

Dissipation
bei nicht-markowschen Korrelationen

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereich Physik
der Universität Hamburg

vorgelegt von
Dirk Reiß
aus Hamburg

Hamburg
2000

Gutachter der Dissertation: Prof. Dr. A. Lindner
Prof. Dr. H. Heyszenau

Gutachter der Disputation: Prof. Dr. A. Lindner
Prof. Dr. J. Appel

Datum der Disputation: 7. Juli 2000

Dekan des Fachbereichs Physik und
Vorsitzender des Promotionsausschusses: Prof. Dr. F.-W. Büßer

Überblick

Quantensysteme mit Kopplung an eine makroskopische Umgebung zeigen Dissipation in Form von Dämpfung und Dekohärenz. Dies lässt sich nicht mit der Schrödingerschen Quantenmechanik erfassen. Daher sind erweiterte Ansätze zur quantitativen Beschreibung solcher Effekte nötig.

In dieser Arbeit werden offene Quantensysteme mit Hilfe einer reduzierten Dynamik beschrieben, deren Erzeugende linear und zeitunabhängig ist. Damit wird der dissipative Einfluss der Umgebung pauschal parametrisiert. Dies führt zur Mastergleichung, die die dissipative Zeitentwicklung des System-Dichteoperators bestimmt.

Bei der Herleitung der Mastergleichung geht man von einer schwachen Ankopplung des Systems an eine Umgebung im thermischen Gleichgewicht aus. Verteilen sich dabei die durch das System hervorgerufenen Veränderungen sehr schnell auf das gesamte Wärmebad, so kommt es zu keiner merklichen Rückwirkung auf das System. Diese Markow-Annahme wird falsch, wenn die Abklingzeit der Korrelationen zwischen System und Umgebung in die Größenordnung der charakteristischen System-Zeitskalen kommt.

Die Mastergleichung wird hier derart verallgemeinert, dass sie solche Gedächtniseffekte berücksichtigt. Wie gezeigt wird, reicht hierzu die sonst übliche Born-Näherung (2. Ordnung in der System-Bad-Kopplung) nicht aus – diese Effekte treten erst in höherer Ordnung auf. Die Erhaltung der Positivität des System-Dichteoperators während der durch die verallgemeinerte Mastergleichung bestimmten Dynamik wird diskutiert.

Das Zusammenwirken und die Unterschiede der gemachten Näherungen (Markow-Näherung, Born-Näherung) werden anhand eines speziellen Modells untersucht, das auf eine analytisch lösbare Quanten-Langevin-Gleichung führt. Für dieses Modell werden auch Beobachtungsgrößen sowohl exakt als auch mit der gewöhnlichen Mastergleichung berechnet und so die von nicht-markowschen Korrelationen herrührenden Abweichungen analysiert.

Abstract

Quantum systems coupled to a macroscopic environment exhibit dissipation in form of damping and decoherence. This cannot be described by a Schrödinger-type quantum mechanics. Therefore extended concepts for a quantitative description of these phenomena are needed.

In this thesis open quantum systems are described by means of a reduced dynamic with a linear and time-independent generator. By doing so the dissipative influence of the environment is characterized by general parameters. This leads to the master equation describing the dissipative time evolution of the systems density operator.

The derivation of the master equation is based on a weak coupling between the system and an environment being in thermal equilibrium. If the modifications exerted by the system spread out rapidly over the whole heat bath, there will be no noticeable reaction upon the system. This Markov assumption is wrong if the decay time of the correlations between system and environment is of the order of characteristic system time scales.

Here the master equation is generalized to allow for such memory effects. It is shown that to that end the usual Born approximation (i. e. 2nd order in the coupling between system and bath) is not sufficient: These effects are only found in higher orders. Conservation of the positivity of the systems density operator under the time evolution given by the generalized master equation is discussed.

The interplay and the differences of the applied approximations (Born approximation, Markov approximation) is studied on the basis of a special model, which leads to an analytically solvable quantum Langevin equation. Within this model some observables are calculated both exactly and using the common master equation in order to analyze differences arising from non-markovian correlations.

Inhaltsverzeichnis

Symbole	7
1 Einführung	9
2 Formale Grundlagen	13
2.1 Quantentheorie im Liouville-Raum	13
2.2 Lindblad-Theorie	15
2.2.1 Lindblad-Bedingungen	17
2.2.2 Lindblad-Form	18
3 Die Mastergleichung	19
3.1 Zwanzig-Formalismus	19
3.2 Gekoppelte Systeme	20
3.2.1 Linearität der Dynamik	22
3.2.2 Halbgruppe der Dynamik	24
3.2.3 Anwendung der Zwanzig-Gleichung	25
3.3 Markow-Näherung	27
3.3.1 Einschalteffekt	28
3.3.2 Zwei-Zeiten-Erwartungswerte	30
3.4 Darstellung der Mastergleichung	32
3.4.1 Lindblad-Bedingungen	34
3.4.2 Säkularnäherung	35
3.5 Erweiterung der Markow-Näherung	37
3.5.1 Säkular- und erweiterte Markow-Näherung	38
3.5.2 Born- und erweiterte Markow-Näherung	40
4 Caldeira-Leggett-Modell	43
4.1 Quanten-Langevin-Gleichung	43
4.1.1 Bewegungsgleichungen	44
4.2 Quantenfluktuationen der Umgebung	48
4.3 Fluktuations-Dissipations-Theorem	51
4.4 System: Harmonischer Oszillator	52
4.4.1 Renormierung der Masse	54

4.4.2	Beobachtungsgrößen	54
4.4.3	Modellierung der Umgebung	59
4.5	Umgebung: Mikroskopisches Modell	66
4.5.1	Eindimensionales Strahlungsfeld	67
4.5.2	Dreidimensionales Strahlungsfeld	68
4.6	Born- und Markow-Näherung	70
5	Mastergleichung vs. exakte Beschreibung	75
5.1	Mastergleichung für den Oszillator	75
5.2	Beobachtungsgrößen	80
6	Zusammenfassung	85
A	Reihenentwicklung mit Kubo-Identität	89
	Literatur	91

Symbolverzeichnis

In der folgenden Tabelle sind häufig verwendete Formelzeichen und ihre Bedeutung zusammen mit der ersten (oder wichtigsten) Gleichung, in denen sie vorkommen, aufgelistet:

<i>Symbol</i>	<i>Name</i>	<i>Gleichung</i>
$\vec{A}(\vec{r})$	Vektorpotential	4.147
$A(t)$	Antisymmetrischer Anteil von $-iC_{xx}(t)$	4.80
B_k	Badanteil der Wechselwirkung	3.71
$C_{xx}(t)$	Autokorrelationsfunktion des Ortes	4.74
$C_{xx}(\omega)$	Spektrum	4.75
d_j	Kopplungskonstante	4.3
D	Federkonstante des harmonischen Oszillators	4.52
\mathcal{E}	Erweiterung auf die Gesamtdichte	3.10
$f(\omega)$	Formfaktor	4.148
F	Freie Energie	4.95
$F(t)$	Restkraft	4.22
$g_{kk'}(t)$	Korrelationsfunktion der Umgebung	3.74
$G_{kk'}(\omega)$	Spektralfunktion der Umgebung	3.76
$J(\omega)$	Spektraldichte	4.17
$L(t)$	Autokorrelationsfunktion der Restkraft	4.44
\mathcal{L}	Liouville-Operator	2.5
\mathcal{L}_d	Lindblad-Operator	2.18
\mathcal{L}_{NM}	nicht-markowsche Korrektur zu \mathcal{L}_d	2.18
m	„nackte“ Masse	4.67
M	„beobachtete“ Masse	4.67
\mathcal{P}	Projektor auf die relevante Dichte	3.2,3.27
\mathcal{Q}	Projektor auf die irrelevante Dichte	3.2
\mathcal{R}	Reduktion auf die Systemdichte	3.9
S	reduzierte Entropie	4.98
$S(t)$	Symmetrischer Anteil von $C_{xx}(t)$	4.80
S_k	Systemanteil der Wechselwirkung	3.71
\mathcal{U}_t	unitäre Dynamik	2.12
$V_e(x)$	effektives Potential	4.21

Z	reduzierte Zustandssumme	4.94
γ_0	mittlere Dämpfungskonstante	4.96
$\gamma(t)$	Gedächtniskern	4.16
$\gamma(\omega)$	frequenzabhängige Dämpfung	4.61
$\gamma_r(\omega)$	renormierte frequenzabhängige Dämpfung	4.65
$\gamma'(\omega), \gamma''(\omega)$	Real-, Imaginärteil von $\gamma(\omega)$	4.46
Γ	Dämpfungskonstante	4.103,4.119
Γ_k	Rate des k -ten Übergangs	3.91
δm	Massenrenormierung	4.66
Δ_k	Frequenzverschiebung des k -ten Übergangs	3.91
η_j	Lamb-Dicke-Parameter	4.150
κ	Kopplungsstärke	3.71
Λ	parametrisiert den „dritten Pol“ von $\chi(\omega)$	4.119
ν_n	Matsubara-Frequenz	4.83
Φ_t	dissipative Dynamik	2.14
$\chi(t)$	lineare Antwortfunktion	4.57
$\chi(\omega)$	dynamische Suszeptibilität	4.61
$\chi'(\omega), \chi''(\omega)$	Real-, Imaginärteil von $\chi(\omega)$	
ω_0	freie Kreisfrequenz des harmonischen Oszillators	4.53
Ω	Resonanzfrequenz	4.103,4.119

