve tvaru rovnice (4.1.5), která je ekvivalentní podmínce (4.1.3). V případě hamiltonovské mechaniky se navíc ukazuje, že tato podmínka (4.1.3) je ekvivalentní stacionaritě stavu ρ . Bezprostředním důsledkem detailní rovnováhy v tomto obecném tvaru je symetrie dekoherenčního funkcionálu (4.3.1), za předpokladu, že stav ρ splňuje detailní rovnováhu ve tvaru (4.1.5) a komutuje s trajektorií ω . To se ukazuje jako zobecnění klasické relace (2.2.10), platné nicméně pouze pro určitou uvažovanou třídu trajektorií. Otevřenou otázkou zůstává, zda je možné identitu (4.1.5) dále zobecnit, konkrétně, zda-li lze opustit podmínku omezující třídu přípustných trajektorií. Dalším pozorováním je skutečnost, že diagonální část dekoherenčního funkcionálu se ani v diagonálním tvaru obecně nerozpadá na příspěvky od jednotlivých trajektorií. Konkrétně je to dáno tím, že projektoři nemusí být jednorozměrné, nebo lépe, že obecně neplatí $PXP \sim P$. To, jak jsme v části 2.3 ukázali, je klíčové spolu s detailní rovnáhou pro formulování fluktuční relace (2.3.3). Tedy další otevřenou otázkou je pak existence fluktuačních symetrií v kvantových systémech a jejich tvar. Některým dílčím otevřeným otázkám se budeme věnovat na kontrétních příkladech v rámci následující kapitoly.

Kapitola 5

Modelové výpočty

Pokud hledáme jednoduchý model, na kterém je možné studovat řadu vlastností Lindbladových generátorů plně analyticky, pak můžeme s velkou výhodou vzít spinový model. Otevřeným spinovým modelem rozumíme částici se spinem (počet možných stavů pak označujeme jako N), který interaguje s okolím.

5.1 Matematická formulace modelu

V této části provedeme matematickou reformulaci problému přechodem z operátorové algebry do algebry na vektorech. Jedná se prakticky o zobecnění Blochovy reprezentace na model s libovolným konečným počtem hladin.

Vzhledem k tomu, že spin je dobře reprezentován v kvantové mechanice pomocí grupy $SU(N)$ a k ní přidružené algebře $\mathfrak{su}(N)$, je výhodné použít některé vlastnosti této grupy. Libovolný hermitovský operátor Hilbertova prostoru se pak dá zapsat jako lineární kombinace jednotky (\mathbb{I}) a generátorů grupy (F_i) s reálnými koeficienty. Libovolný operátor pak se pak dá zapsat s použitím komplexních koeficientů. Pro tyto generátory pak platí následující užitečné vztahy. První z nich je pro antikomutátor

$$\{F_i, F_j\} = \frac{4}{N} \delta_{ij} \mathbb{I} + 2d_{ijk} F_k,$$

kde d_{ijk} je plně symetrický strukturní koeficient a δ_{ij} je Kroneckerovo delta. Dále logicky následuje vztah pro komutátor

$$[F_i, F_j] = 2if_{ijk} F_k,$$

kde f_{ijk} je plně antisymetrický strukturní koeficient. Spojením těchto dvou vztahů pak dostaneme důležitý vztah

$$F_i F_j = \frac{2}{N} \delta_{ij} \mathbb{I} + (d_{ijk} + if_{ijk}) F_k. \quad (5.1.1)$$

Dále platí, že generátory grupy jsou bezestopé a hermitovské tj.

$$\forall i : \text{Tr } F_i = 0, \quad F_i^\dagger = F_i.$$

Z toho a z (5.1.1) pak plyne klíčový (vzhledem ke struktuře Lindbladových generátorů) vztah

$$\text{Tr } F_i^\dagger F_j = 2\delta_{ij}.$$

5.1.1 Blochova reprezentace projektorů

Jako první se budeme věnovat reprezentaci stavů v Blochově prostoru a příslušných projektorů. Jak jsme již uvedli, každý operátor jde zapsat jako lineární kombinace generátorů F_i a \mathbb{I} , konkrétně pak projektor do stavu i zapíšeme ve tvaru

$$(P^i)^\dagger = P^i = \frac{1}{N}\mathbb{I} + d^i \vec{p}^i \cdot \vec{F},$$

kde index i značí stav a d_i je vhodná reálná konstanta, \vec{p}^i reálný vektor (necháváme si zde jeden stupeň volnosti navíc, aby se dal vektor pak vhodně znormovat). Faktor před \mathbb{I} je dán podmínkou $\text{Tr } P^i = 1$ (je to matice hustoty čistého stavu). Pro projektory pak platí relace

$$P^i P^j = \delta^{ij} P^j,$$

kde δ^{ij} je Kroneckerovské delta, a která v algebraické podobě se rozpadá na dvojici rovnic

$$\begin{aligned} \frac{1}{N^2} + \frac{2}{N} d^i d^j \vec{p}^i \cdot \vec{p}^j &= \delta^{ij} \frac{1}{N}, \\ \frac{1}{N} d^j p_o^j + \frac{1}{N} d^i p_o^i + d^i d^j p_m^i p_n^j (if_{nmo} + d_{mno}) &= \delta^{ij} d^j p_o^j. \end{aligned}$$

Řešením první rovnice pro $i = j$ určíme koeficienty d^i tak, aby byl vektor \vec{p}^i normován na jednotku tj.

$$d_{\pm}^i = \pm \sqrt{\frac{N-1}{2N}}.$$

Protože d^i je pouze pomocný parametr, schováme volbu znaménka do \vec{p}^i a budeme dále uvažovat pouze d_+^i . Dosazením do dvou rovnic výše je upravíme do tvaru

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} + \frac{N-1}{N} \vec{p}^i \cdot \vec{p}^j &= \delta^{ij}, \\ \frac{p_o^j + p_o^i}{N} + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} p_m^i p_n^j (if_{nmo} + d_{mno}) &= \delta^{ij} p_o^j. \end{aligned}$$

První rovnice pro $i \neq j$ pak ústí v podmínku

$$\vec{p}^i \cdot \vec{p}^j = -\frac{1}{N-1},$$

která značně omezuje prostor možných stavů. Druhá rovnice se rozpadá na dvě v důsledku rozdělení na reálnou a imaginární část tj. dostáváme podmínku

$$p_m^i p_n^j f_{mno} = 0$$

a rovnici

$$\frac{p_o^i + p_o^j}{N} + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} p_m^i p_n^j d_{mno} = \delta^{ij} p_o^i.$$

Když to shrneme, máme soustavu podmínek tvořící definiční obor vektorů \vec{p}^i

$$\|\vec{p}^i\| = 1, \tag{5.1.2}$$

$$p_m^i p_n^i d_{mno} = \sqrt{\frac{2(N-2)^2}{N(N-1)}} p_o^i, \tag{5.1.3}$$

a sadu definujících vztahy mezi různými vektory

$$\vec{p}^i \cdot \vec{p}^j = -\frac{1}{N-1}, \quad (5.1.4)$$

$$p_m^i p_n^j f_{mno} = 0, \quad (5.1.5)$$

$$\frac{p_o^i + p_o^j}{N} + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} p_m^i p_n^j d_{mno} = 0. \quad (5.1.6)$$

Z fyzikální podstaty problému pak víme, že hledáme soustavu N -tici vektorů charakterizujících N spinových stavů parametrizovanou dvěma parametry udávající natočení. Takto nalezené vektory pak dosadíme do projektoru ve tvaru

$$P^i = \frac{1}{N} \mathbb{I} + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{p}^i \cdot \vec{F}. \quad (5.1.7)$$

Z toho je navíc patrné, že celá reprezentace stavů je schována ve vektorech \vec{p}^i a jejich vzájemné struktuře.

Pro praktické počítání je pak důležitá relace vyjadřující vztah libovolného operátoru k obložení projektoru ve stejné bázi (tj. $P^i P^j = \delta^{ij} P^j$)

$$\begin{aligned} P^i A P^j &= \left(\frac{1}{N} \mathbb{I} + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{p}^i \cdot \vec{F} \right) \left(\frac{a}{N} \mathbb{I} + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{a} \cdot \vec{F} \right) \left(\frac{1}{N} \mathbb{I} + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{p}^j \cdot \vec{F} \right) \\ &= \left[\left(\frac{a}{N^2} + \frac{N-1}{N^2} \vec{p}^i \cdot \vec{a} \right) \mathbb{I} + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \left[\frac{1}{N} \vec{a} + \frac{a}{N} \vec{p}^i + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \left(\vec{d}(\vec{p}^i, \vec{a}) + i \vec{f}(\vec{p}^i, \vec{a}) \right) \right] \cdot \vec{F} \right] \times \\ &\quad \times \left(\frac{1}{N} \mathbb{I} + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{p}^j \cdot \vec{F} \right), \end{aligned}$$

která se pak pro případ $i \neq j$ zjednoduší na

$$\begin{aligned} P^i A P^j &= \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \left[\frac{1}{N^2} \vec{a} + \frac{N-1}{N^2} (\vec{p}^i \cdot \vec{a}) \vec{p}^j + \frac{1}{N} \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{d}(\vec{p}^i + \vec{p}^j, \vec{a}) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{N-1}{2N} \left(\vec{d}(\vec{d}(\vec{p}^i, \vec{a}), \vec{p}^j) - \vec{f}(\vec{f}(\vec{p}^i, \vec{a}), \vec{p}^j) \right) + \frac{i}{N} \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{f}(\vec{p}^i - \vec{p}^j, \vec{a}) + \right. \\ &\quad \left. + i \frac{N-1}{2N} \left(\vec{d}(\vec{f}(\vec{p}^i, \vec{a}), \vec{p}^j) + \vec{f}(\vec{d}(\vec{p}^i, \vec{a}), \vec{p}^j) \right) \right] \cdot \vec{F}, \end{aligned}$$

kde jsme použili sadu vztahů (5.1.4), (5.1.5) a (5.1.6) a označili jsme

$$\begin{aligned} \left[\vec{d}(\vec{a}, \vec{b}) \right]_k &= \sum_{i,j} d_{ijk} a_i b_j, \\ \left[\vec{f}(\vec{a}, \vec{b}) \right]_k &= \sum_{i,j} f_{ijk} a_i b_j. \end{aligned}$$

A dále použitím vztahů (C.1) a (5.1.5) získáme

$$\begin{aligned}
P^i A P^j &= \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \left[\frac{1}{N^2} \vec{a} + \frac{N-1}{N^2} (\vec{p}^i \cdot \vec{a}) \vec{p}^j + \frac{1}{N} \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{d}(\vec{p}^i + \vec{p}^j, \vec{a}) + \right. \\
&+ \frac{N-1}{2N} \left(\vec{d}(\vec{d}(\vec{p}^i, \vec{a}), \vec{p}^j) - \vec{f}(\vec{f}(\vec{p}^i, \vec{a}), \vec{p}^j) \right) + \frac{i}{N} \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{f}(\vec{p}^i - \vec{p}^j, \vec{a}) + \\
&\left. + i \frac{N-1}{2N} \left(\vec{d}(\vec{f}(\vec{p}^i, \vec{a}), \vec{p}^j) + \vec{d}(\vec{f}(\vec{p}^j, \vec{a}), \vec{p}^i) \right) \right] \cdot \vec{F}, \tag{5.1.8}
\end{aligned}$$

A pro případ měření (tj. $i = j$) s použitím vztahů (5.1.2), (5.1.3) a opět(C.1) dostáváme

$$\begin{aligned}
P^i A P^i &= \left(\frac{1}{N^2} a + \frac{N-1}{N^2} \vec{p}^i \cdot \vec{a} \right) \mathbb{I} + \left[\frac{1}{N^2} \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{a} + \left(\frac{a}{N} + \frac{N-1}{N^2} \vec{a} \cdot \vec{p}^i \right) \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{p}^i + \right. \\
&\left. + \frac{N-1}{N^2} \vec{d}(\vec{p}^i, \vec{a}) + \left(\frac{N-1}{2N} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\vec{d}(\vec{d}(\vec{p}^i, \vec{a}), \vec{p}^i) - \vec{f}(\vec{f}(\vec{p}^i, \vec{a}), \vec{p}^i) \right) \right]. \tag{5.1.9}
\end{aligned}$$

5.1.2 Obecný Lindbladtův tvar

Doposud jsme se věnovali popisu stavů v Blochově reprezentaci, nyní přistoupíme k formulaci otevřené dynamiky na takovémto prostorů stavů. Dále se omezíme na třídu otevřených dynamik generovaných Lindbladtovými generátory v limitě slabé vazby, které jsme zkonstruovali v kapitole 3. Při popisu dynamiky pak vyjdeme z rovnice (3.1.7), která však není příliš vhodná, vzhledem k množství obecných operátorů $A_\alpha(\omega)$, pro přepis do Blochovy reprezentace, odvodíme proto zde tvar jiný pro tento převod vhodnější, kde budou vystupovat na pozicích operátorů generátory F_i . Vyjdeme tedy z rovnice (3.1.7)

$$\mathcal{D}^*[\rho] = \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_\beta(\omega) \rho A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \rho \right\} \right],$$

kde za $A_\alpha(\omega)$ dosadíme

$$A_\alpha(\omega) = a_\alpha(\omega) \mathbb{I} + \vec{a}_\alpha(\omega) \cdot \vec{F}.$$

Z rovnice (5.1.9) a definice (3.2.1) pak vidíme, že $a_\alpha(\omega)$ je nulové pro každé $\omega \neq 0$ tj. nadále je budeme značit pouze $a_\alpha \equiv a_\alpha(0)$.

Po dosazení pak dostáváme

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}^*[\rho] &= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i, j} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left(a_\beta^i(\omega) (a_\alpha^j(\omega))^* \right) \left[F_i \rho F_j^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ F_j^\dagger F_i, \rho \right\} \right] + \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_i \gamma_{\alpha\beta}(0) \left(a_\beta^i(0) a_\alpha^* - a_\beta (a_\alpha^i(0))^* \right) [F_i, \rho],
\end{aligned}$$

kde $a_\alpha^i(\omega)$ je i -tý prvek vektoru $\vec{a}_\alpha(\omega)$ a pomocí $*$ značíme komplexní sdružení. V první části pak můžeme provést označení

$$\gamma_{ij} = \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) a_\beta^i(\omega) (a_\alpha^j(\omega))^*, \tag{5.1.10}$$

a dostáváme hledaný tvar (5.1.12). Zbývá ověřit hermitovskost matice γ_{ij} tj.

$$\gamma_{ji}^* = \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}^*(\omega) \left(a_{\beta}^j(\omega) \right)^* a_{\alpha}^i(\omega) = \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\beta\alpha}(\omega) \left(a_{\beta}^j(\omega) \right)^* a_{\alpha}^i(\omega) = \gamma_{ij},$$

kde jsme použili hermitovskost matice $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$. Ve druhé části si pak všimneme, že máme součin hermitovské matice $\gamma_{\alpha\beta}(0)$ a antihermitovské matice

$$K_{\beta\alpha}^i = a_{\beta}^i(0) a_{\alpha}^* - a_{\beta} \left(a_{\alpha}^i(0) \right)^*,$$

jehož výsledkem pak je ryze imaginární číslo (respektive vektor)

$$iX^i = \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(0) K_{\beta\alpha}^i.$$

Pokud jsou A_{α} hermitovské, pak z (5.1.9) plyne, že vektory $\vec{a}_{\alpha}(0)$ jsou reálné a stejně tak i konstanty $a_{\alpha} \in \mathbb{R}$, což znamená, že vektor \vec{X} je nulový. V případě, že je rezervoár v rovnováze, je vektor \vec{X} nulový nejenom pro vazbu skrze hermitovské operátory. Nejprve z rovnice (3.2.2) použijeme pozorování ve tvaru

$$\gamma_{\alpha\beta}(0) = \gamma_{\beta\bar{\alpha}}(0),$$

a dále si pak uvědomíme, že rovnice (3.2.1) implikuje vztahy

$$\begin{aligned} a_{\alpha}^* &= a_{\bar{\alpha}}, \\ \vec{a}_{\alpha}^*(0) &= \vec{a}_{\bar{\alpha}}(0), \end{aligned}$$

kteřé pak dosadíme do definice vektoru \vec{X} a dostáváme

$$\gamma_{\alpha\beta}(0) K_{\beta\alpha}^i + \gamma_{\beta\bar{\alpha}}(0) K_{\bar{\alpha}\beta} = \gamma_{\alpha\beta}(0) \left(a_{\beta}^i(0) a_{\bar{\alpha}} - a_{\beta} a_{\bar{\alpha}}^i(0) \right) + \gamma_{\alpha\beta}(0) \left(a_{\bar{\alpha}}^i(0) a_{\beta} - a_{\bar{\alpha}} a_{\beta}^i(0) \right) = 0.$$

Ve výsledku pak dostáváme generátor ve tvaru

$$\mathcal{D}^*[\rho] = \sum_{i,j} \gamma_{ij} \left(F_i \rho F_j^{\dagger} - \frac{1}{2} \left\{ F_j^{\dagger} F_i, \rho \right\} \right) + i \left[\vec{X} \cdot \vec{F}, \rho \right],$$

kde buď v případě vazby přes hermitovskey sdružené operátory (tj. $A_{\bar{\alpha}} = A_{\alpha}$), nebo v situaci, kdy systém je navázán na rezervoár v rovnováze, je vektor \vec{X} nulový.