Kapitel 1

Einführung

Die Beschreibung der Natur mit möglichst wenigen, grundlegenden Gesetzmäßigkeiten ist ein wesentliches Ziel der Physik. Unser heutiges Weltbild fußt auf der Vorstellung einiger weniger Grundbausteine der Materie – den Elementarteilchen – und der zwischen ihnen wirkenden Kräfte – den fundamentalen Wechselwirkungen. Mit dieser Theorie können im Prinzip alle bekannten Vorgänge in der Natur¹ abgeleitet werden. Im Prinzip. So erfolgreich die Theorie bei der Anwendung auf mikroskopische Systeme auch ist, so reicht sie doch zur Erklärung vieler Phänomene, die in komplexen, makroskopischen Systemen beobachtet werden, nicht aus. Erfahrungsgemäß können nämlich makroskopische Systeme durch wenige, kollektive Eigenschaften charakterisiert werden. Die im Vergleich zur zugrunde liegenden mikroskopischen Dynamik sehr einfachen Zusammenhänge zwischen diesen Größen lassen sich gut phänomenologisch beschreiben. Eine wesentliche Eigenschaft makroskopischer Dynamik ist ihre *Irreversibilität* – die ablaufenden Prozesse sind nicht zeitumkehrinvariant. Es kommt zu Dissipation²: Energie irgendeiner Form geht in Wärmeenergie über [1] (Energiedissipation) und die Unordnung im System erhöht sich, wodurch die makroskopische Beschreibung weniger Information enthält (Informationsdissipation³). Die hamiltonsche mikroskopische Beschreibung hingegen erlaubt zu jedem Prozess – und sei er noch so kompliziert – prinzipiell auch den zeitlich umgekehrt verlaufenden. Warum makroskopisch eine Zeitrichtung ausgezeichnet ist, kann mit der mikroskopischen Theorie allein nicht erklärt werden. Eine irreversible Theorie kann nicht aus einer reversiblen abgeleitet werden. Bestenfalls ist eine konsistente Einbettung möglich.

Die Theorie der statistischen Mechanik verknüpft mikro- und makroskopische Betrachtung widerspruchsfrei miteinander, führt dabei allerdings zusätzliche Annahmen ein. Hierbei sind zwei Punkte hervorzuheben: Zum einen müssen die

¹abgesehen von Gravitationsphänomenen: Die Vereinheitlichung von allgemeiner Relativitätstheorie und der Theorie der Elementarteilchen steht noch aus.

²(*lat.*) dissipatio: Zerstreuung, Zerstörung, Vergeudung

³in der Informationstheorie wird mit Dissipation der Informationsschwund eines Systems aufgrund von Störungen beschrieben [1]

relevanten makroskopischen Beobachtungsgrößen ausgewählt und mikroskopisch repräsentiert werden. Die ausgewählten Größen müssen dabei die makroskopischen Eigenschaften des Systems vollständig wiedergeben. Zum anderen wird eine Annahme über die physikalisch möglichen, das heißt experimentell realisierbaren, mikroskopischen Anfangsbedingungen gemacht. Hier hat sich das Jaynessche Prinzip maximaler Entropie bewährt [2, 3]: Eine „vernünftige“ mikroskopische Anfangsverteilung, also eine, die den makroskopischen Beobachtungen entspricht, maximiert die Phasenraum-Entropie unter der Randbedingung aller Beobachtungsgrößen. Ein Zustand, der sich nach der mikroskopischen Dynamik aus einem solchen Anfangszustand heraus entwickelt hat, erfüllt diese Bedingung gewöhnlich nicht mehr. Damit ist *postuliert*, warum er – nach einer mikroskopischen Bewegungsumkehr – als Anfangszustand des zeitumgekehrten Prozesses unphysikalisch ist.

Die Auswahl einer auf die relevanten Observablen *reduzierten* – und dabei in sich abgeschlossenen – Beschreibung sowie der damit verknüpften physikalischen Anfangsbedingungen ist die vorrangige Aufgabe einer Verknüpfung von mikro- und makroskopischer Theorie.

Die Bedeutung dieser Problematik wird klar, wenn man den *inhärent makroskopischen Charakter eines jeden physikalischen Experiments* bedenkt. Die mikroskopische Theorie geht immer von der Idealisierung eines wohldefinierten, von seiner Umgebung isolierten Systems aus. Tatsächlich jedoch ist das System zumindest bei Präparation und Messung – und meistens auch dazwischen – als Teil einer makroskopischen Apparatur anzusehen. Durch den Einfluss der Umgebung kommt es daher auch immer zu Dissipation; das System verliert Energie (z. B. durch Spontanemission) und die Unordnung erhöht sich – die Reinheit des Zustandes nimmt ab (Dekohärenz). In einem Experiment an einem „idealen“ mikroskopischen System müssen diese Effekte so weit wie möglich unterdrückt werden, da sie sonst die „eigentliche“ Dynamik verschleiern. Vielfach ist der dissipative Einfluss der Umgebung jedoch wesentlicher Bestandteil des Experiments.

So bereitete gerade der Einfluss einer Messung in den Anfängen der Quantenmechanik große Schwierigkeiten. Johann von Neumann, der die Notwendigkeit einer gemeinsamen Beschreibung von System und Messapparatur wohl erkannte [4], postulierte den effektiven Einfluss der Messung als Projektion. Hierbei blieb die Grenze zwischen Objekt und Messapparatur allerdings im Dunkeln, was unter anderem Schrödinger zu seinem berühmten Gedankenexperiment [5] mit einem Superpositionszustand einer lebenden und einer toten Katze veranlasste, das lange Zeit als Paradebeispiel eines paradoxen Resultats der Quantenmechanik galt. Inzwischen kann der Einfluss einer makroskopischen Messapparatur auf ein quantenmechanisches System, der zu einem schnellen Verlust der Interferenzfähigkeit führt (Dekohärenz), sogar zeitaufgelöst gemessen werden [6]. Die Einbettung der teilweise intuitiv paradox anmutenden Quantenmechanik in die alltägliche Erfahrungswelt ist gerade in letzter Zeit wieder viel diskutiert worden [7].

Eine realistische Betrachtung *offener mikroskopischer Systeme* soll also auch

Irreversibilität auf dieser Ebene beschreiben und damit die bekannte mikroskopische Theorie des idealen, abgeschlossenen Systems um den Einfluss der makroskopischen Umgebung erweitern. Auch hier handelt es sich wieder um eine reduzierte Beschreibung des Gesamtsystems, allerdings müssen in diesem Fall die mikroskopischen System-Freiheitsgrade zu den relevanten Parametern gezählt werden.

Die reduzierte Dynamik kann auf verschiedene Arten dargestellt werden. Ausgehend von den Heisenberg-Bewegungsgleichungen für Operatoren kann die klassische Langevin-Gleichung quantenmechanisch verallgemeinert werden. In diesem Fall wird der Einfluss der Umgebung als stochastische Kraft auf das System modelliert. Der stochastische Charakter dieser Kraft folgt aus der makroskopischen Präparation des Gesamtsystems. Es kommt nun auf den Mittelwert dieser Kraft und auf deren zeitliche Korrelation an. Sind die Kräfte zu zwei verschiedenen Zeiten statistisch unabhängig voneinander, so spricht man von einem Markow-Prozess [8]. Jede physikalische Wechselwirkung zwischen System und Umgebung dauert hingegen eine endliche Zeit, was nicht-markowschen Korrelationen entspricht. Diese können in der Beschreibung mit der Quanten-Langevin-Gleichung berücksichtigt werden, die in ihrem Nutzen allerdings auf Systeme beschränkt ist, die auf lösbare (insbesondere lineare) Bewegungsgleichungen führen.

Bei einer anderen Methode geht man von der von-Neumann-Gleichung für den Dichteoperator des Systems aus, fügt aber weitere Terme hinzu, die den Einfluss der Umgebung widerspiegeln. Das Resultat wird Mastergleichung genannt; diese ist weiterhin eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung, beschreibt aber die nicht-unitäre Dynamik des Systemzustandes. Im Allgemeinen koppelt das System auf der Zeitskala der nicht-markowschen Korrelationen über die Rückantwort der Umgebung auch an seine eigene Vorgeschichte. Diese Gedächtniseffekte können einen merklichen Einfluss auf die Systemdynamik haben, werden aber in der zeitlich lokalen Mastergleichung nicht berücksichtigt.

Diese Arbeit befasst sich mit dem Einfluss nicht-markowscher Korrelationen auf die dissipative Dynamik offener Quantensysteme. Da die Mastergleichung im Allgemeinen besser lösbar ist als die Quanten-Langevin-Gleichung, soll untersucht werden, ob mit einer erweiterten Form auch diese Effekte berücksichtigt werden können. Eine solche erweiterte Mastergleichung muss dabei allgemeinen Anforderungen an eine physikalisch sinnvolle reduzierte Beschreibung genügen.

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: Im nächsten (zweiten) Kapitel werden einige im späteren Verlauf verwendete formale Grundlagen formuliert. Als mathematisches Hilfsmittel wird der Superoperatorformalismus im Rahmen der Quantentheorie im Liouville-Raum dargestellt. Die von Lindblad untersuchten formalen Anforderungen an eine nicht-unitäre Dynamik [9] bilden ein wesentliches Bewertungskriterium für mögliche reduzierte Beschreibungen und werden daher in diesem Kapitel vorgestellt.

Im dritten Kapitel wird die Mastergleichung zunächst in Markow-Näherung hergeleitet. Eine verbesserte Markow-Näherung führt auf eine erweiterte Form der Mastergleichung. Die Konsistenz dieser Gleichungen im Hinblick auf die ge-

machten Näherungen sowie auf die Lindblad-Bedingungen wird untersucht.

Im vierten Kapitel wird ein System vorgestellt, für das die Quanten-Langevin-Gleichung lösbar ist: Das Caldeira-Leggett-Modell beschreibt einen harmonischen Oszillator, der linear an ein Bad aus harmonischen Oszillatoren gekoppelt ist. Im Rahmen dieses Modells werden Beobachtungsgrößen exakt berechnet.

Im fünften Kapitel wird die Mastergleichung für das im Caldeira-Leggett-Modell untersuchte System aufgestellt und so die Beobachtungsgrößen berechnet. Auf diese Weise werden die Unterschiede zwischen exakter und genäherter Lösung untersucht.

Die Ergebnisse dieser Arbeit werden im sechsten Kapitel zusammengefasst.

Kapitel 2

Formale Grundlagen

2.1 Quantentheorie im Liouville-Raum

In der Quantenstatistik spielt das Konzept des Zustandsvektors kaum mehr eine Rolle – die Beschreibung stützt sich auf Operatoren: Im Schrödingerbild wird der Zustand durch den Dichteoperator dargestellt, während im Heisenbergbild die Dynamik durch auf den Zustandsraum wirkende Operatoren beschrieben wird. Eine kompakte Formulierung der Theorie ergibt sich im Raum der Operatoren, dem Liouville-Raum \mathcal{L} (für eine ausführliche Darstellung siehe z.B. [10]).

Die linearen Operatoren auf dem Hilbertraum \mathcal{H} der Zustände bilden selbst wieder einen komplexen Vektorraum, zusammen mit dem Skalarprodukt

$$(A|B) = \text{Sp}(A^\dagger B) \quad (2.1)$$

sogar einen Hilbertraum, den Liouville-Raum \mathcal{L} . Hier wird die an die Dirac-Notation angelehnte Schreibweise mit Superbra $(A|$ und Superket $|B)$ verwendet, die in der herkömmlichen Operatorschreibweise als

$$(A| \equiv \text{Sp}(A^\dagger \cdot) \quad \text{und} \quad |B) \equiv B \quad (2.2)$$

interpretiert werden.

Operatoren auf dem Liouville-Raum werden Superoperatoren genannt. Sie beschreiben Abbildungen zwischen Elementen des Liouville-Raums \mathcal{L}

$$\mathcal{S} : \mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L} \quad , \quad A \mapsto \mathcal{S}A \quad (2.3)$$

Über das Skalarprodukt lassen sich zueinander adjungierte Superoperatoren \mathcal{S} und \mathcal{S}^* definieren

$$(A|\mathcal{S}B) = (\mathcal{S}^*A|B) \quad . \quad (2.4)$$

Hier wird das Symbol \star verwendet, um die Adjunktion von Superoperatoren von der herkömmlicher Operatoren zu unterscheiden. Der wichtigste Superoperator

ist der sogenannte Liouville-Operator \mathcal{L} . Er beschreibt die Abbildung von A auf den Kommutator mit dem Hamiltonoperator H

$$\mathcal{L} : \mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L} \quad , \quad A \mapsto \mathcal{L}A = \frac{1}{\hbar}[H, A] \quad . \quad (2.5)$$

Aus dieser Definition folgt sofort die Eigenschaft

$$(\mathcal{L}A)^\dagger = -\mathcal{L}A^\dagger \quad . \quad (2.6)$$

Ist die Diagonaldarstellung des Hamiltonoperators bekannt, so ergibt sich sofort die des Liouville-Operators

$$H = \sum_n E_n |n\rangle\langle n| \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L} = \sum_{n,m} \omega_{nm} |D_{nm}\rangle\langle D_{nm}| \quad . \quad (2.7)$$

Die Eigenwerte von \mathcal{L} sind die Bohr-Frequenzen $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$, die zugehörigen Eigenelemente die Dyaden $D_{nm} = |n\rangle\langle m|$ der Energiezustände. Da die Bohr-Frequenzen reell sind, ist der Liouville-Operator selbstadjungiert. Er erzeugt im Schrödingerbild die Dynamik des Zustandes (von-Neumann-Gleichung)

$$\dot{\varrho}(t) = \frac{1}{i\hbar}[H, \varrho(t)] = -i\mathcal{L}\varrho(t) \quad \Rightarrow \quad \varrho(t) = e^{-i\mathcal{L}t}\varrho(0) \quad (2.8)$$

und im Heisenbergbild die der Operatoren (Heisenberg-Gleichung)

$$\dot{A}(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)] = i\mathcal{L}A(t) \quad \Rightarrow \quad A(t) = e^{i\mathcal{L}t}A(0) \quad . \quad (2.9)$$

Mit dem Superoperator-Formalismus zeigt sich sofort die Äquivalenz der beiden Darstellungen bezüglich der Erwartungswerte: Mit den Gleichungen (2.4) und (2.6) ergibt sich nämlich wegen $\mathcal{L}^* = \mathcal{L}$

$$\langle A \rangle(t) = \text{Sp}(A \underbrace{e^{-i\mathcal{L}t}\varrho}_{\varrho(t)}) = (A^\dagger | e^{-i\mathcal{L}t}\varrho) = (e^{i\mathcal{L}t}A^\dagger | \varrho) = ((e^{i\mathcal{L}t}A)^\dagger | \varrho) = \text{Sp}(\underbrace{(e^{i\mathcal{L}t}A)}_{A(t)} \varrho) \quad (2.10)$$

Beim Wechsel zwischen den Bildern werden auch Superoperatoren transformiert. So wird aus dem Superoperator \mathcal{S} im Schrödingerbild wegen

$$\begin{aligned} \text{Sp}((\mathcal{S}A)\varrho(t)) &= \text{Sp}((e^{i\mathcal{L}t}\mathcal{S}A)\varrho) = \text{Sp}((e^{i\mathcal{L}t}\mathcal{S}e^{-i\mathcal{L}t}e^{i\mathcal{L}t}A(0))\varrho) \\ &= \text{Sp}((\mathcal{S}(t)A(t))\varrho) \end{aligned} \quad (2.11)$$

beim Übergang in das Heisenbergbild $\mathcal{S}(t) = e^{i\mathcal{L}t}\mathcal{S}e^{-i\mathcal{L}t}$.

2.2 Lindblad-Theorie

Bei der bisherigen Beschreibung wurde von einer vollständig hamiltonschen Dynamik ausgegangen. Dabei wird die Zeitentwicklung eines abgeschlossenen physikalischen Systems wie beschrieben durch den Liouville-Operator bzw. durch die unitäre Transformation

$$\mathcal{U}_t : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D} \quad , \quad \varrho \mapsto \varrho(t) = \mathcal{U}_t \varrho = e^{-i\mathcal{L}t} \varrho = e^{-iHt/\hbar} \varrho e^{iHt/\hbar} \quad (2.12)$$

bestimmt, wobei $\mathcal{D} \subset \mathcal{L}$ die Menge aller Dichteoperatoren ist. Die Abbildung \mathcal{U}_t erhält also die Eigenschaften des Dichteoperators: Spurklasse und Normierung, Hermitizität sowie Positivität

$$\text{Sp}(\varrho) = 1 \quad , \quad \varrho^\dagger = \varrho \quad \text{und} \quad \varrho \geq 0 \quad . \quad (2.13)$$

Aus der Definition von \mathcal{U}_t (Gl. 2.12) lassen sich noch weitere Eigenschaften ablesen. So erhält z.B. \mathcal{U}_t auch die Reinheit des Zustandes: Dissipation kann also nicht mit rein hamiltonscher Dynamik beschrieben werden. Es stellt sich nun die Frage nach einer allgemeineren Beschreibung, welche einerseits die physikalisch sinnvollen Eigenschaften der Dynamik erhält und dabei andererseits Dissipation zulässt. In seiner Arbeit [9] hat Lindblad untersucht, welche Eigenschaften eine Abbildung

$$\Phi_t : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D} \quad , \quad \varrho \mapsto \varrho(t) = \Phi_t \varrho \quad (2.14)$$

haben sollte. Seine Ergebnisse sollen nun kurz wiedergegeben werden.

Neben der Erhaltung der Dichteoperator-Eigenschaften wird eine weitere Bedingung gestellt: Ausgehend von der Gruppeneigenschaft

$$\mathcal{U}_{t_1+t_2} = \mathcal{U}_{t_2} \mathcal{U}_{t_1} \quad , \quad \forall t_1, t_2 \in (-\infty, \infty) \quad (2.15)$$

der hamiltonschen Dynamik sollen die Φ_t eine Halbgruppe

$$\Phi_{t_1+t_2} = \Phi_{t_2} \Phi_{t_1} \quad , \quad t_1, t_2 \geq 0 \quad (2.16)$$

bilden. Diese Eigenschaft führt eine bevorzugte Zeitrichtung ein, bewahrt aber für positive Zeiten die Homogenität in der Zeit. Aus der Halbgruppeneigenschaft folgt die Existenz eines erzeugenden Superoperators \mathcal{L}_d , so dass

$$\Phi_t = e^{-i\mathcal{L}_d t} \quad (2.17)$$

gilt. Der Index d (dissipativ) soll diesen sogenannten Lindblad-Operator vom Liouville-Operator der hamiltonschen Dynamik unterscheiden. Mit ihm wird aus der von-Neumann-Gleichung (Gl. 2.8) die allgemeinere Lindblad-Gleichung

$$\dot{\varrho}(t) = -i\mathcal{L}_d \varrho(t) \quad , \quad (2.18)$$

wobei im Gegensatz zum Liouville-Operator der Lindblad-Operator nicht mehr selbstadjungiert sein muss (und bei Dissipation auch nicht ist). Soll eine solche verallgemeinerte Bewegungsgleichung für den Dichteoperator existieren, so muss die Dynamik die geforderte Halbgruppeneigenschaft besitzen.