5.1.3 Matice hustoty a vektor hustoty

V předchozí části jsme se věnovali reformulaci rovnice (3.1.7) do podoby vhodnější k převodu do Blochovy reprezentace, což bude předmětem právě této části.

Jak jsme již výše napsali, každý hermitovský operátor se dá napsat jako lineární kombinace \mathbb{I} a F_i , tedy i matice hustoty. Tu zapíšeme ve tvaru

$$\rho = \frac{1}{N} \mathbb{I} + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \vec{\rho} \cdot \vec{F},$$

kde $\vec{\rho}$ je reálný $N^2 - 1$ rozměrný vektor (tj. vektor z \mathbb{R}^{N^2-1}). Takováto volba splňuje automaticky podmínku $\text{Tr} \rho = 1$ a druhá podmínka implikuje normování vektoru $\vec{\rho}$ tj.

$$\text{Tr} \rho^2 \leq 1 \Rightarrow \|\vec{\rho}\|^2 \leq 1.$$

Nejprve rozebereme případ čistě hamiltonovského vývoje tj. mějme časový vývoj řízený rovnicí

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho].$$

Pokud dále budeme předpokládat hamiltonián ve tvaru

$$H = \frac{1}{2}\hbar \vec{h} \cdot \vec{F},$$

kde \vec{h} je reálný vektor¹, tak dosazením do rovnice časového vývoje získáme

$$\frac{d\rho}{dt} = -i\sqrt{\frac{N-1}{8N}}h_j [F_j, F_k] \rho_k = \sqrt{\frac{N-1}{2N}}h_j f_{ijk}\rho_k F_i,$$

kde používáme Einsteinovu sumační konvenci. Tedy časový vývoj vektoru hustoty $\vec{\rho}$ je pak řízen rovnicí

$$\frac{d\rho_i}{dt} = h_j f_{ijk}\rho_k,$$

což můžeme symbolicky zapsat jako

$$\frac{d\vec{\rho}}{dt} = \vec{f}(\vec{h}, \vec{\rho}). \quad (5.1.11)$$

Pokud nás pak zajímá pouze disipace, pak se můžeme omezit pouze na disipativní část Lindbladových generátorů ve tvaru

$$\mathcal{D}^*[\rho(t)] = \sum_{ij} \gamma_{ij} \left(F_i \rho(t) F_j^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ F_j^\dagger F_i, \rho(t) \right\} \right), \quad (5.1.12)$$

kde F_i splňují $\text{Tr } F_i^\dagger F_j = 2\delta_{ij}$, tedy je můžeme ztotožnit s generátory příslušné grupy. Dosazením za matici hustoty pak získáme

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^*[\rho(t)] &= \\ &= \sum_{ijkmn} \gamma_{ij} \left(\sqrt{\frac{N-1}{2N}} [i(d_{ikm}f_{mjn} - d_{jkm}f_{min}) - (f_{ikm}f_{mjn} + f_{jkm}f_{min})] \rho_k(t) + \frac{2i}{N} f_{ijn} \right) F_n. \end{aligned}$$

Z požadavků na hermitovskost matice hustoty vyplývá i hermitovskost matice γ_{ij} . Tu pak můžeme rozdělit na symetrickou a antisymetrickou část.

$$\gamma_{ij} = \gamma_{ij}^S + i\gamma_{ij}^A$$

Dosazením do disipační části dostaneme pak

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^*[\rho(t)] &= - \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \gamma_{ij}^S (f_{ikm}f_{mjn} + f_{jkm}f_{min}) \rho_k(t) F_n \\ &\quad - \sqrt{\frac{N-1}{2N}} \gamma_{ij}^A (d_{ikm}f_{mjn} - d_{jkm}f_{min}) \rho_k(t) F_n \\ &\quad - \frac{2}{N} \gamma_{ij}^A f_{ijn} F_n. \end{aligned}$$

¹Člen úměrný jednotce nemá na dynamiku, žádný vliv. Jedná se tedy o nejobecnější tvar hamiltoniánu.

Tj pokud uvažujeme pouze disipaci, pak platí

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_n(t)}{\partial t} = & - \gamma_{ij}^S (f_{ikm} f_{mjn} + f_{jkm} f_{min}) \rho_k(t) \\ & - \underbrace{\gamma_{ij}^A (d_{ikm} f_{mjn} - d_{jkm} f_{min})}_{M_{nk}} \rho_k(t) \\ & - \sqrt{\frac{8}{N(N-1)}} \gamma_{ij}^A f_{ijn}. \end{aligned} \quad (5.1.13)$$

Zde pozorujeme několik důležitých faktů:

- První část (tj. $\gamma_{ij}^S (f_{ikm} f_{mjn} + f_{jkm} f_{min})$) je symetrická vůči prohození indexů n a k . Dále, je to jediná část vázaná na symetrickou (tj. reálnou) část matice γ_{ij} (z důvodu symetrie při prohození indexů i a j).
- Druhá část již závisí na antisymetrické (ryze imaginární) části γ_{ij} , avšak jako jediná část závisí na symetrických strukturních koeficientech (d_{ijk}). Symetrie matice M je detailně rozebrána v dodatku C.2.
- Poslední část není násobená vektorem $\vec{\rho}(t)$ a má tvar konstantního vektoru s prefaktorem $\approx \frac{1}{N}$.

Na základě těchto poznatků, a pokud zahrneme i hamiltonovský vývoj, můžeme rovnici přepsat do symbolického tvaru (s použitím závěru dodatku C.2 v podobě rovnice (C.2))

$$\frac{\partial \vec{\rho}(t)}{\partial t} = - \left(S + A + \sqrt{\frac{N(N-1)}{8}} d(\vec{v}) - f(\vec{h}) \right) \cdot \vec{\rho}(t) - \vec{v}, \quad (5.1.14)$$

kde S je symetrická matice tvořená prvním členem vztahu (5.1.13), A je antisymetrická část matice z druhého členu, $d(\vec{v})$ je symetrická část matice z druhého členu, přičemž jsme zavedli symbolické zkratky

$$\begin{aligned} d(\vec{v})_{ij} &= d_{ijk} v_k, \\ f(\vec{h})_{ij} &= f_{ikj} h_k, \end{aligned}$$

a $f(\vec{h})$ je antisymetrická část odpovídající hamiltoniánu (5.1.11). \vec{v} je pak poslední člen vztahu (5.1.13). Obecnou matici tvořenou součtem matic A a S označíme jako B . Symbolické řešení pak jako

$$\vec{\rho}(t) = e^{-Ct} \cdot (\vec{\rho}_0 - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty, \quad (5.1.15)$$

kde platí

$$\underbrace{\left(B + \sqrt{\frac{N(N-1)}{8}} d(\vec{v}) - f(\vec{h}) \right)}_C \cdot \vec{\rho}_\infty = -\vec{v} \quad (5.1.16)$$

a $\vec{\rho}_0$ je libovolný vektor z \mathbb{R}^{N^2-1} splňující $\|\vec{\rho}_0\|^2 \leq 1$. Symbolické proto, že nelze spolehlivě určit zdali existuje takové $\vec{\rho}_\infty$, které by splňovalo výše uvedenou rovnici (není zaručena existence

levé inverze matice C pro vektor \vec{v} , neboť vektor \vec{v} se nemusí nacházet v obrazu matice C). Je snadné nahlédnout, že $\vec{\rho}_\infty$ zastupuje ve skutečnosti celou třídu vektorů (stačí přičíst libovolný vektor z jádra matice C a řešení spolu s rovnicí se nezmění). Jako konvenci zde zavedeme, že část $\vec{\rho}_\infty$, která náleží do jádra, je stejná jako část $\vec{\rho}_0$ spadající tamtéž. Formálně pak

$$\vec{\rho}_\infty = \vec{\rho}_\infty^K + \vec{\rho}_\infty^D, \quad \vec{\rho}_0 = \vec{\rho}_0^K + \vec{\rho}_0^D : \quad \vec{\rho}_0^K = \vec{\rho}_\infty^K \in \ker(C) \wedge \forall \vec{x} \in \ker(C) : \vec{x} \cdot \vec{\rho}_0^D = \vec{x} \cdot \vec{\rho}_\infty^D = 0.$$

Dále je třeba rozhodnout, zda řešení (pokud již existuje) splňuje požadavky na vektor pro matici hustoty. V první řadě je vidět, že vektor $\vec{\rho}(t)$ je reálný. Což je patrné již z pohledu na diferenciální rovnici, která je zcela reálná (a řešení to respektuje). Dále potřebujeme ověřit, že $\|\vec{\rho}(t)\|^2 \leq 1$ pro každé $t \geq 0$. Nejprve ověříme krajní body tj. $\vec{\rho}_\infty$ a $\vec{\rho}_0$. Pro druhý bod je to automaticky splněno v požadavcích. Pro první to pak vede na nutnou (nikoliv postačující) podmínku

$$\|\vec{v}\|^2 = \left\| (B + d(\vec{v})) - f(\vec{h}) \cdot \vec{\rho}_\infty \right\|^2 \leq \left\| B + d(\vec{v}) - f(\vec{h}) \right\|^2 \|\vec{\rho}_\infty\|^2 \leq \left\| B + d(\vec{v}) - f(\vec{h}) \right\|^2.$$

Což se dá upravit na silnější, avšak lépe vyhodnotitelnou podmínku

$$\|\vec{v}\|^2 \left(1 - \sup_{ijk} d_{ijk}^2 \right) \leq \left\| B - f(\vec{h}) \right\|^2.$$

Z hlediska časového vývoje je nutné, aby platilo

$$\forall \vec{\rho}, t > 0 : \quad \left\| e^{-\left(B + \sqrt{\frac{N(N-1)}{8}} d(\vec{v}) - f(\vec{h}) \right) t} \vec{\rho} \right\| \leq \|\vec{\rho}\|,$$

protože jinak by při volbě $\vec{\rho}_\infty = 0$ existoval vektor $\vec{\rho}_0$, který by po čase přesáhl svou velikostí 1. Tento požadavek ve skutečnosti znamená, že symetrická část matice C nemá záporné vlastní číslo. To nám umožňuje lépe nahlédnout na řešení pohybové rovnice (5.1.15), pokud se převede do tvaru

$$\forall t_2 > t_1 : \quad (\vec{\rho}(t_2) - \vec{\rho}_\infty) = e^{-C(t_2-t_1)} (\vec{\rho}(t_1) - \vec{\rho}_\infty).$$

Odkud je vidět, že symetrická část matice C zodpovídá v rámci naší konvence za konvergenci vektoru $\vec{\rho}(t)$ k vektoru $\vec{\rho}_\infty$ a antisymetrická část nemění $\text{Tr} \rho^2$ díky tomu, že generuje v krajním (tj. když symetrická část je nulová) ortogonální matici, která má za následek změnu báze.

Ve výsledku pak máme dynamiku popsanou pomocí vektoru $\vec{\rho}_\infty$, který reprezentuje konečný stav, a maticí C , která určuje rychlost konvergence a počáteční stav popsaný $\vec{\rho}_0$. Otázka na závěr zní, jaké jsou podmínky na to, kdybychom chtěli dynamiku a počáteční stav specifikovat až na této abstraktní úrovni. Obrácená konstrukce pak probíhá podle následujícího schématu:

1. Počáteční stav je popsán reálným vektorem $\vec{\rho}_0 \in \mathbb{R}^{N^2-1}$ s podmínkou $\|\vec{\rho}_0\| \leq 1$.
2. Dynamika je popsána reálnou $(N^2 - 1) \times (N^2 - 1)$ maticí C . Kde samotná disipace je dána částí matice C splňující vazbu $C_{ij} f_{ijk} = 0$ viz odůvodnění (C.3), z kterého automaticky plyne, že pro $N = 2$ je matice disipativní částí matice C symetrická, a hamiltonovská část má tvar $f_{ijk} h_j$, kde \vec{h} je libovolný reálný vektor. Tato volba dále umožňuje volně definovat koncový stav. Na matici C dále klademe podmínku, že pro každý reálný vektor $\vec{\rho}$ platí $\|\exp(-Ct) \vec{\rho}\| \leq \|\vec{\rho}\|$.

3. Koncový stav je popsán vektorem $\vec{\rho}_\infty \in \mathbb{R}^{N^2-1}$ s podmínkou $\|\vec{\rho}_\infty\| \leq 1$. Dále zavádíme konvenci, že vektor $\vec{\rho}_0 - \vec{\rho}_\infty$ není lineární kombinací žádného vektoru z $\ker(C)$. (Pozn. podmínka (5.1.16) je splněna automaticky volbou $\vec{v} = -C \cdot \vec{\rho}_\infty$)

Tím máme zkonstruovanou dynamiku s počátečním stavem $\vec{\rho}_0$ splňující diferenciální rovnici (5.1.14) a s řešením (5.1.15) ve tvaru

$$\vec{\rho}(t) = e^{-Ct} (\vec{\rho}_0 - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty. \quad (5.1.17)$$

Ve formě matice hustoty pak

$$\rho(t) = \frac{1}{N} \mathbb{I} + \sqrt{\frac{N-1}{2N}} [e^{-Ct} (\vec{\rho}_0 - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty] \cdot \vec{F}. \quad (5.1.18)$$

5.2 Dvouhadinový model, $N = 2$

Na dvouhadinovém modelu provedeme demonstraci výsledků kapitoly 4 a pokusíme se najít některé dílčí odpovědi na otevřené otázky jak z kapitoly 4, tak z kapitoly 2. Prvním z řady modelů je dvouhadinový model s jedním rezervoírem. Na tomto nejjednodušším modelu si rozebereme jednotlivé případy a ilustrujeme detailní rovnováhu. S výhodou pak v této části použijeme vlastnosti obsažené v dodatku C.1.1. Hamiltonián systému tedy předpokládáme ve tvaru

$$H_S = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}.$$

Pak projektory do jednotlivých stavů pro případ nedegenerovaného spektra ($E_1 \neq E_2$) odpovídají

$$P(E_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$P(E_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dále označíme rozdíl energií mezi jednotlivými hladinami

$$\Delta E = E_2 - E_1,$$

kde bez újmy na obecnosti předpokládáme $E_2 > E_1$. Přičemž již můžeme specifikovat hamiltonovskou část matice časového vývoje v Blochově reprezentaci

$$C_H = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\Delta E & 0 \\ -\frac{1}{2}\Delta E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

což plyne z rovnice (5.1.14) či lépe (5.1.11)

Dále provedeme rozklad obecného operátoru mající tvar v maticovém zápisu

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

na $A(\omega)$, jež se hodí pro formulaci korelační matice (5.1.10) do Lindbladových generátorů ve tvaru (5.1.12)

$$\begin{aligned} A(-\Delta E) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} a_{21} (1, -i, 0) \cdot \vec{F}, \\ A(\Delta E) &= \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} a_{12} (1, i, 0) \cdot \vec{F}, \\ A(0) &= \begin{pmatrix} a_{11} & 0 \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix} = \frac{a_{11} + a_{22}}{2} \mathbb{I} + \frac{a_{11} - a_{22}}{2} (0, 0, 1) \cdot \vec{F}, \end{aligned}$$

kde vektory odpovídající danému rozkladu jsou, jak vidno, jednoparametrické.

Poté co jsme rozebrali strukturu jednotlivých možných operátorů, přes které je systém nāvázán, můžeme pokročit směrem k Blochově reprezentaci. Nejprve spočteme korelační matici podle výše zmíněného vztahu (5.1.10), čímž dostaneme

$$\begin{aligned} \gamma_{ij} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \beta} \left[\gamma_{\alpha\beta}(-\Delta E) a_{21}^\beta (a_{21}^\alpha)^* \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \\ i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \right. \\ \left. + \gamma_{\alpha\beta}(\Delta E) a_{12}^\beta (a_{12}^\alpha)^* \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \right. \\ \left. + \gamma_{\alpha\beta}(0) (a_{11}^\beta - a_{22}^\beta) (a_{11}^\alpha - a_{22}^\alpha)^* \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right]. \quad (5.2.1) \end{aligned}$$

Pozorný čtenář si jistě povšiml, že doposud jsme se vyhýbali situaci okolo časové inverze, teď situaci napravíme. Praktickým důvodem pro to bylo, že na abstraktní úrovni je tento problém v algebraické reprezentaci obtížně uchopitelný. Hlavním důvodem je časová inverze rovnice (5.1.1) ve tvaru

$$\mathbb{T}^\dagger F_i \mathbb{T} \mathbb{T}^\dagger F_j \mathbb{T} = \mathbb{T}^\dagger F_i F_j \mathbb{T} = \frac{2}{N} \delta_{ij} \mathbb{I} + (d_{ijk} - i f_{ijk}) \mathbb{T}^\dagger F_k \mathbb{T},$$

kde se mění znaménko před antisymetrickými koeficienty, což vede na netriviální vztahy mezi F_i a $\mathbb{T}^\dagger F_i \mathbb{T}$.