Eine Dynamik Φ_t , die die Positivität des Dichteoperators erhält, wird positiv genannt. Sie muss also

$$\langle \psi | \varrho | \psi \rangle \geq 0 \quad \forall \psi \quad \Rightarrow \quad \langle \psi | \Phi_t \varrho | \psi \rangle \geq 0 \quad \forall \psi \quad (2.19)$$

erfüllen. Diese Anforderung ist zur mathematischen Klassifikation von Dynamiken nicht sehr geeignet, da sich aus ihr keine praktikablen Auswahlkriterien gewinnen lassen. Lindblad hat daher eine strengere Forderung gestellt: Die Dynamik soll *vollständig* positiv sein. Diese Eigenschaft lässt sich besser im Heisenbergbild, d.h. mit den adjungierten Superoperatoren

$$\mathcal{U}_t^* : \mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L} \quad , \quad A \mapsto A(t) = e^{i\mathcal{L}t} A = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} \quad (2.20)$$

und

$$\Phi_t^* : \mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L} \quad , \quad A \mapsto A(t) = e^{i\mathcal{L}_a^* t} A \quad (2.21)$$

definieren (siehe z.B. [11]). Die unitäre Dynamik erfüllt offensichtlich

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_t^* A B &= e^{iHt/\hbar} A B e^{-iHt/\hbar} = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} e^{iHt/\hbar} B e^{-iHt/\hbar} \\ &= (\mathcal{U}_t^* A)(\mathcal{U}_t^* B) \quad , \end{aligned} \quad (2.22)$$

woraus die sogenannte vollständige Positivität

$$\sum_{i,j} B_i^\dagger (\mathcal{U}_t^* A_i^\dagger A_j) B_j = \sum_i B_i^\dagger \mathcal{U}_t^* A_i^\dagger \sum_j (\mathcal{U}_t^* A_j) B_j \geq 0 \quad , \quad \forall A_i, B_i \in \mathcal{L} \quad (2.23)$$

folgt. Die unitäre Dynamik ist also vollständig positiv. Nun soll gezeigt werden, dass aus der vollständigen Positivität die Positivität folgt: Aus der vollständigen Positivität einer Dynamik Φ_t ergibt sich zunächst eine schwächere Form von Gleichung (2.22)

$$\sum_{i,j} B_i^\dagger (\Phi_t^* A_i^\dagger A_j) B_j \geq 0 \quad , \quad \forall A_i, B_i \in \mathcal{L} \quad \Rightarrow^1 \quad \Phi_t^* A^\dagger A \geq (\Phi_t^* A^\dagger)(\Phi_t^* A) \quad , \quad (2.24)$$

die sogenannte 2-Positivität. Nun wird ein Hilfssatz benötigt, der sich aus der Schwarzschen Ungleichung $(X|X)(Y|Y) \geq (Y|X)(X|Y)$ ergibt. Setzt man $X = \sqrt{\varrho}$ und $Y = A\sqrt{\varrho}$, so erhält man

$$\text{Sp}(\sqrt{\varrho}^\dagger \sqrt{\varrho}) \text{Sp}(\sqrt{\varrho}^\dagger A^\dagger A \sqrt{\varrho}) \geq \text{Sp}(\sqrt{\varrho}^\dagger A^\dagger \sqrt{\varrho}) \text{Sp}(\sqrt{\varrho}^\dagger A \sqrt{\varrho}) \quad , \quad (2.25)$$

¹folgt für $i, j = 1, 2$ und $A_1 = A$, $B_1 = 1$, $A_2 = 1$, $B_2 = -\Phi_t^* A$.

bzw. durch zyklisches Vertauschen unter der Spur

$$(A^\dagger A|\varrho) \geq (A^\dagger|\varrho)(A|\varrho) \quad . \quad (2.26)$$

Damit wird mit der 2-Positivität

$$\begin{aligned} (A^\dagger A|\Phi_t\varrho) &= (\Phi_t^* A^\dagger A|\varrho) \geq ((\Phi_t^* A^\dagger)(\Phi_t^* A)|\varrho) \geq (\Phi_t^* A^\dagger|\varrho)(\Phi_t^* A|\varrho) \\ &\geq (A^\dagger|\Phi_t\varrho)(A|\Phi_t\varrho) \quad . \end{aligned} \quad (2.27)$$

Wählt man nun für A einen beliebigen Projektionsoperator $|\psi\rangle\langle\psi|$, so folgt

$$\langle\psi|\Phi_t\varrho|\psi\rangle \geq \langle\psi|\Phi_t\varrho|\psi\rangle^2 \quad \Rightarrow \quad \langle\psi|\Phi_t\varrho|\psi\rangle > 0 \quad , \quad (2.28)$$

also die Positivität des Dichteoperators zu allen Zeiten. Damit wurde die Hierarchie

$$\text{vollständige Positivität} \quad \Rightarrow \quad \text{2-Positivität} \quad \Rightarrow \quad \text{Positivität} \quad (2.29)$$

bewiesen. Die vollständige Positivität gewährleistet also die positive Zeitentwicklung des Dichteoperators. Sie ist als strengere Forderung allerdings nicht zwingend notwendig. Bisher wurde sie lediglich wegen ihrer bequemeren mathematischen Eigenschaften eingeführt. In der weiteren Betrachtung wird sogar nur noch die 2-Positivität verwendet (s. 2.2.1) werden. Lindblad hält allerdings eine vollständig positive Dynamik für physikalisch sinnvoll. Er argumentiert dabei wie folgt: Wenn das dissipative System trivial (ohne eine Wechselwirkung) um ein stationäres größeres System E erweitert wird, dann muss die Zeitentwicklung im Gesamtilbertraum $\mathcal{H}_{\text{ges}} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ durch die Dynamik $\Phi_{\text{ges},t}^*(A_S \otimes B_E) = (\Phi_{S,t}^* A_S) \otimes B_E$ gegeben sein. Er zeigt, dass dann die Positivität der Zustände des Gesamtsystems nur gewährleistet ist, wenn die Systemdynamik $\Phi_{S,t}$ vollständig positiv ist. Diese Argumentation ist jedoch umstritten [12], da die triviale Erweiterung keine Einschränkung der möglichen Dynamik zur Folge haben sollte. Ohne abschließende Beurteilung dieser Frage wird im Folgenden die vollständige Positivität zumindest als vereinfachende Annahme vorausgesetzt.

2.2.1 Lindblad-Bedingungen

Aus den genannten Eigenschaften des Dichteoperators (Gl. 2.13) ergeben sich drei Forderungen an den Lindblad-Operator, die nun im Schrödinger- ($-i\mathcal{L}_d$) und Heisenbergbild ($i\mathcal{L}_d^*$) diskutiert werden sollen. Ausgangspunkt ist hierbei die Lindblad-Gleichung (Gl. 2.18).

Normerhaltung

Die Norm des Dichteoperators soll erhalten sein: $\text{Sp}(\dot{\varrho}) = 0$, bzw.

$$\text{Sp}(-i\mathcal{L}_d\varrho) = 0 \quad , \quad (2.30)$$

woraus sich für den adjungierten Lindblad-Operator wegen

$$\text{Sp}(-i\mathcal{L}_d\varrho) = \text{Sp}(1(-i\mathcal{L}_d)\varrho) = (1|-i\mathcal{L}_d\varrho) = (i\mathcal{L}_d^*1|\varrho) \quad (2.31)$$

die erste Bedingung

$$i\mathcal{L}_d^*1 = 0 \quad (2.32)$$

ergibt.

Erhaltung von Hermitizität

Aus $\varrho = \varrho^\dagger$ folgt auch $\dot{\varrho} = \dot{\varrho}^\dagger$ und damit

$$-i\mathcal{L}_d\varrho = (-i\mathcal{L}_d\varrho)^\dagger \quad (2.33)$$

Weiterhin hat das Super-Skalarprodukt die Eigenschaft $(A|B)^* = (A^\dagger|B^\dagger)$, woraus

$$((i\mathcal{L}_d^*A)^\dagger|\varrho) = (i\mathcal{L}_d^*A|\varrho)^* = (A|-i\mathcal{L}_d\varrho)^* = (A|(-i\mathcal{L}_d\varrho)^\dagger)^* = (A^\dagger|-i\mathcal{L}_d\varrho) = (i\mathcal{L}_d^*A^\dagger|\varrho) \quad (2.34)$$

und damit

$$(i\mathcal{L}_d^*A)^\dagger = i\mathcal{L}_d^*A^\dagger \quad (2.35)$$

als zweite Bedingung folgt.

Positivität

Wie bereits erwähnt, fordert Lindblad nicht nur die Positivität, sondern sogar die vollständige Positivität der Dynamik. Aus ihr folgt die 2-Positivität (Gl. 2.24), deren Ableitung nach der Zeit

$$i\mathcal{L}_d^*A^\dagger A - (i\mathcal{L}_d^*A^\dagger)A - A^\dagger i\mathcal{L}_d^*A \geq 0 \quad (2.36)$$

sich als dritte Bedingung ergibt.

2.2.2 Lindblad-Form

Aus den diskutierten Bedingungen hat Lindblad die allgemeine strukturelle Form von \mathcal{L}_d hergeleitet:

$$-i\mathcal{L}_d\varrho(t) = \frac{1}{i\hbar}[H, \varrho(t)] - \frac{1}{2\hbar} \sum_j V_j^\dagger V_j \varrho(t) + \varrho(t) V_j^\dagger V_j - 2V_j \varrho(t) V_j^\dagger \quad (2.37)$$

bzw.

$$i\mathcal{L}_d^*A(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)] - \frac{1}{2\hbar} \sum_j V_j^\dagger V_j A(t) + A(t) V_j^\dagger V_j - 2V_j^\dagger A(t) V_j \quad (2.38)$$

mit $H, V_j, \sum V_j^\dagger V_j \in \mathcal{L}$ und $H = H^\dagger$. Diese Form eines Superoperators wird Lindblad-Form genannt.

Kapitel 3

Die Mastergleichung

Die hamiltonsche Beschreibung eines Systems führt zu einer zeitumkehrinvarianten Dynamik. Phänomene, die eine Zeitrichtung auszeichnen, also alle Dissipationseffekte, können so nicht beschrieben werden. In der Zeitentwicklung kann eine Dämpfung phänomenologisch angesetzt werden. Solche Ansätze sind nützlich, solange sie auf physikalisch sinnvolle und experimentell nachprüfbar Ergebnisse führen; sie gelten aber sicher nicht im Allgemeinen. Mehr Erkenntnis lässt sich aus Beschreibungen gewinnen, in denen sich die Dissipation aus einer allgemeineren Betrachtung ergibt.

Dissipation tritt immer dort auf, wo die Beschreibung des Systems nicht vollständig ist, da sie sich nur auf wenige Eigenschaften eines komplexen Ganzen konzentriert. Hierbei kann es sich – wie z. B. in der Thermodynamik – um einen Satz kollektiver Parameter eines makroskopischen Systems handeln oder um die Freiheitsgrade eines mikroskopischen Systems, das jedoch noch an weitere Freiheitsgrade (Umgebung) gekoppelt ist.

Ziel ist nun die Herleitung einer Bewegungsgleichung für die betrachteten Größen aus einer adäquaten Beschreibung des Gesamtsystems. Der Dichteoperator wird hierzu im Hinblick auf die Beobachtungsgrößen in einen relevanten und einen irrelevanten Anteil zerlegt:

$$\varrho(t) = \varrho_{\text{rel}}(t) + \varrho_{\text{irr}}(t) \quad . \quad (3.1)$$

Die Dynamik des auf den relevanten Anteil reduzierten Systems zeigt Dissipation. Die Herleitung dieser reduzierten Dynamik erfolgt mit Hilfe des von Zwanzig [13] vorgestellten Formalismus.

3.1 Zwanzig-Formalismus

Es wird angenommen, das Gesamtsystem sei abgeschlossen und gehorche einer unitären Dynamik, also einer von-Neumann-Gleichung (Gl. 2.8). Die Zerlegung in den relevanten und irrelevanten Anteil definiert die zeitunabhängigen

Projektions-Superoperatoren \mathcal{P} und \mathcal{Q}

$$\mathcal{P} \varrho(t) = \varrho_{\text{rel}}(t) \quad \text{und} \quad \mathcal{Q} \varrho(t) = \varrho_{\text{irr}}(t) \quad , \quad (3.2)$$

für die

$$\mathcal{P} + \mathcal{Q} = 1 \quad , \quad \mathcal{P}^2 = \mathcal{P} \quad , \quad \mathcal{Q}^2 = \mathcal{Q} \quad , \quad \mathcal{P}\mathcal{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{P} = 0 \quad (3.3)$$

gilt. Es wird nun eine Gleichung für den relevanten Teil gesucht. Zunächst erhält man aus der von-Neumann-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \mathcal{P} \varrho(t) = \mathcal{P} \frac{d\varrho(t)}{dt} = -i\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{P} \varrho(t) - i\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q} \varrho(t) \quad . \quad (3.4)$$

Für den irrelevanten Anteil gilt entsprechend

$$\frac{d}{dt} \mathcal{Q} \varrho(t) = \mathcal{Q} \frac{d\varrho(t)}{dt} = -i\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P} \varrho(t) - i\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q} \varrho(t) \quad . \quad (3.5)$$

Diese Gleichung wird formal mittels Laplace-Transformation gelöst – die zeitunabhängigen Superoperatoren bleiben von der Transformation unberührt –

$$\begin{aligned} \mathcal{Q} (s\hat{\varrho}(s) - \varrho(0)) &= -i\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P} \hat{\varrho}(s) - i\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q} \hat{\varrho}(s) \\ \Rightarrow \mathcal{Q} \hat{\varrho}(s) &= \frac{1}{s + i\mathcal{Q}\mathcal{L}} (\mathcal{Q} \varrho(0) - i\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P} \hat{\varrho}(s)) \\ \Rightarrow \mathcal{Q} \varrho(t) &= e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}t} \mathcal{Q} \varrho(0) - i \int_0^t d\tau e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}\tau} \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P} \varrho(t - \tau) \end{aligned} \quad (3.6)$$

und in die Gleichung für den relevanten Anteil eingesetzt

$$\mathcal{P} \dot{\varrho}(t) = -i\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{P} \varrho(t) - i\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q} e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}t} \mathcal{Q} \varrho(0) - \int_0^t d\tau \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q} e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}\tau} \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P} \varrho(t - \tau) \quad . \quad (3.7)$$

Dies ist die Zwanzig-Gleichung.

3.2 Gekoppelte Systeme

Im Folgenden wird ein mikroskopisches System untersucht, welches durch Wechselwirkung mit einer makroskopischen Umgebung Dissipation erleidet. Ausgehend von der unitären Dynamik des Gesamtsystems

$$\varrho(t) = \mathcal{U}_t \varrho(0) \quad (3.8)$$

ergibt sich die Systemdichte scheinbar einfach durch die Reduktion

$$\mathcal{R} : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D}_S \quad , \quad \varrho \mapsto \varrho_S = \mathcal{R} \varrho = \text{Sp}_B(\varrho) \quad , \quad (3.9)$$

also durch Ausintegration der Badfreiheitsgrade. Die volle Dynamik ist allerdings unbekannt: Der Hamiltonoperator des sehr komplexen Gesamtsystem ist nicht genau bekannt und der Anfangszustand ist mit Sicherheit nicht mikroskopisch reproduzierbar. Diese Details dürfen in der reduzierten Betrachtung keine Rolle mehr spielen. Insbesondere ist es unerheblich, ob das Gesamtsystem wirklich abgeschlossen ist, oder seinerseits Dissipation durch den Kontakt mit einer noch größeren Umgebung erleidet. Insofern ist ein ultimatives hamiltonsches Gesamtsystem („Universums-Wellenfunktion“) unnötig.

Vom Anfangszustand des Gesamtsystems sind nur der Systemzustand $\varrho_S(0)$ sowie einige makroskopische Parameter wie z. B. die Temperatur bekannt. Die reduzierte Dynamik Φ_t ergibt sich nun, indem zunächst vom Beobachtungssystem auf das Gesamtsystem erweitert wird

$$\mathcal{E} : \mathcal{D}_S \rightarrow \mathcal{D} \quad , \quad \varrho_S \mapsto \varrho(\varrho_S) \quad , \quad (3.10)$$

diese Gesamtdichte dann propagiert (Gl. 3.8) und anschließend wieder auf das Beobachtungssystem reduziert wird (s. Abb. 3.1)

$$\Phi_t = \mathcal{R} \mathcal{U}_t \mathcal{E} : \mathcal{D}_S \rightarrow \mathcal{D}_S \quad , \quad \varrho_S(0) \mapsto \varrho_S(t) \quad . \quad (3.11)$$

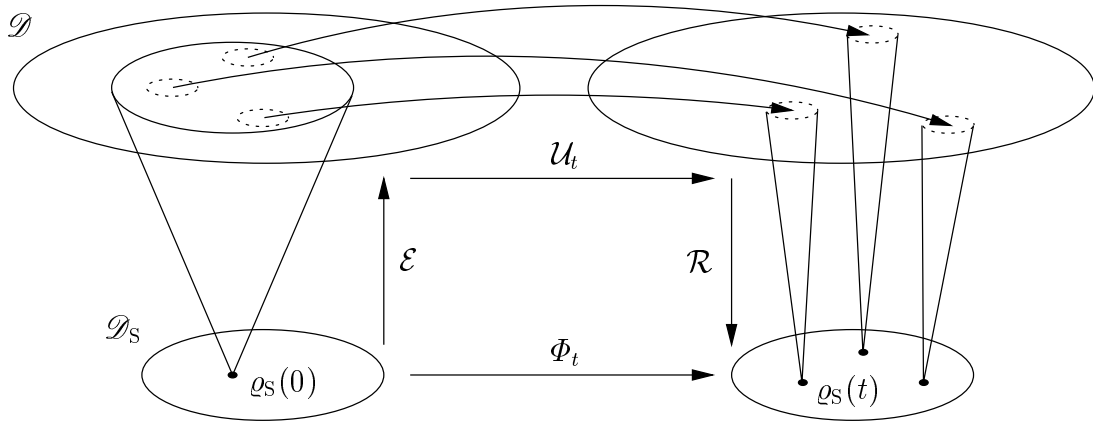


Abbildung 3.1: Die reduzierte Dynamik Φ_t bildet $\varrho_S(0)$ auf $\varrho_S(t)$ ab. Hierzu wird mit \mathcal{E} auf das Gesamtsystem erweitert, dieses mit \mathcal{U}_t propagiert und schließlich mit \mathcal{R} wieder auf das System reduziert. Die Dynamik hängt von der Wahl der Erweiterung ab. Diejenigen Erweiterungen, die auf dasselbe $\varrho_S(t)$ führen (jeweils der Bereich innerhalb einer gepunkteten Ellipse), sind dynamisch äquivalent.

Im Gegensatz zur Reduktion \mathcal{R} sind allerdings viele Erweiterungen \mathcal{E} möglich; diese müssen bisher lediglich die Bedingung

$$\mathcal{R} \mathcal{E} = 1 \quad (3.12)$$

erfüllen: Die Kombination von Erweiterung und Reduktion darf den Systemzustand nicht ändern, wie sich auch aus Gleichung (3.11) für $t = 0$ ergibt.