Přirozeným požadavkem na hamiltonián je jeho invariance vůči časové inverzi \mathbb{T} , tj. necht' platí

$$[H, \mathbb{T}] = 0.$$

Tj. projekce generátorů do směru \vec{h} je časově invariantní. Jako přípravný krok doplníme k vektoru $\vec{o}_3 = \frac{\vec{h}}{\|\vec{h}\|}$ další dva vektory \vec{o}_1, \vec{o}_2 tak, aby tvořili ortonormální bázi na algebraickém prosotoru. Nyní máme dvě možnosti jak vyhovět podmínce (5.1.1) na strukturu generátorů. První z nich je, že platí

$$\mathbb{T}^\dagger \vec{o}_1 \cdot \vec{F} \mathbb{T} = \vec{o}_2 \cdot \vec{F},$$

tj. prohodíme smysl vektorů \vec{o}_1 a \vec{o}_2 . Druhá možnost pak je

$$\begin{aligned} [\vec{o}_1 \cdot \vec{F}, \mathbb{T}] &= 0, \\ \{\vec{o}_2 \cdot \vec{F}, \mathbb{T}\} &= 0. \end{aligned}$$

V našem případě, kdy je hamiltonián diagonální ve zvolené reprezentaci pak máme danou sadu vektorů explicitně zadanou jako

$$\begin{aligned}\vec{o}_1 &= (1, 0, 0), \\ \vec{o}_2 &= (0, 1, 0), \\ \vec{o}_3 &= (0, 0, 1).\end{aligned}$$

Tato volba v obou případech vede na časově invertovanou korelační matici ve tvaru

$$\begin{aligned}\gamma_{ij}^\# &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \beta} \left[\gamma_{\alpha\beta}^*(-\Delta E) \left(a_{21}^\beta \right)^* a_{21}^\alpha \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \\ i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \right. \\ &\quad \left. + \gamma_{\alpha\beta}^*(\Delta E) \left(a_{12}^\beta \right)^* a_{12}^\alpha \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \right. \\ &\quad \left. + \gamma_{\alpha\beta}^*(0) \left(a_{11}^\beta - a_{22}^\beta \right)^* \left(a_{11}^\alpha - a_{22}^\alpha \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right],\end{aligned}$$

kde jsme provedli pouze komplexní sdružení vzhledem k antilinearitě \mathbb{T} a buď prohodili indexy $1 \leftrightarrow 2$ (prohazujeme smysl vektorů), nebo v indexu za každou 2-ku se změnilo znaménko (F_2 mění pod časovou inverzí znaménko tj. druhá komponenta vektorů se mění za opačnou). Vzhledem k hermitovskosti matice $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ pak vidíme, že platí

$$\gamma_{ij}^\# = \gamma_{ij}.$$

Odtud pak plyne, že symetrická část matice C se zachová a stejně tak platí

$$\vec{v}_\# = \vec{v}, \quad (5.2.2)$$

což uplatníme při určování stacionárního stavu $\vec{\rho}_\infty^\#$. Pokud se pak podíváme na antisymetrickou část matice C , která je v tomto případě plně dána hamiltoniánem, jehož vektor se zachová, tak vzhledem k časové paritě hamiltonovské části vývoje dostáváme relaci

$$C_\# = C^T. \quad (5.2.3)$$

Důsledkem rovnosti (5.2.2) a rovnice (5.1.14) je pak relace pro stacionární stavy

$$C^T \cdot \vec{\rho}_\infty^\# = C \cdot \vec{\rho}_\infty. \quad (5.2.4)$$

V neposlední řadě nás pak zajímá reprezentace měření. Jako první je nutné nalézt tvar vektorů \vec{p}^i odpovídající příslušným projekčním operátorům. Z rovnice (5.1.6) dostáváme podmínku

$$\vec{p}^i = -\vec{p}^j, \quad (5.2.5)$$

což nám automaticky zaručuje splnění vztahů (5.1.5) a (5.1.4). Dále pak stačí jen splnit podmínku (5.1.2), protože podmínka (5.1.3) je splněna automaticky vzhledem k $d_{ijk} = 0$ a $N = 2$.

Je tedy vidět, že v případě dvouhladinového modelu odpovídají projektorům libovolné jednotkové vektory s tím, že různým stavům ve stejné bázi odpovídají vektory opačné. Například pro projektory na jednotlivé energie mají vektory tvar

$$\begin{aligned}\vec{p}^{E_1} &= (0, 0, 1), \\ \vec{p}^{E_2} &= (0, 0, -1).\end{aligned}$$

Podmínka (5.2.5) nám pak umožňuje zjednodušit vztahy (5.1.8), (5.1.9) do podoby

$$\begin{aligned}P^i A P^j &= \frac{1}{4} [\vec{p}^i \times (i\vec{a} + \vec{a} \times \vec{p}^i)] \cdot \vec{F}, \\ PA P &= \frac{1}{2} (a + \vec{a} \cdot \vec{p}) P.\end{aligned}$$

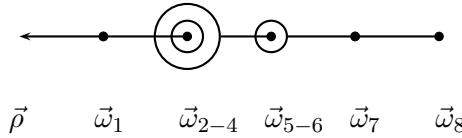
To nám umožňuje přepsat dekoherenční funkcionál $\mathcal{D}(\omega, \omega')$ pro určitou třídu trajektorií do tvaru vhodnějšího pro samotné počítání.

5.2.1 Konstrukce dekoherenčního funkcionálu

Předpokládejme, tedy že pro každý čas t_i jsou stavy ω_i a ω'_i ve stejné bázi tj. zde to konkrétně znamená, že vektory reprezentující odpovídající stavy jsou lineárně závislé tedy

$$\vec{\omega}_i = \pm \vec{\omega}'_i.$$

Pro usnadnění praktického výpočtu dekoherenčního funkcionálu je výhodné zavést grafickou reprezentaci vztahu obou cest. Pro lepší pochopení uvedeme nejprve příklad takového znázornění a poté teprve ozřejmíme jeho konstrukci



které odpovídá cestám ve tvaru

$$\begin{aligned}\omega &= (\vec{\omega}_1, \vec{\omega}_2, \vec{\omega}_3, \vec{\omega}_4, \vec{\omega}_5, \vec{\omega}_6, \vec{\omega}_7, \vec{\omega}_8), \\ \omega' &= (\vec{\omega}_1, \vec{\omega}_2, -\vec{\omega}_3, -\vec{\omega}_4, \vec{\omega}_5, -\vec{\omega}_6, \vec{\omega}_7, \vec{\omega}_8).\end{aligned}$$

Můžeme si to představit jako časovou osu, směr času beží proti šipce. Směr šipky pak určuje posloupnost vnoření v rámci dekoherenčního funkcionálu a na konci šipky tedy sídlí matice hustoty $\rho(t_0)$. Čarami pak označíme místa, kde se neměří a dochází k volnému časovému vývoji, stejně tak to značí mezery mezi kruhy. Kruhy a body pak reprezentují pozice, kde dochází k projekcím v opačných ($\vec{\omega}_i = -\vec{\omega}'_i$), resp. stejných ($\vec{\omega}_i = \vec{\omega}'_i$) stavech. Ohodnocovací logika je pak vystavena tak, že výsledek dekoherenčního funkcionálu je roven součinu vah úseků mezi jednotlivými body. A tyto váhy sestavíme následovně, s tím, že se postupuje ve směru šipky:

1. Váha daného úseku od času t_i do t_j je rovna

$$V(t_i, t_j) = \frac{1}{2} \left(a + \vec{\omega}_j \cdot \left[e^{-C(t_j - t_{j-1})} (\vec{a} - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] \right),$$

kde a a \vec{a} se určí v dalších krocích.

2. Pokud druhý konec úsečky vycházející z bodu končí na kruhu, stanoví se $a = 0$ a

$$\vec{a} \rightarrow \vec{K}_i(\vec{a}) = \frac{1}{4}\vec{\omega}_i \times \left(i \left[e^{-C(t_i-t_{i-1})} (\vec{a} - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] + \vec{\omega}_i \times \left[e^{-C(t_i-t_{i-1})} (\vec{a} - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] \right),$$

kde za \vec{a} dosazujeme tentokrát \vec{a} odpovídající obsahu kruhu tj. pokud je uvnitř kruhu další kruh, použije se opět tento bod (postupuje se stále ve směru šipky, nebo lépe do středu kruhu), jinak se jde dále.

3. Za bod se pak dosazuje $a = 1$ a $\vec{a} = \vec{\omega}_i$.

4. Za šipku se dosazuje $a = 1$ a $\vec{a} = \vec{\rho}(t_0)$.

Tyto pravidla ilustrujeme opět na (stejném) příkladě:

1. První úsek od konce tj. úsek t_7 až t_8 začíná v bodě t_8 a tedy váha bude mít tvar podle bodu 1 manuálu

$$V(t_7, t_8) = \frac{1}{2} \left(a + \vec{\omega}_8 \cdot \left[e^{-C(t_8-t_7)} (\vec{a} - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] \right),$$

kde potřebujeme vyhodnotit, co dosadit za a a \vec{a} . Zde je patrné, že úsečka končí v dalším bodě a tedy na základě bodu 3 návodu na ohodnocení musíme dosadit $a = 1$ a $\vec{a} = \vec{\omega}_7$. Tj. výsledná váha daného úseku je

$$V(t_7, t_8) = \frac{1}{2} \left(1 + \vec{\omega}_8 \cdot \left[e^{-C(t_8-t_7)} (\vec{\omega}_7 - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] \right).$$

2. Druhý úsek od času t_5 do času t_7 pak bude mít opět hodnotu ve tvaru

$$V(t_5, t_7) = \frac{1}{2} \left(a + \vec{\omega}_7 \cdot \left[e^{-C(t_7-t_6)} (\vec{a} - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] \right),$$

kde tentokrát však úsečka končí na kruhu odpovídající t_6 a podle bodu 2 návodu mu přiřadíme hodnotu $a = 0$ a $\vec{a} = \vec{K}_6(\vec{a})$. Tím dostáváme váhu ve tvaru

$$V(t_5, t_7) = \frac{1}{2} \vec{\omega}_7 \cdot \left[e^{-C(t_7-t_6)} \left(\vec{K}_6(\vec{a}) - \vec{\rho}_\infty \right) + \vec{\rho}_\infty \right],$$

kde nám zbývá vyhodnotit ještě vnitřek kruhu a dosadit za něj. Zde je to jednoduché, protože uvnitř kruhu je pouze bod a tedy $\vec{a} = \vec{\omega}_5$. Ve výsledku pak získáme

$$V(t_5, t_7) = \frac{1}{2} \vec{\omega}_7 \cdot \left[e^{-C(t_7-t_6)} \left(\vec{K}_6(\vec{\omega}_5) - \vec{\rho}_\infty \right) + \vec{\rho}_\infty \right].$$

3. Další úsek t_2 až t_5 se ohodnocuje podobně jako předchozí jen s obměnou v tom, že kruh obsahuje další kruh a tečku. Podle pravidla o postupném ohodnocování pak do

$$V(t_2, t_5) = \frac{1}{2} \vec{\omega}_5 \cdot \left[e^{-C(t_5-t_4)} \left(\vec{K}_4(\vec{a}) - \vec{\rho}_\infty \right) + \vec{\rho}_\infty \right],$$

dosadíme za $\vec{a} = \vec{K}_3(\vec{\omega}_2)$. A výsledek pak je

$$V(t_2, t_5) = \frac{1}{2} \vec{\omega}_5 \cdot \left[e^{-C(t_5-t_4)} \left(\vec{K}_4 \left(\vec{K}_3(\vec{\omega}_2) \right) - \vec{\rho}_\infty \right) + \vec{\rho}_\infty \right].$$

4. Předposlední úsek je pak podobný úseku prvnímu a tedy jeho váha je

$$V(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \left(1 + \vec{\omega}_2 \cdot \left[e^{-C(t_2-t_1)} (\vec{\omega}_1 - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] \right).$$

5. Poslední úsek je pak opět podobný s prvním se změnou, že končí šipkou a tedy místo $\vec{\omega}_0$ se bere $\vec{\rho}(t_0)$. Tj.

$$V(t_0, t_1) = \frac{1}{2} \left(1 + \vec{\omega}_1 \cdot \left[e^{-C(t_1-t_0)} (\vec{\rho}(t_0) - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] \right).$$

Rozdíl $\vec{\rho}(t_0)$ oproti $\vec{\omega}_i$ je v tom nemusí být normován na jednotku narozdíl od vektorů reprezentující projektořy.

V tomto našem příkladu pak hodnota dekoherenčního funkcionálu je rovna

$$\mathcal{D}(\omega, \omega') = V(t_0, t_1) V(t_1, t_2) V(t_2, t_5) V(t_5, t_7) V(t_7, t_8).$$

Nyní, když máme protokol pro počítání dekoherenčního funkcionálu v rámci dvouhladinového modelu v Blochově reprezentaci, je vhodné udělat jeho zobecnění do spojitého měření. Tj. že časový úsek mezi měřeními je infinitesimalně malý. Toto zobecnění provedeme v několika krocích. Dále se omezíme pouze na diagonální část dekoherenčního funkcionálu. Tedy dekoherenční funkcionál se nám zjednoduší do podoby

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\omega, \omega) &= \frac{1}{2^N} \left(1 + \vec{\omega}_1 \left[e^{-C(t_1-t_0)} (\vec{\rho}(t_0) - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] \right) \times \\ &\quad \times \prod_{i=1}^{N-1} \left(1 + \vec{\omega}_{i+1} \left[e^{-C(t_{i+1}-t_i)} (\vec{\omega}_i - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] \right). \end{aligned}$$

Dále budeme předpokládat, že provádíme měření od t_0 do t_{fin} po stejně dlouhých časových úsecích tj.

$$t_{i+1} - t_i = \frac{t_{fin} - t_0}{N} = \frac{\Delta t}{N},$$

kde jsme zavedli označení $\Delta t = t_{fin} - t_0$, což zjednoduší počítání výsledné limity. Zavedeme ještě $\vec{\omega}(t)$ jako náhradu za $\vec{\omega}_i$ podle následujícího předpisu

$$\vec{\omega}(t) = \begin{cases} \vec{\rho}(t_0) & t \in (-\infty, t_1) \\ \vec{\omega}_i & t \in [t_i, t_{i+1}) \\ \vec{\omega}_N & t \in [t_{fin}, \infty) \end{cases},$$

který je souvislý zprava. Bude se hodit i obdoba $\vec{\omega}(t)$ souvislá zleva, což provedeme podle předpisu

$$\vec{\omega}_-(t) = \begin{cases} \vec{\rho}(t_0) & t \in (-\infty, t_1] \\ \vec{\omega}_i & t \in (t_i, t_{i+1}] \\ \vec{\omega}_N & t \in (t_{fin}, \infty) \end{cases}.$$

Obecně pak platí

$$\vec{\omega}_-(t) = \lim_{s \rightarrow t^-} \vec{\omega}(s).$$

S těmito předpoklady pak přepíšeme dekoherenční funkcionál do tvaru

$$\mathcal{D}(\omega, \omega) = \frac{1}{2^N} \prod_{i=1}^N \left(1 + \vec{\omega}(t_i) \left[e^{-\frac{1}{N} C \Delta t} (\vec{\omega}_-(t_i) - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] \right).$$

Nyní se již můžeme zabývat limitou $N \rightarrow \infty$. Prvním krokem k limitnímu tvaru budiž přechod od součinu přes k sumě a to pomocí exponenciály a logaritmu tj. dekoherenční funkcionál přepíšeme do tvaru

$$\mathcal{D}(\omega, \omega) = \frac{1}{2^N} \exp \left[\sum_{i=1}^N \ln \left(1 + \vec{\omega}(t_i) \left[e^{-\frac{1}{N} C \Delta t} (\vec{\omega}_-(t_i) - \vec{\rho}_\infty) + \vec{\rho}_\infty \right] \right) \right],$$

kde dále exponenciálu reprezentující časový vývoj rozepíšeme do taylorovy řady

$$\mathcal{D}(\omega, \omega) = \frac{1}{2^N} \exp \left[\sum_{i=1}^N \ln \left(1 + \vec{\omega}(t_i) \cdot \vec{\omega}_-(t_i) - \frac{\Delta t}{N} \vec{\omega}(t_i) \cdot C \cdot (\vec{\omega}_-(t_i) - \vec{\rho}_\infty) + \mathcal{O} \left(\left(\frac{\Delta t}{N} \right)^2 \right) \right) \right]. \quad (5.2.6)$$

A dále rozvojem logaritmu dostáváme

$$\mathcal{D}(\omega, \omega) = \prod_{i=1}^N \frac{1 + \vec{\omega}(t_i) \cdot \vec{\omega}_-(t_i)}{2} \exp \left[- \sum_{i=1}^N \frac{\Delta t}{N} \frac{\vec{\omega}(t_i) \cdot C \cdot (\vec{\omega}_-(t_i) - \vec{\rho}_\infty)}{1 + \vec{\omega}(t_i) \cdot \vec{\omega}_-(t_i)} + \mathcal{O} \left(\frac{1}{N} \right) \right]. \quad (5.2.7)$$

Zde je patrné, že v limitě pro velká N se dá suma v exponenciále inklinuje k integrálu. Abychom mohli provést limitu musíme provést nyní rozbor jednotlivých situací co se týká vývoje $\vec{\omega}_i$.

		$\vec{\omega}_{i+1} \rightarrow \vec{\omega}_i$	$\vec{\omega}_{i+1} \rightarrow -\vec{\omega}_i$
Nic se nemění	$\vec{\omega}_{i+1} \parallel \vec{\omega}_i$	1	2
Infinitesimalní změna	$\vec{\omega}_{i+1} = \pm \vec{\omega}_i + \mathcal{O} \left(\frac{1}{N} \right)$	3	4
Skokem	$\vec{\omega}_{i+1} \nparallel \vec{\omega}_i$	5	

Obrázek 5.1: Přehled možností.

1. První situace je z hlediska posuzování ze všech nejjednodušší. Prefaktor před exponenciálou je identicky roven jedné a faktor uvnitř exponenciály se upraví na $\frac{1}{2}$. Pokud by celá trajektorie byla pouze měřením do jednoho směru výsledný tvar pro dekoherenční funkcionál by se pak zredukoval na tvar

$$\mathcal{D}(\omega, \omega) = \exp \left[- \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_{fin}} dt \vec{\omega}(t) \cdot C \cdot (\vec{\omega}(t) - \vec{\rho}_\infty) \right].$$

A tedy dostáváme zde exponenciální rozpad.

2. Naproti tomu hned druhá situace je jedna z nejsložitějších. Zde nemůžeme při posuzování situace vyjít již z rovnice (5.2.7), ale musíme vyjít již z tvaru (5.2.6). Pokud si rozepíšeme příspěvek od takových to situací dostáváme příspěvek ve tvaru

$$V(t_{i+1}, t_i) = \frac{\Delta t}{N} \left(\vec{\omega}(t_i) \cdot C \cdot (\vec{\omega}(t_i) - \vec{\rho}_\infty) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right) \right).$$

A tedy v limitě tyto členy jdou k

$$V(t + dt, t) = dt \vec{\omega}(t) \cdot C \cdot (\vec{\omega}(t) - \vec{\rho}_\infty),$$

kde si musíme uvědomit, že typická situace je, že integrujeme (sčítáme v diskrétním případě) přes přeskoky ve všech časech. Možný problém by pak byl s korektností v případě nekonečného počtu skoků.

3. Tato situace je podobná první situaci. Infinitesimální rozdíly způsobují, že se cesta $\vec{\omega}(t)$ stává spojitou. Ve výsledku tedy dostáváme naprosto stejný příspěvek jako v prvním případě.
4. Opět obdoba situace z bodu 2. V limitě pak na ní zcela přechází.
5. Poslední řešenou situací jsou skoky, které odpovídají měření jiných veličin (v případě spinového systému, měření spinu do příslušného směru). Příspěvky odpovídající dané situaci pak mají tvar

$$\mathcal{D}(\omega, \omega) = \prod_{i=1}^N \frac{1 + \vec{\omega}(t_i) \cdot \vec{\omega}_-(t_i)}{2} \exp \left[- \int_{t_0}^{t_{fin}} dt \frac{\vec{\omega}(t) \cdot C \cdot (\vec{\omega}_-(t) - \vec{\rho}_\infty)}{1 + \vec{\omega}(t) \cdot \vec{\omega}_-(t)} \right].$$

Je patrné, že takových skoků musí být konečně mnoho, jinak je dekoherenční funkcionál nulový².

Na závěr tedy provedme shrnutí všech případů do jednoho vztahu. Zavedme proto množinu I jako množinu všech časů, kdy došlo ke změně hodnoty které měřím skokem tj.

$$I = \{t \in [t_0, t_{fin}] : \vec{\omega}(t) = -\vec{\omega}_-(t)\}.$$

A J jako množinu všech časů, kdy došlo ke skoku toho co měřím (tj. situace 5)

$$J = \{t \in [t_0, t_{fin}] : \vec{\omega}(t) \neq \vec{\omega}_-(t)\} \setminus I.$$

Výsledný tvar dekoherenčního funkcionálu je pak

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\omega, \omega) &= \prod_{t \in J} \frac{1 + \vec{\omega}(t) \cdot \vec{\omega}_-(t)}{2} \prod_{t \in I} dt \frac{1}{2} \vec{\omega}(t) \cdot C \cdot (\vec{\omega}(t) - \vec{\rho}_\infty) \times \\ &\times \exp \left[- \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_{fin}} dt \vec{\omega}(t) \cdot C \cdot (\vec{\omega}(t) - \vec{\rho}_\infty) \right], \end{aligned} \quad (5.2.8)$$

²Integrál uvnitř exponenciály je přes omezený časový úsek z omezených veličin, protože matice C má konečná vlastní čísla a stejně tak vektory $\vec{\omega}(t)$ mají normu shora omezenou jednotkou. Tedy exponenciála nemůže růst nade všechny meze.

kde jsme využili toho, že skoků je konečně mnoho, aby byl příspěvek nenulový a tedy množina J má míru nula, tedy tento případ do integrálu nepřispívá. Stejně tak tento tvar pokrývá extrémní případy 2 a 4. Jakož i nekonečného počtu skoků.

Nyní, když máme explicitní tvar pravděpodobnostní míry, je vhodné se podívat jakého tvaru nabývá v důsledku časové inverze. Víme totiž, že platí relace (4.3.1), která však platí, za poměrně specifických podmínek, otázka tedy zní, zda-li ji nemůžeme zobecnit. První věcí, kterou je nutné si ujasnit, je tvar časově invertované trajektorie. Je jasné, že musíme obrátit časový sled jak protokolu měření tak i sled naměřených hodnot. Navíc jedna z podmínek na trajektorii je spojitost zprava. Ve výsledku pak dostaneme

$$\forall s \in [t_0, t_{fin}] : \quad \Theta \vec{\omega}(s) = \vec{\omega}_-^\#(t_0 + t_{fin} - s),$$

kde $\vec{\omega}_-^\#(s)$ odpovídá časové inverzi daného stavu.

Dále pak využijeme vztahů (5.2.3) a (5.2.4) tj. platí

$$\begin{aligned} C_\# &= C^T, \\ C_\# \cdot \vec{\rho}_\infty^\# &= C \cdot \vec{\rho}_\infty. \end{aligned}$$

Což po přímočarém dosazení do

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\Theta\omega, \Theta\omega) &= \prod_{t \in J_\#} \frac{1 + \Theta \vec{\omega}(t) \cdot \Theta \vec{\omega}_-(t)}{2} \prod_{t \in I_\#} dt \frac{1}{2} \Theta \vec{\omega}(t) \cdot C_\# \cdot (\Theta \vec{\omega}(t) - \vec{\rho}_\infty^\#) \times \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_{fin}} dt \Theta \vec{\omega}(t) \cdot C_\# \cdot (\Theta \vec{\omega}(t) - \vec{\rho}_\infty^\#) \right], \end{aligned}$$

dává

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\Theta\omega, \Theta\omega) &= \prod_{s \in J_\#} \frac{1 + \vec{\omega}_-^\#(t_0 + t_{fin} - s) \cdot \vec{\omega}_-^\#(t_0 + t_{fin} - s)}{2} \times \\ &\times \prod_{s' \in I_\#} ds' \frac{1}{2} \vec{\omega}_-^\#(t_0 + t_{fin} - s') \cdot C_\# \cdot (\vec{\omega}_-^\#(t_0 + t_{fin} - s') - \vec{\rho}_\infty^\#) \times \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_{fin}} ds \vec{\omega}_-^\#(t_0 + t_{fin} - s) \cdot C_\# \cdot (\vec{\omega}_-^\#(t_0 + t_{fin} - s) - \vec{\rho}_\infty^\#) \right], \end{aligned}$$

kde první člen odpovídá situacím, kdy se skokem mění to, co měřím. Tato množina je až na posun stejná jako množina J , tj. platí $J_\# = \{t_{fin} + t_0 - s; s \in J\}$. A stejně tak vzhledem, k tomu, že skalární součin je invariantní, jak vůči změně znaménka u jedné ze složek u obou vektorů, tak i k prohození složek, tak první členy v $\mathcal{D}(\omega, \omega)$ a $\mathcal{D}(\Theta\omega, \Theta\omega)$ si odpovídají až na počáteční body, kdy do hry vstupuje počáteční stav, který mají obě situace odlišný.

Pokud se jedná o členy druhého typu, množiny I a $I_{\#}$ se opět až na posun shodují, což znamená, že stačí vyhodnotit členy typu

$$\begin{aligned} ds' \frac{1}{2} \vec{\omega}_{-}^{\#} (t_0 + t_{fin} - s') \cdot C^T \cdot \left(\vec{\omega}_{-}^{\#} (t_0 + t_{fin} - s') - \vec{\rho}_{\infty}^T \right) &= ds \frac{1}{2} \vec{\omega}_{-}^{\#} (s) \cdot C^T \cdot \left(\vec{\omega}_{-}^{\#} (s) - \vec{\rho}_{\infty}^{\#} \right) \\ &= -ds \frac{1}{2} \vec{\omega}_{-}^{\#} (s) \cdot C^T \cdot \left(-\vec{\omega}_{-}^{\#} (s) - \vec{\rho}_{\infty}^{\#} \right) \\ &= ds \frac{1}{2} \vec{\omega}_{-}^{\#} (s) \cdot C \cdot \left(\vec{\omega}_{-}^{\#} (s) + \vec{\rho}_{\infty} \right), \end{aligned}$$

kde v prvním kroku jsme provedli záměnu $s = t_0 + t_{fin} - s'$ s tím, že změnu znaménka před diferenciálem jsme schovali do záměny mezí v příslušném případném integrálu. Ve druhém kroku jsme pak nahradili limitu zleva hodnotou v bodě, která je opačná vzhledem k tomu, že se zde mění skokem naměřená hodnota. V posledním kroku jsme pak uplatnili vtaž mezi stacionárním stavem časově invertovaného vývoje a stacionárním stav normální evoluce a pozorování, že na symetrický člen nemá transponování vliv. K dotáhnutí výsledného vztahu do konce je nutné se nyní na chvíli pozastavit na strukturou matice C . Nejdříve si uvědomíme že podle definice matice C v (5.1.16), antisymetrická část je příslušná hamiltonovské části a disipace přispívá pouze symetrickou částí. Symetrickou pak můžeme spočíst z rovnice (5.1.13), čímž dostaneme

$$C_{kl} = \gamma_{ij}^S (\varepsilon_{ilm} \varepsilon_{mjk} + \varepsilon_{jlm} \varepsilon_{mik}) = 2\gamma_{ij}^S (\delta_{ij} \delta_{lk} - \delta_{ik} \delta_{jl}) = 2 (\text{Tr } \gamma^S - \gamma^S), \quad (5.2.9)$$

kde γ^S je v tomto případě diagonální a tedy i symetrická část matice C je pouze diagonální. Po dosazení z obecného tvaru korelační matice (5.1.10) a z tvaru hamiltoniánu pak dostaneme matici C ve tvaru

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & -\frac{1}{\hbar} \Delta E & 0 \\ \frac{1}{\hbar} \Delta E & C_{11} & 0 \\ 0 & 0 & C_{33} \end{pmatrix}, \quad (5.2.10)$$

kde

$$C_{11} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left[\gamma_{\alpha\beta} (-\Delta E) a_{21}^{\beta} (a_{21}^{\alpha})^* + \gamma_{\alpha\beta} (\Delta E) a_{12}^{\beta} (a_{12}^{\alpha})^* + \gamma_{\alpha\beta} (0) (a_{11}^{\beta} - a_{22}^{\beta}) (a_{11}^{\alpha} - a_{22}^{\alpha})^* \right],$$

$$C_{33} = \sum_{\alpha, \beta} \left[\gamma_{\alpha\beta} (-\Delta E) a_{21}^{\beta} (a_{21}^{\alpha})^* + \gamma_{\alpha\beta} (\Delta E) a_{12}^{\beta} (a_{12}^{\alpha})^* \right].$$

Z tohoto explicitního tvaru je již vidět, že platí

$$\vec{\omega}^{\#} (s) \cdot C \cdot \vec{\omega}^{\#} (s) = \vec{\omega} (s) \cdot C \cdot \vec{\omega} (s).$$

Zbývá tedy ještě vyřešit člen typu $\vec{\omega}^{\#} (s) \cdot C \cdot \vec{\rho}_{\infty}$. To provedeme pomocí explicitního napočtení $\vec{\rho}_{\infty}$. Nejprve z rovnice (5.1.13) napočteme

$$\vec{v} = \left(0, 0, \sum_{\alpha, \beta} \left[\gamma_{\alpha\beta} (\Delta E) a_{12}^{\beta} (a_{12}^{\alpha})^* - \gamma_{\alpha\beta} (-\Delta E) a_{21}^{\beta} (a_{21}^{\alpha})^* \right] \right).$$

A dosazením do (5.1.16) dostaneme

$$\vec{\rho}_\infty = \left(0, 0, \sum_{\alpha, \beta} \frac{\gamma_{\alpha\beta}(\Delta E) a_{12}^\beta (a_{12}^\alpha)^* - \gamma_{\alpha\beta}(-\Delta E) a_{21}^\beta (a_{21}^\alpha)^*}{\gamma_{\alpha\beta}(\Delta E) a_{12}^\beta (a_{12}^\alpha)^* + \gamma_{\alpha\beta}(-\Delta E) a_{21}^\beta (a_{21}^\alpha)^*} \right).$$

Zde vidíme, že na změně znaménka či prohození prvního a druhého členu nezávisí a máme tedy výsledek

$$ds' \frac{1}{2} \vec{\omega}_-^\#(t_0 + t_{fin} - s') \cdot C^T \cdot \left(\vec{\omega}_-^\#(t_0 + t_{fin} - s') - \vec{\rho}_\infty^T \right) = ds \frac{1}{2} \vec{\omega}(s) \cdot C \cdot (\vec{\omega}(s) + \vec{\rho}_\infty),$$

který se od verze bez časové inverze liší pouze znaménkem před $\vec{\rho}_\infty$.

Posledním členem je exponenciála ve tvaru

$$\begin{aligned} \exp \left[-\frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_{fin}} ds \vec{\omega}_-(t_0 + t_{fin} - s) \cdot C_\# \cdot (\vec{\omega}(t_0 + t_{fin} - s) - \vec{\rho}_\infty^T) \right] = \\ = \exp \left[-\frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_{fin}} ds \vec{\omega}_-(s) \cdot C_\# \cdot (\vec{\omega}_-(s) - \vec{\rho}_\infty^T) \right], \end{aligned}$$

kde jsme provedli opět záměnu mezi. Pak uplatníme argument, že množina I má míru nula tj. není pod integrálem rozdíl mezi $\vec{\omega}_-$ a $\vec{\omega}$. A dále opět použijeme argumenty stejně jako na konci předchozího případu a dostáváme

$$\begin{aligned} \exp \left[-\frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_{fin}} ds \vec{\omega}_-(t_0 + t_{fin} - s) \cdot C_\# \cdot (\vec{\omega}(t_0 + t_{fin} - s) - \vec{\rho}_\infty^T) \right] \\ = \exp \left[-\frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_{fin}} ds \vec{\omega}(s) \cdot C \cdot (\vec{\omega}(s) - \vec{\rho}_\infty) \right]. \end{aligned}$$

Tedy vidíme, že i poslední členy se nám v případném podílu navzájem vyruší.