Das Hauptproblem besteht nun darin, zu einem gegebenem $\varrho_S(0)$ einen Zustand $\varrho(0)$ des Gesamtsystems, also eine Erweiterung \mathcal{E} zu wählen. Verschiedene \mathcal{E} – und damit verschiedene $\varrho(0)$ – führen nämlich zu unterschiedlichen Zeitentwicklungen $\varrho(t)$ und unter Umständen zu unterschiedlichen reduzierten Dynamiken $\varrho_S(t)$. Das ist aber nicht notwendigerweise so: Es gibt Zustände des Gesamtsystems, die zu derselben reduzierten Dynamik führen (z. B. die zu demselben Makrozustand gehörenden Mikrozustände). Erweiterungen, die auf dieselbe Zeitentwicklung des Beobachtungssystem führen, werden dynamisch äquivalent genannt

$$\mathcal{E}' \sim \mathcal{E} \quad : \quad \Phi'_t = \mathcal{R} \mathcal{U}_t \mathcal{E}' = \mathcal{R} \mathcal{U}_t \mathcal{E} = \Phi_t \quad \forall t \quad . \quad (3.13)$$

Zwei Experimente, in denen sich dasselbe untersuchte System mit der Zeit verschieden entwickelt, müssen sich in ihrem Aufbau voneinander unterscheiden. Dies soll nicht heißen, dass alle Messgrößen eines Experimentes bei jeder Realisierung dieselben Werte annehmen; statistische Schwankungen sind im Dichteoperator enthalten. Systematische Abweichungen müssen ihre Ursache jedoch in verschiedenen Versuchsaufbauten haben. Diese relevanten Eigenschaften des Versuchsaufbaus sind die oben angesprochenen makroskopischen Parameter, die das Gesamtsystem charakterisieren. Sie müssen bei der Wahl der Erweiterung \mathcal{E} berücksichtigt werden.

3.2.1 Linearität der Dynamik

Eine wichtige Eigenschaft der Dynamik Φ_t ist die Linearität bezüglich des Anfangszustandes: Mischungen sollen erhalten bleiben

$$\Phi_t(\lambda \varrho_{S1} + (1 - \lambda) \varrho_{S2}) = \lambda \Phi_t \varrho_{S1} + (1 - \lambda) \Phi_t \varrho_{S2} \quad . \quad (3.14)$$

Diese Forderung wird benötigt, um die Interpretation des Dichteoperators als Beschreibung eines Ensembles zu ermöglichen: Besteht das Ensemble aus unterschiedlichen Systemzuständen, welche mit einer gewissen Häufigkeit auftreten, so sollte es erlaubt sein, die einzelnen Zustände getrennt voneinander zu untersuchen und deren Entwicklung anschließend gemäß ihrer Gewichtung zu mitteilen. Dies ist vor allem dann notwendig, wenn sich die einzelnen Systemzustände tatsächlich unabhängig voneinander präparieren lassen, z. B. beim Spontanzerfall eines Atoms, welches sich im angeregten oder im Grundzustand befinden kann.

Wenn andererseits die Linearität nicht gegeben ist, ist eine solche Interpretation nicht möglich. Zum Beispiel ist die häufig verwendete Erweiterung mit maximaler Entropie nicht linear im Systemzustand. Hier ist eine Zerlegung des Systemzustandes in eine Mischung aus reinen Zuständen allerdings auch fragwürdig, da diese experimentell meist nicht präpariert werden können. Gelingt es nun, eine Dynamik zu berechnen, so muss diese nicht für alle *mathematisch* möglichen

Anfangszustände des Systems gelten; sie ist auf die Untermenge der *physikalisch* möglichen beschränkt: Der Anfangszustand des Systems muss zu einem Zustand maximaler Entropie des Gesamtsystems passen. Damit entfällt unter Umständen auch die Forderungen an die Dynamik, *jeden* Anfangszustand auf einen positiven Operator abzubilden (Positivität). Es genügt, wenn dies für jeden *erlaubten* Anfangszustand gilt, da nicht per Linearität auf alle anderen geschlossen werden darf.

In diesem Fall ist die Beschreibung mit einer Dynamik für die reduzierte Dichte jedoch nicht angebracht. Hier handelt es sich vielmehr um eine Beschreibung des Gesamtsystems, welche sich aufgrund der Forderung nach maximaler Entropie auf einen Satz relevanter Messgrößen vereinfacht. Lässt sich jedoch eine reduzierte Dynamik für ein Teilsystem ϱ_S finden, die für beliebige Anfangszustände gilt, so muss diese linear sein. Ob dies der Fall ist oder nicht, hängt vom untersuchten System ab.

Betrachtet man nun die einzelnen Komponenten der Dynamik, so sieht man, dass die Reduktion \mathcal{R} und die unitäre Dynamik des Gesamtsystems \mathcal{U}_t linear sind. Im Folgenden soll untersucht werden, wie es sich mit der Erweiterung \mathcal{E} verhält. Ein beliebiger Dichteoperator ϱ des Gesamtsystems ist durch die reduzierten Dichten von System ϱ_S und Bad ϱ_B nicht eindeutig bestimmt, da in ihnen keine Informationen über Quantenkorrelationen zwischen den Teilräumen enthalten sind. Eine Zerlegung der Gesamtdichte muss diese Korrelationen aber berücksichtigen

$$\varrho = \varrho_S \otimes \varrho_B + \Delta\varrho \quad . \quad (3.15)$$

Der Term $\Delta\varrho$ ist selbst keine Dichte; es muss z. B. wegen $\text{Sp}_{S,B}(\varrho) = \varrho_{S,B}$

$$\text{Sp}_S(\Delta\varrho) = \text{Sp}_B(\Delta\varrho) = 0 \quad (3.16)$$

gelten. Die allgemeine Erweiterung \mathcal{E} ist demnach

$$\mathcal{E} : \varrho_S \mapsto \varrho(\varrho_S) = \varrho_S \otimes \varrho_B(\varrho_S) + \Delta\varrho(\varrho_S) \quad , \quad (3.17)$$

wobei sowohl die Umgebungsdichte als auch die Quantenkorrelationen Funktionen der Systemdichte sein dürfen. Die Erweiterung ist jedoch nur genau dann linear, wenn sie ϱ_S auf einen unkorrelierten Zustand abbildet und dabei die Dichte des Bades ϱ_B nur von den makroskopischen Parametern, nicht aber von ϱ_S abhängt:

$$\varrho(\lambda\varrho_{S1} + (1 - \lambda)\varrho_{S2}) = \lambda\varrho(\varrho_{S1}) + (1 - \lambda)\varrho(\varrho_{S2}) \quad \Leftrightarrow \quad \varrho(\varrho_S) = \varrho_S \otimes \varrho_B \quad . \quad (3.18)$$

□ Diese Behauptung soll nun bewiesen werden. Hierbei wird die Tatsache genutzt, dass ein reiner Systemzustand $\varrho_S = P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ nicht mit der Umgebung korreliert sein kann

$$\varrho(P_\psi) = P_\psi \otimes \varrho_B(P_\psi) \quad , \quad (3.19)$$

da für eine Korrelation mindestens zwei Systemzustände beteiligt sein müssen [7, S. 300]. Wird nun bei einem N -dimensionalen System die vollständige Mischung

aller Zustände $\varrho_S = \frac{1}{N} \sum_i P_{\psi_i}$ mit einer beliebigen Basis $\{\psi_i\}$ betrachtet, so folgt aus der geforderten Linearität und Gleichung (3.19)

$$\varrho(\varrho_S) = \frac{1}{N} \sum_i P_{\psi_i} \otimes \varrho_B(P_{\psi_i}) \quad . \quad (3.20)$$

Mittelung über den Systemzustand ψ_j ergibt

$$\text{Sp}_S(P_{\psi_j} \varrho(\varrho_S)) = \frac{1}{N} \varrho_B(P_{\psi_j}) = \frac{1}{N} \sum_i |\langle \phi_i | \psi_j \rangle|^2 \varrho_B(P_{\phi_i}) \quad , \quad (3.21)$$

wobei im letzten Schritt eine andere Basis $\{\phi_i\}$ genommen wurde. Diese Gleichung ist aber für beliebige Basen nur erfüllbar, wenn $\varrho_B(P_\psi) = \varrho_B(P_\phi)$ für beliebige Zustände ψ, ϕ gilt¹, also ϱ_B für alle reinen Systemzustände gleich ist. Da sich jeder Zustand als Gemisch von reinen Zuständen darstellen lässt, folgt die Behauptung aus der Linearität und Gleichung (3.19)

$$\varrho(\varrho_S) = \varrho \left(\sum_\lambda p_\lambda P_\lambda \right) = \sum_\lambda p_\lambda \varrho(P_\lambda) = \sum_\lambda p_\lambda P_\lambda \otimes \varrho_B = \varrho_S \otimes \varrho_B \quad . \quad \blacksquare \quad (3.22)$$

Soll die Erweiterung nicht von der Zeit abhängen, so ist ϱ_B als konstanter Referenzzustand anzusehen, der durch die experimentellen Parameter charakterisiert ist; es wird angenommen, dass sich die Umgebung zum Zeitpunkt der Präparation in diesem Zustand befindet. Damit ist die allgemeine Form einer zeitunabhängigen linearen Erweiterung

$$\mathcal{E} : \mathcal{D}_S \rightarrow \mathcal{D} \quad , \quad \varrho_S \mapsto \varrho_S \otimes \varrho_B(0) \quad . \quad (3.23)$$

Es sei noch darauf hingewiesen, dass die Linearität der Erweiterung zwar hinreichend, aber nicht notwendig für die Linearität der reduzierten Dynamik Φ_t ist. Es ist jedoch fraglich, ob sich eine nichtlineare Erweiterung finden lässt, die in Verbindung mit $\mathcal{U}_t \mathcal{R}$ für beliebige t eine lineare Dynamik ergibt, ohne dabei dynamisch äquivalent zu einer linearen Erweiterung zu sein.

3.2.2 Halbgruppe der Dynamik

Erfüllt die reduzierte Dynamik die Halbgruppeneigenschaft

$$\Phi_{t_1+t_2} = \Phi_{t_2} \Phi_{t_1} \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{R} \mathcal{U}_{t_1+t_2} \mathcal{E} = \mathcal{R} \mathcal{U}_{t_2} \mathcal{E} \mathcal{R} \mathcal{U}_{t_1} \mathcal{E} \quad , \quad t_1, t_2 > 0 \quad (3.24)$$

¹Die Identität für zwei Zustände ψ_1, ψ_2 derselben Basis zeigt sich, wenn man als Referenzbasis $\phi_1 = (\psi_1 + \psi_2)/\sqrt{2}$, $\phi_2 = (\psi_1 - \psi_2)/\sqrt{2}$ und $\phi_i = \psi_i \quad \forall i > 2$ nimmt. Da somit alle Zustände einer Basis zu demselben ϱ_B führen, gilt dies nach der Gleichung auch für jeden anderen Zustand.

so folgt mit der Gruppeneigenschaft $\mathcal{U}_{t_1+t_2} = \mathcal{U}_{t_2}\mathcal{U}_{t_1}$ der unitären Dynamik

$$\mathcal{R}\mathcal{U}_{t_2}\mathcal{U}_{t_1}\mathcal{E} = \mathcal{R}\mathcal{U}_{t_2}\mathcal{E}\mathcal{R}\mathcal{U}_{t_1}\mathcal{E} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{U}_{t_1}\mathcal{E} \sim \mathcal{E}\mathcal{R}\mathcal{U}_{t_1}\mathcal{E} \quad . \quad (3.25)$$

Eine Reduktion mit anschließender Erweiterung $\mathcal{E}\mathcal{R}$ nach der Zeit t_1 hat also keinen Einfluss auf die weitere Dynamik des Systems. Also handelt es sich bei $\mathcal{E}\mathcal{R}$ um eine Projektion auf den dynamisch relevanten Anteil des Gesamtzustandes:

$$\mathcal{P} = \mathcal{E}\mathcal{R} \quad , \quad \mathcal{P}^2 = \mathcal{E}\mathcal{R}\mathcal{E}\mathcal{R} = \mathcal{E}\mathcal{R} = \mathcal{P} \quad . \quad (3.26)$$

Damit ist die für die Anwendung des Zwanzig-Formalismus benötigte Projektion auf die relevante Dichte gefunden: Sie ergibt sich aus der Definition der Reduktion (Gl. 3.9) und der allgemeinen linearen Erweiterung (Gl. 3.23):

$$\mathcal{P} : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D} \quad , \quad \varrho \mapsto \varrho_{\text{rel}} = \text{Sp}_{\text{B}}(\varrho) \otimes \varrho_{\text{B}}(0) \quad . \quad (3.27)$$

3.2.3 Anwendung der Zwanzig-Gleichung

Der Hamiltonoperator und mit ihm der Liouville-Operator wird in den freien (System- und Bad-) und den Wechselwirkungsanteil aufgespalten:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_{\text{W}} = \mathcal{L}_{\text{S}} + \mathcal{L}_{\text{B}} + \mathcal{L}_{\text{W}} \quad . \quad (3.28)$$

Aus der Definition der Projektion (Gl. 3.27) folgt

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{S}} = \mathcal{L}_{\text{S}}\mathcal{P} \quad , \quad \mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{B}} = 0 \quad . \quad (3.29)$$

Wird der Referenzzustand des Bades ϱ_{B} stationär bezüglich des Hamiltonoperators des Bades H_{B} angenommen, so gilt auch

$$\mathcal{L}_{\text{B}}\varrho_{\text{B}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L}_{\text{B}}\mathcal{P} = \mathcal{L}_{\text{B}}\text{Sp}_{\text{B}}(\cdot) \otimes \varrho_{\text{B}} = 0 \quad . \quad (3.30)$$

Der Anfangswert des irrelevanten Anteils $\mathcal{Q}\varrho(0)$ verschwindet, da (s. Gl. 3.12)

$$\mathcal{P}\varrho(0) = \mathcal{P}\mathcal{E}\varrho_{\text{S}}(0) = \mathcal{E}\mathcal{R}\mathcal{E}\varrho_{\text{S}}(0) = \mathcal{E}\varrho_{\text{S}}(0) = \varrho(0) \quad (3.31)$$

gilt.

Die Aufteilung des Hamiltonoperators in System-, Bad- und Wechselwirkungsanteil ist nicht eindeutig, vielmehr können Anteile wahlweise zum System oder zur Kopplung, bzw. zum Bad oder zur Kopplung gezählt werden – je nachdem wie mit der „mittleren“ Wechselwirkung umgegangen wird. Eine günstige Zerlegung führt zu

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{W}}\mathcal{P} = 0 \quad . \quad (3.32)$$

□ Es soll gezeigt werden, dass eine solche Darstellung immer gewählt werden kann. Hierzu wird der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator H_{W} in System- und Badanteile zerlegt (s. Abschnitt 3.4, Gl. 3.71)

$$H_{\text{W}} = \hbar\kappa \sum_k B_k \otimes S_k \quad (3.33)$$

Dann ist

$$\text{Sp}_B (H_W \mathcal{P} \varrho) = \hbar \kappa \sum_k \text{Sp}_B (B_k \otimes S_k \varrho_S(t) \otimes \varrho_B(0)) = \hbar \kappa \sum_k \langle B_k \rangle(0) S_k \varrho_S(t). \quad (3.34)$$

Wenn Terme mit $\langle B_k \rangle(0) \neq 0$ existieren, kann die Aufteilung in System, Umgebung und Wechselwirkung wie folgt geändert werden:

$$H'_S = H_S + \hbar \kappa \sum_k \langle B_k \rangle(0) S_k \quad (3.35)$$

$$H'_W = H_W - \hbar \kappa \sum_k \langle B_k \rangle(0) S_k \quad (3.36)$$

$$H'_B = H_B \quad . \quad (3.37)$$

Damit verschwindet mit den Erwartungswerten der neuen Badanteile $B'_k = B_k - \langle B_k \rangle(0)$ auch für beliebige ϱ

$$\mathcal{P} \mathcal{L}'_W \mathcal{P} \varrho = \text{Sp}_B ([H'_W, \text{Sp}_B (\varrho) \otimes \varrho_B(0)]) = 0 \quad . \quad \blacksquare \quad (3.38)$$

Insgesamt ergeben sich die folgenden Beziehungen

$$\mathcal{P} \mathcal{L} \mathcal{P} = \mathcal{L}_S \mathcal{P} \quad , \quad \mathcal{Q} \mathcal{L} \mathcal{P} = \mathcal{L}_W \mathcal{P} \quad , \quad \mathcal{P} \mathcal{L} \mathcal{Q} = \mathcal{P} \mathcal{L}_W \quad , \quad (3.39)$$

mit denen sich die Zwanzig-Gleichung (Gl. 3.7) wegen $\mathcal{Q} \varrho(0) = 0$ (Gl. 3.31) zu

$$\mathcal{P} \dot{\varrho}(t) = -i \mathcal{L}_S \mathcal{P} \varrho(t) - \int_0^t d\tau \mathcal{P} \mathcal{L}_W e^{-i \mathcal{Q} \mathcal{L} \tau} \mathcal{L}_W \mathcal{P} \varrho(t - \tau) \quad (3.40)$$

vereinfacht.

Ist die Kopplung zwischen System und Umgebung schwach, so kann sie als Störung betrachtet werden. In zweiter Ordnung in \mathcal{L}_W gilt

$$\mathcal{P} \mathcal{L}_W e^{-i \mathcal{Q} \mathcal{L} \tau} \mathcal{L}_W \mathcal{P} = \mathcal{P} \mathcal{L}_W e^{-i \mathcal{Q} \mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{L}_W \mathcal{P} \quad (3.41)$$

und wegen $\mathcal{Q} \mathcal{L}_0 = \mathcal{L}_0 \mathcal{Q}$ und $\mathcal{P} \mathcal{L}_W \mathcal{P} = 0$ weiter

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \mathcal{L}_W e^{-i \mathcal{Q} \mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{L}_W \mathcal{P} &= \mathcal{P} \mathcal{L}_W \mathcal{Q} e^{-i \mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{L}_W \mathcal{P} \\ &= \mathcal{P} \mathcal{L}_W e^{-i \mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{L}_W \mathcal{P} \quad , \end{aligned} \quad (3.42)$$

woraus näherungsweise

$$\mathcal{P} \dot{\varrho}(t) = -i \mathcal{L}_S \mathcal{P} \varrho(t) - \int_0^t d\tau \mathcal{P} \mathcal{L}_W e^{-i \mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{L}_W \mathcal{P} \varrho(t - \tau) \quad (3.43)$$

folgt. Dies ist die Zwanzig-Gleichung in zweiter Ordnung der Kopplung (Born-Näherung).