Tedy v obou případech máme značnou shodu pravděpodobnosti časově invertované trajektorie vůči trajektorii původní. Tyto příspěvky jsou stejné a nezávislé na režimu časové inverze a daný poměr pak má tvar

$$\frac{\mathcal{D}(\omega, \omega)}{\mathcal{D}(\Theta\omega, \Theta\omega)} = \frac{1 + \vec{\omega}(t_0) \cdot \vec{\rho}}{1 + \vec{\omega}^\#(t_{fin}) \cdot \vec{\rho}^\#} \prod_{t \in I} \frac{\vec{\omega}(t) \cdot C \cdot (\vec{\omega}(t) - \vec{\rho}_\infty)}{\vec{\omega}(t) \cdot C \cdot (\vec{\omega}(t) + \vec{\rho}_\infty)}. \quad (5.2.11)$$

Tento výsledek, je pak hledaným zobecněním symetrie (4.3.1) v případě dvou hladinového systému pro případ diagonálních členů mimo rovnováhu a i pro měření v libovolné na čase závislé bázi. Jak je patrné, hlavním rozdíl je, že tato relace již závisí na výsledcích měření v průběhu celého procesu, narozdíl od symetrie (4.3.1). Je dobré si všimnout, že stejně jako v klasickém případě (2.2.10), zde máme poměr podmíněných pravděpodobností, který je úměrný pouze příspěvkům ze skoků mezi jednotlivými stavy systému. Příklad, kdy podmíněné

pravděpodobnosti záviseli pouze na rychlostech přechodu v místech přechodu mezi hladinami systému, jsme již vyšetřovali při konstrukci 2.3.3, na rozdíl od klasického případu však nemusí daný poměr rychlostí přechodu záviset na pravděpodobnostech daného výsledku vůči stacionární distribuci, neboť můžeme měřit v bázi nekompatibilní s energetickou. Nabízí se tedy úvaha zda disipované teplo pak nezávěst formálně jako logaritmus pravé strany a obdržet opět flukтуаční relace. Jak uvidíme v případě čisté disipace, kde se budeme disipovanému teplu a především střednímu disipovanému věnovat, je takto naivní konstrukce tepla jakožto dráhové veličiny problémová.

Na závěr ukážeme, že tento vztah je v režimu odpovídající (4.3.1), s ním ve shodě. Pokud budeme chtít uvažovat režim, kdy měření komutuje se stacionární maticí hustoty, tedy režim blízký původní relaci, což znamená v naší notaci, že $\vec{\omega}(t) \parallel \vec{\rho}_\infty$, tak dostaneme

$$\frac{\mathcal{D}(\omega, \omega)}{\mathcal{D}(\Theta\omega, \Theta\omega)} = \frac{1 + \vec{\omega}(t_0) \cdot \vec{\rho}}{1 + \vec{\omega}^\#(t_{fin}) \cdot \vec{\rho}^\#} \prod_{t \in I} \frac{1 - \vec{\omega}(t) \cdot \vec{\rho}_\infty}{1 + \vec{\omega}(t) \cdot \vec{\rho}_\infty}.$$

Vzhledem k tomu, že nyní již měříme neustále ve stejném směru, tak všechny příspěvky v součinu jsou stejné, až na to, že se střídají znaménka u sklárniho součinu. Výsledek tedy závisí již pouze na počtu přeskoků, a na tom kterým směrem byl veden první přeskok. Tj. pro sudý počet přeskoků pak máme

$$\frac{\mathcal{D}(\omega, \omega)}{\mathcal{D}(\Theta\omega, \Theta\omega)} = \frac{1 + \vec{\omega}(t_0) \cdot \vec{\rho}}{1 + \vec{\omega}^\#(t_{fin}) \cdot \vec{\rho}^\#},$$

vzhledem k tomu, že sudý počet přeskoků znamená, že měříme na začátku i na konci do stejného stavu, tak se budou rovnat i pravděpodobnosti v uvedeném podílu. Tj. pro sudý počet skoků se nám výsledek ještě zjednoduší na

$$\frac{\mathcal{D}(\omega, \omega)}{\mathcal{D}(\Theta\omega, \Theta\omega)} = 1,$$

což je ve shodě s (4.3.1), s jediným předpokladem a to, abychom měřili v bázi kompatibilní se stacionárním stavem, ale samotnou stacionaritu stavu jsme nepotřebovali. Kdežto pro lichý počet získáme

$$\frac{\mathcal{D}(\omega, \omega)}{\mathcal{D}(\Theta\omega, \Theta\omega)} = \frac{1 + \vec{\omega}(t_0) \cdot \vec{\rho}}{1 + \vec{\omega}^\#(t_{fin}) \cdot \vec{\rho}^\#} \frac{1 - \vec{\omega}(t_{min}) \cdot \vec{\rho}_\infty}{1 + \vec{\omega}(t_{min}) \cdot \vec{\rho}_\infty},$$

kde $t_{min} = \min_{t \in I} t$. Zde je pak prostor pro použití vztahu (4.3.2), kde pro případ $\rho \sim \mathbb{I}$, platí $\vec{\rho} = 0$ a tedy pravděpodobnosti pak podle předpokladů vyjdou

$$\frac{p(E_2)}{p(E_1)} = \frac{1 - \rho_\infty^3}{1 + \rho_\infty^3},$$

kde ρ_∞^3 je třetí komponenta vektoru $\vec{\rho}_\infty$. Závěrem tedy vidíme, že detailní rovnováha pro rychlosti přechodu mezi energetickými stavy odpovídá klasické relaci pro detailní rovnováhu a dále pak vidíme, tedy dostáváme se do klasického režimu, což podporuje i to, že netriviální příspěvky do poměru dráhových měř dostáváme pro případ měření v jiné než energetické bázi.

Dále rozebereme některé speciální případy, které jdou za rámec právě diskutovaného plně klasického režimu.

5.2.2 Příklad: Režim čisté dekoherence

Jako první rozebereme případ čisté dekoherence. Odpovídající evoluční matice vystupující v (5.1.17) bez části odpovídající hamiltoniánu má obecný tvar

$$C = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

kde $\lambda_{1,2} > 0$ a cílový vektor $\vec{\rho}_\infty$ je nulový až na třetí komponentu, jež odpovídá třetí komponentě počátečního vektoru matice hustoty $\vec{\rho}_0 = \vec{\rho}(t_0)$ tj.

$$\vec{\rho}_\infty = (0, 0, \rho_0^3).$$

Ukážeme, že tato třída matic je pro režim slabé vazby příliš široká, je v případě nedegenerovaného energetického spektra příliš široká. Abychom vyšetřili jakého typu interakce byla musíme provést zpětné odvození korelační matice. Jako první určíme z rovnice (5.1.16) vektor

$$\vec{v} = 0.$$

Tento vektor nám dále z rovnice (5.1.13) říká, že antisymetrická část korelační matice je nulová tj.

$$\gamma^A = 0.$$

U rovnice (5.1.13) ještě chvíli zůstaneme. Dosazením prvního řádku do (5.1.16), a s přihlédnutím k nulovosti vektoru \vec{v} a antisymetrické části korelační matice γ^A , získáme předpis pro evoluční matici a tedy korelační matice má tvar

$$\gamma = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \lambda_2 - \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_1 - \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1 + \lambda_2 \end{pmatrix},$$

což je stejný výsledek, jako bychom dostali porovnáním (5.1.10) a (5.2.10).

Dosazením takto získané korelační matice do rovnice pro disipátor (5.1.12) máme tvar

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^*[\rho] = & \frac{1}{4}(\lambda_1 - \lambda_2) \left[\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \rho \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rho \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] + \\ & + \frac{1}{4}(\lambda_1 + \lambda_2) \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rho \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \rho \right], \end{aligned}$$

který dosazením matice hustoty ve tvaru

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix},$$

zjednodušíme na tvar

$$\mathcal{D}^*[\rho] = -\frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2) \begin{pmatrix} 0 & \rho_{12} \\ \rho_{21} & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2) \begin{pmatrix} 0 & \rho_{21} \\ \rho_{12} & 0 \end{pmatrix}.$$

Z rovnosti prvních dvou diagonálních členů v korelační matici ve tvaru (5.2.1) je vidět, že v případě nedegenerovaného spektra musí být $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$, a tedy předchozí tvar disipátoru

je možný pouze v případě degenerovaného spektra. U spektra nedegenerovaného se nám pak disipátor zjednoduší na tvar

$$\mathcal{D}^*[\rho] = -\lambda \begin{pmatrix} 0 & \rho_{12} \\ \rho_{21} & 0 \end{pmatrix},$$

což je zároveň i \mathcal{D} tj. $\mathcal{D}^* = \mathcal{D}$. A stacionární stav je v tomto případě roven i stavu splňující podmínku (3.2.5) ve tvaru

$$\forall X : \quad \mathcal{D}^*[X\rho] = \mathcal{D}[X]\rho,$$

tedy detailní rovnováha a stacionarita jsou si v případě nedegenerovaného spektra a v případě čisté dekoherence pro dvouhladinový systém ekvivalentní. Dále pak můžeme určit rychlosti přechodů jako

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(X^\dagger \mathcal{D}[Y]\rho \right) &= \rho_{11} \langle E_1 | X^\dagger \mathcal{D}[Y] | E_1 \rangle + \rho_{22} \langle E_2 | X^\dagger \mathcal{D}[Y] | E_2 \rangle \\ &= -\lambda (\rho_{11} X_{21}^* Y_{21} + \rho_{22} X_{12}^* Y_{12}), \end{aligned}$$

v příhodnějším vektorovém zápise pak

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(X^\dagger \mathcal{D}[Y]\rho \right) &= -\frac{\lambda}{8} \left[(1 + \rho^3) (x^1 - ix^2)^* (y^1 - iy^2) + (1 - \rho^3) (x^1 + ix^2)^* (y^1 + iy^2) \right] \\ &= -\frac{\lambda}{4} \left[\vec{x}^* \cdot \left(1 - \frac{\vec{\rho}\vec{\rho}^*}{\|\vec{\rho}\|^2} \right) \cdot \vec{y} - i\vec{\rho} \cdot (\vec{x}^* \times \vec{y}) \right]. \end{aligned}$$

Vzhledem k tomu, že platí rovnice (3.2.6) platí tedy i

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(\mathcal{D} \left[X^\dagger \right] Y\rho \right) &= -\frac{\lambda}{8} \left[(1 + \rho^3) (x^1 - ix^2)^* (y^1 - iy^2) + (1 - \rho^3) (x^1 + ix^2)^* (y^1 + iy^2) \right] \\ &= -\frac{\lambda}{4} \left[\vec{x}^* \cdot \left(1 - \frac{\vec{\rho}\vec{\rho}^*}{\|\vec{\rho}\|^2} \right) \cdot \vec{y} - i\vec{\rho} \cdot (\vec{x}^* \times \vec{y}) \right]. \end{aligned}$$

Pokud budou X a Y projektoři ve stejné bázi, tak zbyde pouze reálná část, a dané rychlosti přechodu budou nulové pro projektoři v bázi odpovídající energetickému spektru a maximální (ve smyslu absolutní hodnoty) pro směry kolmé³.

Další zajímavou veličinou je dekoherenční funkcional $\mathcal{D}(\omega, \omega')$, jehož diagonální elementy dále odvodíme pro některé jednoduché volby. V tomto případě se nejprve budeme soustředit na pravděpodobnost několika typických trajektorií. První z nich je triviální případ, kdy počítáme pravděpodobnost, že se systém udrží při stálém měření ve stejném energetickém stavu, tj. trajektorie je konstantní (jak směr, tak i hodnota kterou naměříme)

$$\forall t > t_0 : \quad \vec{\omega}(t) = \vec{\omega},$$

daná pravděpodobnost je pak daná

$$\mathcal{P}(\omega) = \mathcal{D}(\omega, \omega) = \frac{1 + \vec{\omega} \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2} e^{-\frac{1}{2}(t-t_0)\vec{\omega} \cdot C \cdot (\vec{\omega} - \vec{\rho}_\infty)},$$

³Je otázkou jestli projekce do kolmého směru má smysl či ne, v případě modelu dvouhladinového atomu moc smyslu nenabývá, v případě modelu spinu už má celkem dobrý smysl.

a vzhledem k tomu, že $\vec{\omega}$ patří do jádra matice C , tak se nám výsledek zjednoduší na

$$\mathcal{P}(\omega) = \mathcal{D}(\omega, \omega) = \frac{1 + \vec{\omega} \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2}.$$

Je tedy patrné, že daná pravděpodobnost nezávisí na čase a je daná počáteční pravděpodobností nalezení na dané energetické hladině.

Pokud se budeme ptát na výsledky v případě stejného protokolu měření, ale místy jiných výsledků, tedy bude docházet ke skokům z $\vec{\omega}$ na $-\vec{\omega}$, snadno zjistíme, že takové pravděpodobnosti jsou nulové. Dá se tedy předpokládat, že v dané situaci, kdy měřím při čisté dekoherenci pouze v energetické bázi a neumožním volný časový vývoj, nedostanu ve skrze žádný vývoj.

Pokud budeme chtít opustit tyto triviální případy, je vhodné začít rozlišovat mezi protokolem měření a výsledky co naměřím. Připomeňme, že protokol měření je implicitně zahrnut ve směru vektoru $\vec{\omega}(t)$, naopak výsledky tohoto měření jsou dány orientací $\vec{\omega}(t)$. Zavedme tedy

$$\vec{\omega}(t) = \chi(t) \vec{\varphi}(t),$$

kde $\chi(t) \in \{-1; 1\}$ a je spojitě zprava, kdežto $\vec{\varphi}(t)$ je spojitý až na situace, kdy měním bázi skokem. Tedy v $\chi(t)$ jsou schovány naměřené hodnoty a $\vec{\varphi}(t)$ vyjadřuje protokol měření tj. co měřím. Nyní můžeme přistoupit k situaci, kdy budeme bázi pomalu otáčet konstantní úhlovou rychlostí θ okolo druhé osy⁴, dostaneme již poněkud jiné, netriviální, výsledky. Předně vektor $\vec{\varphi}(t)$ má ve složkách tvar

$$\forall t' \geq t_0 : \quad \vec{\varphi}(t') = (\sin(\theta(t' - t_0)), 0, \cos(\theta(t' - t_0))).$$

V první situaci, kde měříme v dané zvolené bázi stále stejný výsledek (tj. $\chi(t) = konst.$) pak máme

$$\mathcal{P}(\omega) = \frac{1 + \chi(t_0) \vec{\varphi}(t_0) \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2} \exp \left[-\frac{\lambda}{2} \int_{t_0}^t dt' \sin^2(\theta(t' - t_0)) \right],$$

což dá ve výsledku

$$\mathcal{P}(\omega) = \frac{1 + \chi(t_0) \vec{\varphi}(t_0) \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2} \exp \left[-\frac{\lambda}{4} \left((t - t_0) - \frac{\sin(2\theta(t - t_0))}{2\theta} \right) \right].$$

Ekvivalentně, $\mathcal{P}(\omega)$ jako funkce koncového času t , je řešením rovnice

$$\frac{d\mathcal{P}(\omega)}{dt} = -\frac{\lambda}{4} (1 - \cos(2\theta(t - t_0))) \mathcal{P}(\omega),$$

kde derivací myslíme změnu pravděpodobnosti vůči změně celkového času měření, pouze se její pokles jednou za periodu $\frac{\pi}{\theta}$ zastaví, tj. dalším měřením není možný výsledek zlepšit.

Dalším zobecněním je pak situace, kdy se po dobu měření změní jednou hodnota výsledku měření. V tomto případě již nemůžeme mluvit o pravděpodobnosti takové situace, neboť trajektorií $\chi(t)$ s jedním skokem je nespočetně mnoho, ale zavedeme pravděpodobnostní míru na prostoru všech výsledků měření $\chi(t)$ s jedním skokem (tj. nespojitých na intervalu $[t_0, t]$ v jednom bodě). Takováto míra pak má tvar

$$D\mathcal{P}(\chi; \vec{\varphi}) = dt_1 \frac{1}{2} \vec{\varphi}(t_1) \cdot C \cdot \vec{\varphi}(t_1) \frac{1 + \chi(t_0) \vec{\varphi}(t_0) \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2} \exp \left[-\frac{\lambda}{2} \int_{t_0}^t dt' \sin^2(\theta(t' - t_0)) \right],$$

⁴Můžeme si to představit jako měření spinu do směru daném vektorem $\vec{\omega}(t)$.

kde všechny možné výsledky měření jsou charakterizovány časem t_1 , kdy ke změně naměřené hodnoty došlo. Dále na tomto případě rovnou můžeme ilustrovat, že příspěvky pro skok ze spodní hladiny na horní a zpět mají stejné rychlosti vzhledem k tomu, že nezávisí na výsledku měření, což je dáno charakterem dynamiky, která odpovídá čisté dekoherenci. Pokud pak připustíme více změn hodnoty toho, co naměřím, pravděpodobnostní míra nabývá tvaru

$$\begin{aligned} D\mathcal{P}(\chi; \vec{\varphi}) &= \left[dt_1 \frac{1}{2} \vec{\varphi}(t_1) \cdot C \cdot \vec{\varphi}(t_1) \right] \left[dt_2 \frac{1}{2} \vec{\varphi}(t_2) \cdot C \cdot \vec{\varphi}(t_2) \right] \cdots \left[dt_N \frac{1}{2} \vec{\varphi}(t_N) \cdot C \cdot \vec{\varphi}(t_N) \right] \times \\ &\times \frac{1 + \chi(t_0) \vec{\varphi}(t_0) \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2} \exp \left[-\frac{\lambda}{2} \int_{t_0}^t dt' \sin^2(\theta(t' - t_0)) \right], \end{aligned}$$

kde navíc časy musí být časově uspořádány, tedy platí $t_1 < t_2 < \cdots < t_N$. Pokud se pak budeme dále zabývat nikoliv jednou, ale celou sadou možných naměřených situací. Pravděpodobnost libovolné množiny trajektorií Ω je potom

$$\mathcal{P}(\Omega) = \int_{\Omega} D\mathcal{P}(\omega),$$

kde integrál chápeme ve smyslu součtu přes všechny výsledky měření χ z Ω . Pokud pak budeme uvažovat případ N skoků v libovolném čase je

$$\Omega = \{t_1, t_2, \dots, t_N \in (t_0, t] : t_1 < t_2 < \dots < t_N\},$$

a tedy pravděpodobnost takové situace, kdy nás nezajímá, kdy ke změně naměřené hodnoty došlo, se rovná

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\Omega) &= \frac{1 + \chi(t_0) \vec{\varphi}(t_0) \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2N!} \left[\frac{\lambda}{4} \left((t - t_0) - \frac{\sin(2\theta(t - t_0))}{2\theta} \right) \right]^N \times \\ &\times \exp \left[-\frac{\lambda}{4} \left((t - t_0) - \frac{\sin(2\theta(t - t_0))}{2\theta} \right) \right], \end{aligned}$$

Pokud půjdeme ještě dále a budeme se ptát, jaká je pravděpodobnost, že do času t k sudému (Ω_+) počtu přeskoků z jednoho stavu do druhého nebo naopak k lichému (Ω_-) počtu přeskoků, tak dostaneme po přescítání řad

$$\mathcal{P}(\Omega_+) = \frac{1 + \chi(t_0) \vec{\varphi}(t_0) \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2} \frac{1 + \exp \left[-\frac{\lambda}{2} \left((t - t_0) - \frac{\sin(2\theta(t - t_0))}{2\theta} \right) \right]}{2}, \quad (5.2.12)$$

$$\mathcal{P}(\Omega_-) = \frac{1 + \chi(t_0) \vec{\varphi}(t_0) \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2} \frac{1 - \exp \left[-\frac{\lambda}{2} \left((t - t_0) - \frac{\sin(2\theta(t - t_0))}{2\theta} \right) \right]}{2}, \quad (5.2.13)$$

tyto pravděpodobnosti nám pak poslouží dále pro vyhodnocování významu disipovaného tepla. Při vyhodnocování disipovaného tepla začneme od místa, kde jsme skončili. Režim toho co měříme zachováme stejný jako v předešlém příkladě a jako první situaci budeme zkoumat případ, kdy měříme po dobu $t - t_0 = \frac{\pi}{\theta}$. Zvolení takto specifického časového úseku nám zaručí, že poslední měření je opět v energetické bázi. Pokud se pak budeme ptát, jaká je střední disipované teplo systému, budeme se zajímat o změnu střední energie systému.

V nejjednodušším případě, kdy nás nebudou zajímat výsledky zjištěné měření v průběhu časového intervalu, pak počáteční střední energie odpovídá

$$\langle E \rangle_{t_0} = \frac{1 + \chi(t_0) \vec{\varphi}(t_0) \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2} E_1 + \frac{1 - \chi(t_0) \vec{\varphi}(t_0) \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2} E_2,$$

a koncovou střední energii spočteme tak, že si uvědomíme, že pokud vezmeme situace, kdy nedošlo k žádnému, či sudému počtu přeskoků z jedné hladiny na druhou, tak systém se nachází v opačném energetickém stavu než v situaci po prvním změření, naopak, pokud došlo k sudému počtu přeskoků mezi hladinami, energetický stav se nám zachová. Zde tedy najdeme uplatnění vzorců (5.2.12) a (5.2.13). Koncová střední hodnota tedy je

$$\langle E \rangle_t = \left[p_{t_0}(E_1) \frac{1 - e^{-\frac{\pi\lambda}{2\theta}}}{2} + p_{t_0}(E_2) \frac{1 + e^{-\frac{\pi\lambda}{2\theta}}}{2} \right] E_1 + \left[p_{t_0}(E_1) \frac{1 + e^{-\frac{\pi\lambda}{2\theta}}}{2} + p_{t_0}(E_2) \frac{1 - e^{-\frac{\pi\lambda}{2\theta}}}{2} \right] E_2,$$

kde jsme použili označení $p_{t_0}(E_1)$ jako označení pravděpodobnosti naměření energie E_1 v počátečním stavu, a tedy střední disipované teplo v tomto případě můžeme zavést jako

$$\langle Q \rangle = \langle E \rangle_t - \langle E \rangle_{t_0} = (p_{t_0}(E_1) - p_{t_0}(E_2)) \frac{1 + e^{-\frac{\pi\lambda}{2\theta}}}{2} \Delta E, \quad (5.2.14)$$

což můžeme také chápat jako střední disipované teplo středované přes trajektorie měření, kdy máme specifikované, co měříme, ale nezajímá nás výsledek toho co naměříme. Pokud bychom přidali další interval měření $\frac{\pi}{\theta}$, tak by se role trajektorií se sudým a lichým počtem přeskoků obracel vzhledem k zachování či změně energetického stavu, a z tohoto důvodu se pak krom exponentu v exponenciále změnil i znaménko před ní.

Čím se však celá situace značně zkomplikuje, je pokud bychom chtěli přiřadit disipované teplo jednotlivým výsledkům měření a výsledné střední disipované teplo pak interpretovat jako středeování disipovaného tepla přes všechny možné výsledky měření. Intuice nám naznačuje, že v případě měření po dobu takového intervalu, kdy na konci opět měříme v energetické bázi, stačí zvážit počet změn stavu a jaký stav byl na začátku a přiřadit mu jednu z vah $-\Delta E, 0, \Delta E$, podle příslušné situace. Po přesčítání pak dostaneme shodný výsledek s předchozím případem. Jak jsme již v diskutovali u rovnice (5.2.11), nabízela se tam otázka, zda-li není možné přiřadit disipované teplo dané trajektorii pouze pohledem na poměry rychlostí přechodů. Zde jsme ukázali, že klíčovou roli v našem případě hraje spíše počet skoků a doba časového vývoje, než rychlosti přechodů jež jsou v obou směrech stejné.

Další otázka pak zní, jak přistupovat k problému, kdy na konci nekončíme v energetické bázi, ale provedeme do ní dodatečné měření. Pro tuto situaci je vhodné spočítat obdobu změny střední energie v případě, kdy nás nezajímá, co jsme naměřili cestou. V takovém případě jsou jednotlivé pravděpodobnosti rovny

$$\begin{aligned} P(E(t_0) = E_1, E(t) = E_1) &= p_{t_0}(E_1) \frac{1 + \exp\left[-\frac{\lambda}{2} \left((t - t_0) - \frac{\sin(2\theta(t-t_0))}{2\theta} \right)\right]}{2} \frac{1 + \cos(\theta(t-t_0))}{2} + \\ &+ p_{t_0}(E_1) \frac{1 - \exp\left[-\frac{\lambda}{2} \left((t - t_0) - \frac{\sin(2\theta(t-t_0))}{2\theta} \right)\right]}{2} \frac{1 - \cos(\theta(t-t_0))}{2}, \\ P(E(t_0) = E_1, E(t) = E_2) &= p_{t_0}(E_1) \frac{1 + \exp\left[-\frac{\lambda}{2} \left((t - t_0) - \frac{\sin(2\theta(t-t_0))}{2\theta} \right)\right]}{2} \frac{1 - \cos(\theta(t-t_0))}{2} + \\ &+ p_{t_0}(E_1) \frac{1 - \exp\left[-\frac{\lambda}{2} \left((t - t_0) - \frac{\sin(2\theta(t-t_0))}{2\theta} \right)\right]}{2} \frac{1 + \cos(\theta(t-t_0))}{2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P(E(t_0) = E_2, E(t) = E_2) &= p_{t_0}(E_2) \frac{1 + \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\left((t-t_0) - \frac{\sin(2\theta(t-t_0))}{2\theta}\right)\right]}{2} \frac{1 + \cos(\theta(t-t_0))}{2} + \\
&+ p_{t_0}(E_2) \frac{1 - \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\left((t-t_0) - \frac{\sin(2\theta(t-t_0))}{2\theta}\right)\right]}{2} \frac{1 - \cos(\theta(t-t_0))}{2}, \\
P(E(t_0) = E_2, E(t) = E_1) &= p_{t_0}(E_2) \frac{1 + \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\left((t-t_0) - \frac{\sin(2\theta(t-t_0))}{2\theta}\right)\right]}{2} \frac{1 - \cos(\theta(t-t_0))}{2} + \\
&+ p_{t_0}(E_2) \frac{1 - \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\left((t-t_0) - \frac{\sin(2\theta(t-t_0))}{2\theta}\right)\right]}{2} \frac{1 + \cos(\theta(t-t_0))}{2},
\end{aligned}$$

což dává stejným postupem jako v předchozím případě střední disipované teplo

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{2} (p_{t_0}(E_1) - p_{t_0}(E_2)) \left(1 - \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\left((t-t_0) - \frac{\sin(2\theta(t-t_0))}{2\theta}\right)\right] \cos(\theta(t-t_0)) \right) \Delta E,$$

což je přímým zobecněním vztahu (5.2.14). Snadno se pak derivací podle celkové doby měření přesvědčíme, že střední disipované teplo nabývá lokálních extrémů za jedné z těchto podmínek

$$\begin{aligned}
\sin(\theta(t-t_0)) &= 0, \\
\sin(2\theta(t-t_0)) &= -\frac{2\theta}{\lambda},
\end{aligned}$$

kde případ $\theta(t-t_0) = \pi$ se jeví jako globální maximum. Dalším snadno odpozorovatelným faktem je, že střední disipované teplo jde v limitě nekonečného spojitého měření k

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{2} (p_{t_0}(E_1) - p_{t_0}(E_2)) \Delta E.$$

Tímto výpočtem jsme dokázali, že pokud neskončíme v energetické bázi, nic se neděje a opět můžeme ohodnotit jednotlivé trajektorie jako $\Delta E, 0, -\Delta E$, s tím, že musíme zohlednit koncový stav trajektorie, respektive, abychom byli přesnější, náhlé změření na konci do energetického nemá vliv na střední teplo. Při ohodnocování jednotlivých trajektorií disipovaným teplem pak můžeme postupovat stejně jako v předešlém případě, jen musíme zohlednit skok do energetické báze ve znaménku celého příspěvku. Tj. pokud závěrečný skok je o úhel více než $\frac{\pi}{2}$, otáčíme znaménko, a v případě skoku o $\frac{\pi}{2}$ není pak disipované teplo závislé na počtu skoků mezi stavy, ale závisí pouze na koncovém a počátečním stavu. Podobné argumenty pak jde použít i v případě, že protokol měření se mění spojitě v čase s případným doměřením na konci do energetické báze.

Jak jsme před chvílí ukázali, při ohodnocování jednotlivých skoků, kdy v průběhu měření došlo ke změně báze toho, co měřím skokem do báze kolmé, dostáváme poněkud patologickou situaci, v podobě toho, že systém zapoměl na svojí historii až do této doby a chová se jako by byl na začátku v nekonečně teplotním stavu. Důsledkem takového chování pak je, že ztrácíme aditivní vlastnost pro námi zvolený způsob přiřazování tepla jednotlivým trajektoriím. Tj. neplatí v obecném případě

$$Q_{t_0, t_2}[\omega] = Q_{t_0, t_1}[\omega] + Q_{t_1, t_2}[\omega].$$

Toto nám naznačuje, že ani druhý námi zvolený způsob není vhodný pro popis veličin závislých na trajektoriích, jako jsou teplo a práce. Problém, který se zde vyskytuje, a který se

nevyskytuje v klasickém případě, je právě způsoben povahou kvantového měření. Tedy formulace tepla a práce jako veličiny závisující na trajektorii je i nadále otevřeným problémem a nelze postupovat analogicky s klasickou formulací.

5.2.3 Příklad: Disipace

Nejprve zkusíme zkonstruovat model komplementární k předchozímu případu a odpovídající čisté disipaci. Čistou disipací rozumíme relaxaci do jednoho z energetických stavů, bez ohledu na off-diagonální elementy matice hustoty. Pro tento režim odpovídá matice časového vývoje (opět bez části odpovídající hamiltoniánu)

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix},$$

kde $\lambda > 0$ a vektor hustoty, ke kterému konverguje

$$\vec{\rho}_\infty = (0, 0, p_\infty(E_1) - p_\infty(E_2)),$$

kde $p_\infty(E)$ značí pravděpodobnost výskytu systému v energetickém stavu E v případě, že systém je ve stacionárním stavu.

Ačkoliv, se zdá tento příklad dobře zdefinovaný, je bohužel nefyzikální, problémem je podmínka na to, aby rychlosti přechodu vystupující v dekoherenčním funkciónálu (5.2.8) byly vždy kladné. Platí totiž

$$\vec{\omega} \cdot C \cdot (\vec{\omega} - \rho_\infty) = \lambda \omega_3 (\omega_3 - p_\infty(E_1) + p_\infty(E_2)),$$

kde máme možnost volby ω_3 . Stačí zvolit $\omega_3 < p_\infty(E_1) - p_\infty(E_2)$ a dostaneme rychlost přechodu zápornou. To ukazuje, že tato naivní konstrukce není konzistentní.

Řešením předešlého problému, je opustit tuto naivní volbu a přidat k disipaci i dekoherenci. Vezměme proto dynamiku řízenou maticí

$$C = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\lambda & -\frac{1}{\hbar}\Delta E & 0 \\ \frac{1}{\hbar}\Delta E & \frac{1}{2}\lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix},$$

se stacionární distribucí

$$\vec{\rho}_\infty = (0, 0, \rho_\infty^3) = (0, 0, p_\infty(E_1) - p_\infty(E_2)).$$

Nejprve se podívejme na to, co jsme předešlému modelu vytýkali, tj. na rychlosti přechodu

$$\vec{\omega} \cdot C \cdot (\vec{\omega} - \rho_\infty) = \frac{\lambda}{2} \left(\vec{\omega} \cdot (\vec{\omega} - \vec{\rho}_\infty) + (\omega^3)^2 - \omega^3 \rho_\infty^3 \right),$$

což po rozepsání dává

$$\vec{\omega} \cdot C \cdot (\vec{\omega} - \rho_\infty) = \frac{\lambda}{2} \left(1 + (\omega^3)^2 - 2\omega^3 \rho_\infty^3 \right) = \frac{\lambda}{2} \left[(\omega^3 - \rho_\infty^3)^2 + 1 - (\rho_\infty^3)^2 \right],$$

což je vždy nezáporné s minimem $\vec{\omega} = \vec{\rho}_\infty$.

Nyní opět provedeme rozbor dané konfigurace a pokusíme se získat korelační matici vystupující ve tvaru Lindbladových generátorů (5.1.12). Jako první opět určíme podle (5.1.16) vektor

$$\vec{v} = (0, 0, -\lambda(p_\infty(E_1) - p_\infty(E_2))).$$

Z něho pak s pomocí rovnice (5.1.13) určíme antisymetrickou část korelační matice

$$2(\gamma_{12}^A - \gamma_{21}^A) = 4\gamma_{12}^A = v^3,$$

zbylé členy anitisymetrické části jsou nulové. Dále pak podle rovnice (5.2.9) dopočítáme symetrickou část a celá korelační matice pak nabývá tvaru

$$\gamma = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\lambda & -\frac{i}{4}\lambda(p_\infty(E_1) - p_\infty(E_2)) & 0 \\ \frac{i}{4}\lambda(p_\infty(E_1) - p_\infty(E_2)) & \frac{1}{4}\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Abych mohli lépe zrekonstruovat tvar interakce, tak budeme pro začátek předpokládat, že v interakci vystupují kreační a anihilační operátory na dvouhladinovém systému⁵. Tj.

$$A_1 = a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_2 = a = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Pak vzhledem k obecnému tvaru korelační matice (5.2.1) získáme vztahy

$$\begin{aligned} \gamma_{11}(\Delta E) + \gamma_{22}(-\Delta E) &= \lambda, \\ \gamma_{11}(\Delta E) - \gamma_{22}(-\Delta E) &= -\lambda(p_\infty(E_1) - p_\infty(E_2)), \end{aligned}$$

což po drobné úpravě dává

$$\begin{aligned} \gamma_{11}(\Delta E) &= \lambda p_\infty(E_2), \\ \gamma_{22}(-\Delta E) &= \lambda p_\infty(E_1). \end{aligned}$$

Jak je patrné z konstrukce, v interakčním hamiltoniánu mezi rezervoirem a systémem, máme členy typu

$$H_I = \sqrt{\lambda}(a^\dagger b + a b^\dagger),$$

kde $\sqrt{\lambda}$ je síla interakce, a^\dagger a a jsou kreační a anihilační operátory na hilbertově prostoru odpovídající systému a b^\dagger s b jsou kreační a anihilační operátory na termodynamické lázni. Tento tvar disipace s dekoherencí má také tu výhodu, že interakční hamiltonián mezi systémem a lázní má tvar fermion-fermionové/bosonové interakce, bez dalších členů. Pro měření v energetické bázi, vzhledem k tomu, že dekoherence do těchto členů nepřispívá má stejné výsledky jako čistá disipace.

⁵V tomto případě se jedná o systém s fermionovou charakteristikou, neboť platí $\{a^\dagger, a\} = 1$. Dá se snadno ukázat, že neexistuje taková volba matic 2x2, která by zajistila, že se bude jednat o systém s bosonovou charakteristikou

Zbývá tedy určit poslední sadu parametrů tak, aby platilo (opět na základě rovnice (5.2.1) a porovnáním s korelační maticí)

$$\sum_{\alpha,\beta} \gamma_{\alpha\beta}(0) (a_{11}^\alpha - a_{22}^\alpha)^* (a_{11}^\beta - a_{22}^\beta) = -\lambda,$$

kde je vhodné si všimnout, že i v případě, že budeme uvažovat interakci zprostředkovanou vazbou skrze jeden stupeň volnosti, je zde nadbytek volných konstant viz

$$\gamma_{33}(0) |a_{11}^3 - a_{22}^3|^2 = -\lambda.$$

Vhodná volba pak je

$$\begin{aligned} \gamma_{33}(0) &= -1, \\ a_{11}^3 &= \frac{1}{2}\sqrt{\lambda}, \\ a_{22}^3 &= -\frac{1}{2}\sqrt{\lambda}. \end{aligned}$$

Tímto bysme měli probráno jaký typ interakce dané chování může způsobit. Výsledný tvar disipátoru pak bude

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^*[\rho] &= \lambda p_\infty(E_2) \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rho \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \rho \right\} \right] + \\ &+ \lambda p_\infty(E_1) \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \rho \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \rho \right\} \right], \end{aligned}$$

po rozepsání do složek pak máme

$$\mathcal{D}^*[\rho] = -\lambda \begin{pmatrix} p_\infty(E_2) \rho_{11} - p_\infty(E_1) \rho_{22} & \frac{1}{2} \rho_{12} \\ \frac{1}{2} \rho_{21} & p_\infty(E_1) \rho_{22} - p_\infty(E_2) \rho_{11} \end{pmatrix},$$

a snadno se dovtípíme, že duální generátor časového vývoje má tvar

$$\mathcal{D}[X] = -\lambda \begin{pmatrix} p_\infty(E_2) (X_{11} - X_{22}) & \frac{1}{2} X_{12} \\ \frac{1}{2} X_{21} & p_\infty(E_1) (X_{22} - X_{11}) \end{pmatrix}.$$

Nyní se proto budeme věnovat dalším aspektům této situace.

Opět je snadné nahlédnout, že pro stacionární stav platí

$$\mathcal{D}^*[X\rho] = \mathcal{D}[X]\rho,$$

A tedy snadno můžeme spočítat

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[X^\dagger \mathcal{D}[Y]\rho \right] &= -\lambda p_\infty(E_1) p_\infty(E_2) (Y_{11} - Y_{22}) (X_{11}^* - X_{22}^*) \\ &- \frac{\lambda}{2} (Y_{12} X_{12}^* p_\infty(E_2) + Y_{21} X_{21}^* p_\infty(E_1)), \end{aligned}$$

kde ve speciálním případě dostaneme

$$\begin{aligned} \text{Tr} [P(E_1) \mathcal{D}[P(E_2)] \rho] &= \lambda p_\infty(E_1) p_\infty(E_2), \\ \text{Tr} [P(E_2) \mathcal{D}[P(E_1)] \rho] &= \lambda p_\infty(E_1) p_\infty(E_2). \end{aligned}$$

Kde vidíme, že samotné rychlosti přechodu jsou

$$\begin{aligned}k(E_1, E_2) &= \lambda p_\infty(E_2), \\k(E_2, E_1) &= \lambda p_\infty(E_1),\end{aligned}$$

které pak dávají detailní rovnováhu ve tvaru

$$\frac{k(E_1, E_2)}{k(E_2, E_1)} = \frac{p_\infty(E_2)}{p_\infty(E_1)}.$$

Další věc, na kterou se budeme soustředit je dekoherenční funkcionál. Zde nejprve začneme opět od těch nejjednodušších situací po ty složitější. Prvním režimem je spojitě měření v energetické bázi, tj. v naší notaci

$$\forall t' > 0: \quad \vec{\omega}(t') \parallel \vec{\omega}_\infty.$$

V tomto režimu spočteme nejprve pravděpodobnost, že systém zůstane na určité energetické hladině.

$$\mathcal{P}(\omega) = \frac{\|\vec{\rho}_\infty\| + \chi \vec{\rho}_\infty \cdot \vec{\rho}}{2\|\vec{\rho}_\infty\|} \exp \left[-\frac{1}{2}(t - t_0) \frac{1 - \chi \|\vec{\rho}_\infty\|}{\|\vec{\rho}_\infty\|^2} \vec{\rho}_\infty \cdot C \cdot \vec{\rho}_\infty \right].$$

Pro speciální případ stacionárního stavu $\rho = \rho_\infty$ pak máme

$$\mathcal{P}(\omega) = \left[\frac{1 + \chi}{2} p(E_1) + \frac{1 - \chi}{2} p(E_2) \right] \exp \left[-\lambda(t - t_0) \left(\frac{1 - \chi}{2} p(E_1) + \frac{1 + \chi}{2} p(E_2) \right) \right].$$

Pokud budeme sledovat prevděpodobnostní míru trajektorií, ve kterých dochází ke skokům z jedné energetické hladiny na druhou, dostaneme

$$\begin{aligned}D\mathcal{P}(\omega) &= \frac{\|\vec{\rho}_\infty\| + \chi(t_0) \vec{\rho}_\infty \cdot \vec{\rho}}{2\|\vec{\rho}_\infty\|} \prod_{s_i \in I} ds_i \lambda \left[\frac{1 - \chi(s_i)}{2} p_\infty(E_1) + \frac{1 + \chi(s_i)}{2} p_\infty(E_2) \right] \times \\ &\quad \times \exp \left[-\lambda \int_{t_0}^{t_{fin}} ds \left(\frac{1 - \chi(s)}{2} p_\infty(E_1) + \frac{1 + \chi(s)}{2} p_\infty(E_2) \right) \right],\end{aligned}$$

což odpovídá režimu chování známého z klasické mechaniky. Pokud vezmeme stejnou situaci z pohledu časové inverze, tak podle vztahu (5.2.11) dostaneme

$$\frac{D\mathcal{P}(\omega)}{D\mathcal{P}(\Theta\omega)} = \frac{\|\vec{\rho}_\infty\| + \chi(t_0) \vec{\rho}_\infty \cdot \vec{\rho}}{\|\vec{\rho}_\infty\| + \chi(t_{fin}) \vec{\rho}_\infty \cdot \vec{\rho}_\#} \prod_{s \in I} \frac{\frac{1 - \chi(s)}{2} p_\infty(E_1) + \frac{1 + \chi(s)}{2} p_\infty(E_2)}{\frac{1 + \chi(s)}{2} p_\infty(E_1) + \frac{1 - \chi(s)}{2} p_\infty(E_2)},$$

kde v obecnějším případě by zde byl poměr rychlostí přechodu typu $\vec{\omega} \cdot C \cdot (\vec{\omega} - \vec{\rho}_\infty)$.

Vidíme, že tento příklad má řadu aspektů klasických. Kvantové projevy pak opět jako v předešlém případě najdeme v případě měření do báze, která není energetickou. Opět se omezíme na speciální případ, kdy pomalu konstantní rychlostí přecházím z jedné báze do další, tj. pro protokol měření platí

$$\forall t' \geq t_0: \quad \vec{\varphi}(t') = (\sin(\theta(t' - t_0)), 0, \cos(\theta(t' - t_0))).$$

Dále pak spočteme míru na trajektoriích, která má v tomto konkrétním případě tvar

$$\begin{aligned}
D\mathcal{P}(\chi; \vec{\varphi}) &= \left[dt_1 \frac{\lambda}{4} (1 + \cos^2(\theta(t_1 - t_0)) - 2\chi(t_1) \cos(\theta(t_1 - t_0)) \rho_\infty^3) \right] \times \\
&\times \left[dt_2 \frac{\lambda}{4} (1 + \cos^2(\theta(t_2 - t_0)) - 2\chi(t_2) \cos(\theta(t_2 - t_0)) \rho_\infty^3) \right] \times \\
&\vdots \\
&\times \left[dt_N \frac{\lambda}{4} (1 + \cos^2(\theta(t_N - t_0)) - 2\chi(t_N) \cos(\theta(t_N - t_0)) \rho_\infty^3) \right] \times \\
&\times \frac{1 + \chi(t_0) \vec{\varphi}(t_0) \cdot \vec{\rho}(t_0)}{2} \times \\
&\times \exp \left[-\frac{\lambda}{4} \int_{t_0}^t dt' (1 + \cos^2(\theta(t' - t_0)) - 2\chi(t') \cos(\theta(t' - t_0)) \rho_\infty^3) \right],
\end{aligned}$$

Dosazením takto charakterizované míry do symetrie (5.2.11), explicitního tvaru ρ_∞^3 dostaneme

$$\frac{\mathcal{P}(\chi; \vec{\varphi})}{\mathcal{P}(\chi; \vec{\varphi})} = \prod_t \frac{1 + \cos^2(\theta(t - t_0)) - 2\chi(t) \cos(\theta(t - t_0)) (p_\infty(E_1) - p_\infty(E_2))}{1 + \cos^2(\theta(t - t_0)) + 2\chi(t) \cos(\theta(t - t_0)) (p_\infty(E_1) - p_\infty(E_2))},$$

z čehož je patrné, že k relaxaci nedochází pokud měříme do báze kolmé k energetické a naopak dochází k ní nejrychleji v energetické bázi. Opět tedy dostáváme netriviální výsledky, které nejsou v klasickém režimu možné. Ukazuje se, že to měřením v průběhu časového můžeme regulovat dynamiku, což je prvek oproti klasické fyzice nový.

Na příkladech jsme ukázali, že pochopení vlivu měření v kvantové mechanice na otevřené systémy je klíčové pro možné formulování flukuačních symetrií a pojmů typu práce a teplo, které v klasické fyzice závisejí na trajektoriích. Tedy, konzistenční definice těchto veličin (nejen jejich středních hodnot, ale i jejich fluktuací), zůstává otevřeným problémem. V této práci jsme se nezabývali systémy, které jsou v kontaktu s více rezervoáry, ačkoliv je to v principu možné, neboť v Blochově reprezentaci je přidání dalšího rezervoáru ekvivalentní přičtení dalších členů k matici časového vývoje C a ekvivalentnímu upravení vektoru hustoty $\vec{\rho}_\infty$. Studium těchto modelů, stejně jako modelů s vyšším spinem, pro něž detailní rovnováha není ekvivalentní podmínce stacionarity, by pak umožnilo analyzovat fyzikálně relevantní systémy popisující kvantový transport.

Kapitola 6

Závěr

V této práci jsme studovali některé modely otevřených kvantových systémů z hlediska jejich chování vůči časové inverzi. Nalezli jsme symetrii dekoherenčního funkcionálu jako důsledek obecné formulace detailní rovnováhy pro jistou třídu trajektorií. Tato symetrie je kvantovým zobecněním invariance klasické dráhové míry pro rovnovážné procesy. Jistou nevýhodou je, že její platnost je velmi omezená. Tato omezení jsme se pokusili částečně odstranit studiem jednoduchých modelů, kde jsme s výhodou využili Blochovu vektorovou reprezentaci spinových systémů. Ukázalo se, že na rozdíl od klasické situace, míra narušení časové inverze u kvantových otevřených systémů, nemusí být v bezprostřední relaci k přímo měřitelným termodynamickým veličinám jako je změna entropie, práce nebo tepla. Podstatnou roli zde hraje ryze kvantový proces měření. Tato práce odkrývá i několik otevřených problémů:

1. Zatímco tato práce diskutovala výhradně dynamiku systémů v termodynamické rovnováze s jedním rezervoárem a relaxaci do této rovnováhy, zajímavějším případem je interakce systému s větším počtem rezervoárů mimo termodynamickou rovnováhu (kvantový transport). Tyto procesy také umožňují diskutovat platnost flukтуаčních relací ve stacionárním režimu.
2. Zbývá taktéž provést detailnější rozbor off-diagonálních komponent dekoherenčního funkcionálu pro modely studované v kapitole 5. Tento problém je relevantní, protože kompletní dekoherenční funkcionál obsahuje informaci o volném vývoji systému a o kvantové koherenci mezi jednotlivými trajektoriemi.
3. Otevřeným problémem také zůstává porozumění vztahu mezi přístupem studovaným v této práci a dalšími přístupy jako je metoda úplné transportní statistiky [FNB⁺08] nebo metoda kvantových subansámbľů (viz [AN04]).

Přestože se tedy v této práci nepodařilo dojít k definitivním závěrům, podařilo se částečně identifikovat kritická místa bránící formulaci flukтуаčních relací ve stejné obecnosti, jako je tomu pro klasické otevřené systémy.

Dodatky

Dodatek A

Důkaz vztahu mezi Gibbsovou a Shannonovou entropií

Chceme dokázat, že Shannonova entropie, za daného rozdělení na makrostavech $\hat{\mu}$ nabývá extrému, právě tehdy když je rovna Gibbsově entropii. Tedy formálně, chceme dokázat vztah (2.2.7) ve tvaru

$$S_G(\hat{\mu}) = \sup_{\nu: \hat{\rho}[\nu] = \hat{\mu}} S(\nu)$$

Důkaz se nese v duchu hledání extrému s použitím Lagrangeových multiplikátorů. Hledáme extrém Shannonovy entropie s vazbou

$$\forall m: \quad \nu(\Omega_m) = \hat{\mu}(m), \quad (\text{A.1})$$

kterou dále přepíšeme do podoby integrálu přes konfigurační prostor následujícím způsobem

$$\forall m: \quad \hat{\mu}(m) - \int_{\Omega} d\rho(x) \frac{d\nu}{d\rho}(x) \chi_m(x) = 0,$$

kde χ_m je charakteristická funkce množiny Ω_m . Variace vazby pak odpovídá

$$\begin{aligned} \delta \left[\hat{\mu}(m) - \int_{\Omega} d\rho(x) \frac{d\nu}{d\rho}(x) \chi_m(x) \right] &= -\delta \left[\int_{\Omega} d\rho(x) \frac{d\nu}{d\rho}(x) \chi_m(x) \right] \\ &= - \int_{\Omega} d\rho(x) \delta \left[\frac{d\nu}{d\rho} \right](x) \chi_m(x). \end{aligned}$$

Obdobně pak variace Shannonovy entropie (2.2.3) odpovídá

$$\begin{aligned} \delta S(\nu) &= -\delta \left[\int_{\Omega} d\nu(x) \ln \frac{d\nu}{d\rho}(x) \right] \\ &= - \int_{\Omega} d\rho(x) \delta \left[\frac{d\nu}{d\rho}(x) \ln \frac{d\nu}{d\rho}(x) \right] \\ &= - \int_{\Omega} d\rho(x) \delta \left[\frac{d\nu}{d\rho} \right](x) \left[\ln \frac{d\nu}{d\rho}(x) + 1 \right]. \end{aligned}$$

Složením pak dostáváme podmínku na extrém v podobě

$$-\int_{\Omega} d\rho(x) \delta \left[\frac{d\nu}{d\rho} \right] (x) \left[\ln \frac{d\nu}{d\rho} (x) + 1 \right] = -\sum_m \lambda_m \int_{\Omega} d\rho(x) \delta \left[\frac{d\nu}{d\rho} \right] (x) \chi_m(x),$$

což vyjádříme jako

$$\int_{\Omega} d\rho(x) \delta \left[\frac{d\nu}{d\rho} \right] (x) \left[\ln \frac{d\nu}{d\rho} (x) + 1 - \sum_m \lambda_m \chi_m(x) \right] = 0.$$

Dále pak již stačí řešit rovnici

$$\forall x \in \Omega : \quad \ln \frac{d\nu}{d\rho} (x) + 1 - \sum_m \lambda_m \chi_m(x) = 0,$$

kde řešení se nám nabízí ve tvaru

$$\forall x \in \Omega : \quad \frac{d\nu}{d\rho} (x) = \sum_m \chi_m(x) e^{\lambda_m - 1}.$$

Dosazením do rovnic vazby (A.1) pak dostáváme podmínku na koeficienty λ_m ve tvaru

$$e^{\lambda_m - 1} = \frac{\hat{\mu}(m)}{\rho(\Omega_m)}.$$

Zpětným dosazením do výsledku pak sledáváme extrém pro případ $\nu = \hat{\mu} \times \rho$ dle definice (2.2.2) a tedy Gibbsova entropie maximalizuje entropii Shannonovu v případě známého rozložení pravděpodobnosti na makrostavech.

Dodatek B

Vlastnosti antilineárních operátorů. Časová inverze.

Tento dodatek je rozšířením dodatku *Antilineární operátory* v knize [For04] se zaměřením na operátor časové inverze \mathbb{T} . Antilineární operátor \mathbb{T} je takový, jež pro každé X, Y a každé $a, b \in \mathbb{C}$ splňuje

$$\mathbb{T}(aX + bY) = a^*\mathbb{T}(X) + b^*\mathbb{T}(Y),$$

kde a^* značí komplexně sdružené a . Pro takto zavedený antilineární operátor pak platí následující sada rovnic

$$|\mathbb{T}\phi\rangle \equiv \mathbb{T}|\phi\rangle = \sum_{m,n} \langle \phi|\psi_n\rangle T_{mn}^{(\psi)} |\psi_m\rangle, \quad (\text{B.1})$$

$$\langle \xi|\mathbb{T}\varphi\rangle = \sum_{m,n} \langle \xi|\psi_m\rangle \langle \varphi|\psi_n\rangle T_{mn}^{(\psi)}, \quad (\text{B.2})$$

$$\langle \mathbb{T}\xi|\varphi\rangle = \sum_{m,n} \langle \psi_m|\varphi\rangle \langle \psi_n|\xi\rangle \left(T_{mn}^{(\psi)}\right)^*, \quad (\text{B.3})$$

$$\langle \varphi|\mathbb{T}\chi\rangle = \langle \chi|\mathbb{T}^\dagger\varphi\rangle = \langle \mathbb{T}^\dagger\varphi|\chi\rangle^*, \quad (\text{B.4})$$

kde první rovnice vyjadřuje definici maticových elementů, druhá a třetí pak reprezentují skalární součin zleva a zprava a poslední pak vzejde z porovnání předešlých dvou. Tyto vztahy platí obecně pro antilineární operátor. Pro časovou inverzi \mathbb{T} , která je antiunitární pak platí ještě vztahy

$$\begin{aligned} \mathbb{T}^\dagger\mathbb{T} &= \mathbb{I}, \\ \mathbb{T}^2 &= \pm\mathbb{I}, \end{aligned}$$

kde první je výše zmíněná antiunitarita a druhý je pak specifický konkrétně pro operátor časové inverze, z kterého pak přímo plyne

$$\mathbb{T}^\dagger = \pm\mathbb{T}. \quad (\text{B.5})$$

Nyní odvodíme další užitečný vztah, který se týká hermitovského sdružení a časové in-

verze. Mějme

$$\begin{aligned} (\mathbb{T}^\dagger A \mathbb{T})^\dagger &= \left(\sum_{m,n} |\psi_m\rangle \langle \psi_m | \mathbb{T}^\dagger A \mathbb{T} | \psi_n\rangle \langle \psi_n | \right)^\dagger \\ &= \sum_{m,n} |\psi_n\rangle \langle \psi_m | \langle \psi_m | \mathbb{T}^\dagger A \mathbb{T} | \psi_n\rangle^* , \end{aligned}$$

s využitím vztahu (B.4) pak dostáváme

$$(\mathbb{T}^\dagger A \mathbb{T})^\dagger = \sum_{m,n} |\psi_n\rangle \langle \psi_m | \langle \mathbb{T} \psi_m | A \mathbb{T} | \psi_n\rangle .$$

Dále přejdeme od báze $|\psi_n\rangle$ k bázi $|\chi_n\rangle = |\mathbb{T} \psi_n\rangle$, což jde právě díky tomu, že \mathbb{T} je antiunitární, spolu s využitím definice (B.1) pak dostaneme

$$\begin{aligned} (\mathbb{T}^\dagger A \mathbb{T})^\dagger &= \sum_{m,n} |\mathbb{T}^\dagger \chi_n\rangle \langle \chi_n | A^\dagger | \chi_m\rangle \langle \mathbb{T}^\dagger \chi_m | \\ &= \sum_m \mathbb{T}^\dagger A^\dagger | \chi_m\rangle \langle \mathbb{T}^\dagger \chi_m | \end{aligned}$$

Poslední rovnici pak doplníme o jednotku na konci a použijeme (B.3)

$$\begin{aligned} (\mathbb{T}^\dagger A \mathbb{T})^\dagger &= \sum_{m,n} \mathbb{T}^\dagger A^\dagger | \chi_m\rangle \langle \mathbb{T}^\dagger \chi_m | \chi_n\rangle \langle \chi_n | \\ &= \sum_{m,n,a,b} \mathbb{T}^\dagger A^\dagger | \chi_m\rangle \langle \chi_a | \chi_n\rangle \langle \chi_b | \chi_m\rangle (T^\dagger)_{ab}^* \langle \chi_n | \\ &= \sum_{m,n} \mathbb{T}^\dagger A^\dagger | \chi_m\rangle (T^\dagger)_{nm}^* \langle \chi_n | \\ &= \sum_{m,n} \mathbb{T}^\dagger A^\dagger | \chi_m\rangle T_{mn} \langle \chi_n | \end{aligned}$$

Ve výsledku pak po použití definice (B.1) dostáváme

$$(\mathbb{T}^\dagger A \mathbb{T})^\dagger = \mathbb{T}^\dagger A^\dagger \mathbb{T}. \quad (\text{B.6})$$

Nakonec se budeme věnovat chování stopy s časovou inverzí, opět s využitím vztahu (B.4)

$$\begin{aligned} \text{Tr} [\mathbb{T}^\dagger A \mathbb{T}] &= \sum_n \langle \psi_n | \mathbb{T}^\dagger A \mathbb{T} | \psi_n\rangle \\ &= \sum_n \langle \psi_n | \mathbb{T}^\dagger A \mathbb{T} | \psi_n\rangle \\ &= \sum_n \langle A \mathbb{T} | \psi_n | \mathbb{T} | \psi_n\rangle \\ &= \sum_n \langle \mathbb{T} | \psi_n | A^\dagger | \mathbb{T} | \psi_n\rangle , \end{aligned}$$

což ve výsledku pak vede k

$$\text{Tr} [\mathbb{T}^\dagger A \mathbb{T}] = \text{Tr} [A^\dagger]. \quad (\text{B.7})$$

Dodatek C

Strukturní koeficienty

C.1 Seznam strukturních koeficientů

C.1.1 Spin $\frac{1}{2}$ tj. $N = 2$

Generátory grupy jsou Pauliho matice

$$F_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad F_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad F_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Symetrické strukturní koeficienty jsou pak nulové

$$d_{ijk} = 0.$$

A antisymetrické jsou rovny Levi-Civita symbolu tj.

$$\begin{aligned} f_{ijk} &= \epsilon_{ijk} \\ f_{123} = f_{312} = f_{231} &= 1 \\ f_{132} = f_{213} = f_{321} &= -1 \\ f_{jinak} &= 0 \end{aligned}$$

C.1.2 Spin 1 tj. $N = 3$

Generátory jsou Gel-Manovy matice

$$\begin{aligned} F_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & F_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & F_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ F_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & F_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & F_6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ F_7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & F_8 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Strukturní koeficienty jsou pak (neuvádíme symetrické partnery a nulové koeficienty)

$$\begin{aligned}
f_{123} &= 1, \\
f_{458} &= f_{678} = \frac{\sqrt{3}}{2}, \\
f_{147} &= f_{165} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = f_{376} = \frac{1}{2}, \\
d_{888} &= -\frac{\sqrt{3}}{3}, \\
d_{247} &= d_{366} = d_{377} = -\frac{1}{2}, \\
d_{118} &= d_{228} = d_{338} = \frac{\sqrt{3}}{3}, \\
d_{448} &= d_{558} = d_{668} = d_{778} = -\frac{\sqrt{3}}{6}, \\
d_{146} &= d_{157} = d_{256} = d_{344} = d_{355} = \frac{1}{2}.
\end{aligned}$$

C.2 Struktura matice M

Je zde rozvedena analýza struktury matice M z (5.1.14) studiem strukturních koeficientů (repektive jejich součinů). Matice M je definovaná jako

$$M_{nk} = \sum_{ijm} \gamma_{ij}^A (d_{ikm} f_{mjn} - d_{jkm} f_{min}).$$

Cílem je rozdělit matici na symetrickou a antisymetrickou část a pokusit se získat maximum informací o těchto částech.

Začneme symetrickou částí. Vyjdeme z toho, že součin koeficientů $d_{ijk} f_{klm}$ se dá zapsat jako

$$d_{ijk} f_{klm} = \frac{1}{2} d_{ijk} f_{kln} \text{Tr } F_n F_m = -\frac{i}{4} d_{ijk} \text{Tr } ([F_k, F_l] F_m) = \frac{1}{8i} \text{Tr } ([\{F_i, F_j\}, F_l] F_m),$$

dosadíme za součin strukturních koeficientů a počítáme (sumaci přes dvojici stejných indexů implicitně předpokládáme)

$$\begin{aligned}
d_{ikm} f_{mjn} - d_{jkm} f_{min} &= \frac{1}{8i} [\text{Tr } ([\{F_i, F_k\}, F_j] F_n) - \text{Tr } ([\{F_j, F_k\}, F_i] F_n)] \\
&= \frac{1}{8i} \text{Tr } (([\{F_i, F_k\}, F_j] - [\{F_j, F_k\}, F_i]) F_n) \\
&= \frac{1}{8i} \text{Tr } (([F_i F_k, F_j] + [F_k F_i, F_j] - [F_j F_k, F_i] - [F_k F_j, F_i]) F_n) \\
&= \frac{1}{4i} \text{Tr } ([F_i, F_j] \{F_k, F_n\}) + \frac{1}{8i} \text{Tr } (([\{F_k, F_j\}, F_i] - \{[F_k, F_i], F_j\}) F_n) \\
&= 2f_{ijm} d_{mkn} - d_{inm} f_{mjk} + d_{jnm} f_{mik}.
\end{aligned}$$

Dosazením do definice matice M pak máme

$$M_{nk} = 2 \sum_{ijm} \gamma_{ij}^A f_{ijm} d_{mnk} - M_{kn},$$

tj. symetrická část matice M je pak

$$\frac{M_{kn} + M_{nk}}{2} = \sum_{ijm} \gamma_{ij}^A f_{ijm} d_{mnk}.$$

Všimněme si podobnosti s vektorem \vec{v} a dostáváme pak symbolicky $M_{nk} = \sqrt{\frac{N(N-1)}{8}} v_m d_{mnk} + A_{nk}$, kde A_{nk} je antisymetrická matice, kterou specifikujeme vzápětí.

Prvním krokem k získání antisymetrické části je rozepsání strukturních koeficientů opět pod stopou do součtu čtveřic s tím, že již odečteme symetrickou část

$$\begin{aligned} d_{ikm} f_{mjn} - d_{jkm} f_{min} - f_{ijm} d_{mnk} &= \frac{1}{8i} \text{Tr} \left(([\{F_i, F_k\}, F_j] - [\{F_j, F_k\}, F_i] - \{[F_i, F_j], F_k\}) F_n \right) \\ &= \frac{1}{4i} \text{Tr} \left((F_i F_k F_j - F_j F_k F_i) F_n \right) \\ &= \frac{1}{4i} \text{Tr} \left(F_i F_k F_j F_n - F_i F_n F_j F_k \right). \end{aligned}$$

Všimněme si, že poslední vztah poukazuje na antisymetrii vůči záměně k a n , kdežto předposlední je ideální pro pozorování antisymetrie v i a j . Vyjdeme z posledního vztahu a jdeme upravovat dále

$$\begin{aligned} \frac{1}{4i} \text{Tr} \left(F_i F_k F_j F_n - F_i F_n F_j F_k \right) &= \frac{1}{4i} \text{Tr} \left([F_i, F_k] F_j F_n + [F_j, F_n] F_k F_i \right) \\ &= \frac{1}{8i} \text{Tr} \left([F_i, F_k] \{F_j, F_n\} + [F_j, F_n] \{F_k, F_i\} \right) \\ &= f_{ikm} d_{mjn} + f_{jnm} d_{mik}. \end{aligned}$$

Srovnáním počátečního a koncového tvaru pak dostáváme

$$f_{ikm} d_{mjn} = -d_{jkm} f_{min} - f_{ijm} d_{mnk}. \quad (\text{C.1})$$

Výsledek dosadíme do definice matice M a ještě jednou na závěr upravíme.

$$M_{nk} = \sqrt{\frac{N(N-1)}{8}} \sum_m v_m d_{mnk} + \sum_{ijm} \gamma_{ij}^A (f_{ikm} d_{mjn} - f_{inm} d_{mjk}) \quad (\text{C.2})$$

Tento tvar matice implikuje vazbu

$$\forall k : \sum_{ij} M_{ij} f_{ijk} = 0. \quad (\text{C.3})$$

Pro první člen je vazba splněna automaticky, pro druhý využijeme výsledků [MNG83]. Platí totiž

$$\sum_{kmn} (f_{ikm} d_{mjn} - f_{inm} d_{mjk}) f_{nkp} \sim d_{ijp}$$

a vzhledem k tomu, že daný výraz je úžen přes výraz antisymetrický v i a j , pak výsledek musí nutně být 0.

Literatura

- [Aga73] G. S. Agarwal, *Open quantum markovian systems and the microreversibility*, Z. Physik **258** (1973), 409 – 422.
- [AN04] A. E. Allahverdyan and Th. M. Niuwenhuizen, *The second law and fluctuations of work: The case again quantum fluctuation theorems.*, arXiv:cond-mat/0408697v1 [cond-mat.stat-mech] (2004), 1 – 27.
- [BP02] Heinz-Peter Breuer and Francesco Petruccione, *The theory of open quantum systems*, Oxford University Press, 2002.
- [CRJ⁺04] I. Callens, W. De Roeck, T. Jacobs, C. Maes, and K. Netočný, *Quantum entropy production as a measure of irreversibility*, Physica D **187** (2004), 383 – 391.
- [Cro98] Gavin E. Crooks, *Nonequilibrium measurements of free energy differences for microscopically reversible systems*, Journal of Statistical Physics **90** (1998), no. 5/6, 1481 – 1487.
- [Cro00] Gavin E. Crooks, *Path-ensemble averages in systems driven far from equilibrium*, Physical Review E **61** (2000), no. 3, 2361 – 2366.
- [FNB⁺08] C. Flindt, T. Novotný, A. Braggio, M. Sasseti, and A. Jauho, *Counting statistics of non-markovian quantum stochastic processes*, Physical Review Letters **100** (2008), 150601.
- [For04] Jiří Formánek, *Úvod do kvantové teorie*, 2. ed., vol. II., Academia, 2004.
- [KFGV77] Andrzej Kossakowski, Alberto Frigerio, Vittorio Gorini, and Maurizio Verri, *Quantum detailed balance and KMS condition*, Comm. Math. Phys. **57** (1977), 97 – 110.
- [Kur00] Jorge Kurchan, *A quantum fluctuation theorem*, arXiv:cond-mat/0007360v2 [cond-mat.stat-mech] (2000), 1 – 8.
- [Mae03] Christian Maes, *On the origin and use of fluctuation relations for entropy*, Séminaire Poincaré **2** (2003), 29 – 62.
- [MN03] Christian Maes and Karel Netočný, *Time-reversal and entropy*, Journal of Statistical Physics **110** (2003), no. 1/2, 269 – 309.
- [MNG83] M. L. Metha, J. M. Normand, and V. Gupta, *A property of the structure constants of finite dimensional compact lie algebras*, Comm. Math. Phys. **90** (1983), 69 – 78.

- [RM04] Wojciek De Roeck and Christian Maes, *A quantum version of free energy — irreversible work relations*, Physical Review E **69** (2004), 1 – 12, ID: 026115, Předěšlá verze na arXiv:cond-mat/0309498v1.
- [Roe06] Wojciek De Roeck, *Rigorous fluctuation theory for quantum nonequilibrium systems*, Ph.D. thesis, Katholieke Universiteit Leuven, 2006.