3.3 Markow-Näherung

Bei der Bewegungsgleichung (3.43) handelt es sich um eine Integrodifferentialgleichung, in die die Geschichte der relevanten Dichte ($\mathcal{P}\varrho(t-\tau)$ mit $0 \leq \tau \leq t$) eingeht. An dieser Stelle bietet es sich an, die Bewegungsgleichung vom Schrödinger- in das Wechselwirkungsbild zu transformieren und damit die schnellen Oszillationen der freien Dynamik ($\mathcal{P}\dot{\varrho}(t) = -i\mathcal{P}\mathcal{L}_S\mathcal{P}\varrho(t)$) zu eliminieren. Der Bildwechsel erfolgt nach Gleichung (2.8) und (2.11) mit

$$\tilde{\varrho}(t) = e^{i\mathcal{L}_0 t} \varrho(t) \quad , \quad \tilde{\mathcal{L}}_W(t) = e^{i\mathcal{L}_0 t} \mathcal{L}_W e^{-i\mathcal{L}_0 t} \quad , \quad (3.44)$$

woraus wegen $\mathcal{P}\mathcal{L}_B = 0 = \mathcal{L}_B\mathcal{P}$ und $\mathcal{P}\mathcal{L}_S = \mathcal{L}_S\mathcal{P}$ auch $[\mathcal{L}_0, \mathcal{P}] = 0$ und damit

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \tilde{\varrho}(t) &= i\mathcal{P}\mathcal{L}_0 \tilde{\varrho}(t) + \mathcal{P}e^{i\mathcal{L}_0 t} \dot{\varrho}(t) \\ &= i\mathcal{L}_S \mathcal{P} \tilde{\varrho}(t) + \mathcal{P}e^{i\mathcal{L}_0 t} \left(-i\mathcal{L}_S \mathcal{P} \varrho(t) - \int_0^t d\tau \mathcal{P} \mathcal{L}_W e^{-i\mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{L}_W \mathcal{P} \varrho(t-\tau) \right) \\ &= - \int_0^t d\tau \mathcal{P} e^{i\mathcal{L}_0 t} \mathcal{L}_W e^{-i\mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{L}_W e^{-i\mathcal{L}_0(t-\tau)} \mathcal{P} \tilde{\varrho}(t-\tau) \\ &= - \int_0^t d\tau \mathcal{P} \tilde{\mathcal{L}}_W(t) \tilde{\mathcal{L}}_W(t-\tau) \mathcal{P} \tilde{\varrho}(t-\tau) \end{aligned} \quad (3.45)$$

folgt. Da die nun verbleibende Dynamik im Vergleich zur freien relativ langsam ist, kann die Gleichung entscheidend vereinfacht werden: Wie später gezeigt wird, fällt der Superoperator-Integralkern $\mathcal{P} \tilde{\mathcal{L}}_W(t) \tilde{\mathcal{L}}_W(t-\tau) \mathcal{P}$ als Funktion von τ gewöhnlich innerhalb einer charakteristischen Zeit τ_c auf Null ab. Ist diese Gedächtniszeit kurz gegenüber der Zeitspanne, auf der sich die relevante Dichte im Wechselwirkungsbild ändert, so kann

$$\mathcal{P} \tilde{\varrho}(t-\tau) \approx \mathcal{P} \tilde{\varrho}(t) \quad \text{für} \quad \tau \lesssim \tau_c \quad (3.46)$$

genähert werden. Mit dieser *Markow-Näherung* wird aus der Integrodifferentialgleichung eine zeitlich lokale Differentialgleichung

$$\mathcal{P} \dot{\tilde{\varrho}}(t) = -i\tilde{\mathcal{L}}_d(t) \mathcal{P} \tilde{\varrho}(t) \quad , \quad (3.47)$$

mit dem erzeugenden Superoperator der dissipativen Dynamik

$$-i\tilde{\mathcal{L}}_d(t) = - \int_0^t d\tau \mathcal{P} \tilde{\mathcal{L}}_W(t) \tilde{\mathcal{L}}_W(t-\tau) \mathcal{P} \quad . \quad (3.48)$$

Die Dynamik der relevanten Dichte hängt nun nicht mehr von ihrer Vergangenheit ab – es gibt keine Gedächtniseffekte. Die durch $-i\mathcal{L}_d$ erzeugte dissipative Dynamik ist nicht vom Lindblad-Typ, da sie auch im Schrödingerbild

$$\begin{aligned} -i\mathcal{L}_d(t) &= -ie^{-i\mathcal{L}_0 t} \tilde{\mathcal{L}}_d(t) e^{i\mathcal{L}_0 t} \\ &= - \int_0^t d\tau \mathcal{P} \tilde{\mathcal{L}}_W(0) \tilde{\mathcal{L}}_W(-\tau) \mathcal{P} \end{aligned} \quad (3.49)$$

noch über die obere Integralgrenze von der Zeit abhängt und daher keine Halbgruppe (Gl. 2.16) bildet. Da jedoch angenommen wurde, dass der Integrand für $\tau \gtrsim \tau_c$ verschwindet, nähert sich $\mathcal{L}_d(t)$ schnell einem stationären Wert

$$-i\mathcal{L}_d = - \int_0^\infty d\tau \mathcal{P} \tilde{\mathcal{L}}_W(0) \tilde{\mathcal{L}}_W(-\tau) \mathcal{P} \quad \text{für } t \gtrsim \tau_c \quad . \quad (3.50)$$

Bei der Beschreibung der dissipativen Dynamik der relevanten Dichte sind also zwei Zeitbereiche zu unterscheiden: Für Zeiten $t \lesssim \tau_c$, die kürzer als die Gedächtniszeit des Bades sind, wächst der dissipative Anteil der Dynamik $-i\mathcal{L}_d(t)$ von Null auf seinen konstanten Wert. Das „Einschalten“ der Dissipation dauert eine endliche Zeit τ_c . Dieser Effekt wird im nächsten Abschnitt näher untersucht. Für Zeiten größer als die Gedächtniszeit des Bades $t \gtrsim \tau_c$ ergibt sich eine Halbgruppendynamik, die (im Schrödingerbild) durch

$$\mathcal{P} \dot{\rho}(t) = -i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d) \mathcal{P} \rho(t) \quad (3.51)$$

erzeugt wird.

3.3.1 Einschalteteffekt

Nach dem letzten Abschnitt ist die Dynamik eines Systems für kleine Zeiten immer ungedämpft, bis nach einer endlichen Antwortzeit der dissipative Einfluss der Umgebung einsetzt. Es stellt sich nun die Frage, ob es sich hierbei um einen physikalischen Effekt oder um ein Artefakt der mathematischen Beschreibung handelt. Es kommt hier offenbar entscheidend auf die Wahl des Zeitnullpunktes an. In der ursprünglichen Zwanzig-Gleichung (Gl. 3.7) war diese Wahl zunächst willkürlich und der Zeitpunkt $t = 0$ nicht physikalisch ausgezeichnet. Die Gleichung kann auch auf einen anderen Referenzzeitpunkt t_r bezogen werden, da wegen $\dot{\rho}(t) = -i\mathcal{L}(\mathcal{P} + \mathcal{Q})\rho(t)$

$$i \int_0^{t_r} dt' e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}(t-t')} \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P} \rho(t') = \left[e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}(t-t')} \mathcal{Q}\rho(t') \right]_{t'=0}^{t'=t_r} \quad (3.52)$$

und damit auch

$$e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}t} \mathcal{Q}\rho(0) = e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}(t-t_r)} \mathcal{Q}\rho(t_r) - i \int_t^{t-t_r} d\tau e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}\tau} \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P} \rho(t-\tau) \quad (3.53)$$

gilt. Auf diese Weise ergibt sich

$$\mathcal{P} \dot{\rho}(t) = -i\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{P} \rho(t) - i\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q} e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}(t-t_r)} \mathcal{Q}\rho(t_r) - \int_0^{t-t_r} d\tau \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q} e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}\tau} \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P} \rho(t-\tau) . \quad (3.54)$$

Durch die Wahl von t_r können also Anteile der Dynamik zwischen dem Gedächtnisintegral und dem zweite Term, der den Einfluss von $\mathcal{Q}\rho(t_r)$ beschreibt, „umgewidmet“ werden. Für $t-t_r \gtrsim \tau_c$ hängt das Gedächtnisintegral und damit auch der

Einfluss von $\mathcal{Q}\varrho(t_r)$ nicht mehr von der Wahl der Referenzzeit ab. Unabhängig von t_r sollte der zweite Term nichts beitragen, da es sich ja um den Einfluss des *dynamisch irrelevanten* Anteils des Referenzzustandes handelt. Offensichtlich gilt dies jedoch nicht für $t - t_r \lesssim \tau_c$, denn in diesem Fall hängt das Gedächtnisintegral und damit auch der Einfluss von $\mathcal{Q}\varrho(t_r)$ von t_r ab: Dieser kompensiert nämlich gerade den Defekt des „zu kurzen“ Gedächtnisses, ist hier also durchaus relevant. Diese scheinbare Inkonsistenz liegt darin begründet, dass die Aufteilung in dynamisch relevanten und irrelevanten Anteil von der Halbgruppen-Eigenschaft der Dynamik ausging (s. 3.2.2). Wie oben gezeigt wurde, gilt diese aber nur für hinreichend große Zeiten $t - t_r \gtrsim \tau_c$.

Die entscheidende Frage ist nun, ob zu dem gewählten Zeitnullpunkt $\mathcal{Q}\varrho(0)$ wirklich dynamisch irrelevant ist, oder dies erst nach einer Zeitspanne τ_c wird. Bisher wurde der erste Fall vorausgesetzt, nämlich

$$\mathcal{Q}\varrho(0) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \varrho(0) = \varrho_S(0) \otimes \varrho_B(0) \quad , \quad (3.55)$$

was einem faktorisierenden Anfangszustand entspricht. Dies kann physikalisch dadurch realisiert werden, dass erst zu diesem Zeitpunkt die Wechselwirkung zwischen System und Umgebung eingeschaltet wird (und zwar in einer im Vergleich zu τ_c sehr kurzen Zeit). Dann kommt es tatsächlich auch zu einem „Einschalten“ der Dissipation.

Wenn allerdings die Kopplung schon vorher besteht und der Zeitnullpunkt nur den Beginn der Beobachtung markiert, dann kann der dissipative Einfluss der Umgebung nicht davon abhängen: In diesem Fall gibt es keinen Einschalteteffekt. Die dissipative Dynamik wird dann zu allen Zeiten (auch für $t \lesssim \tau_c$) durch $-i\mathcal{L}_d$ (Gl. 3.50) erzeugt und bildet auch zu allen Zeiten eine Halbgruppe. Der Anfangszustand faktorisiert hier zwar nicht, der Einfluss der Korrelationen bei $t = 0$ wird aber nach Gleichung (3.53) durch den Bereich des Gedächtnisintegrals mit $t < \tau$ ausgedrückt:

$$-i\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q}e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}t}\mathcal{Q}\varrho(0) = -\int_t^\infty d\tau \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q}e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}\tau}\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P}\varrho(t-\tau) \quad . \quad (3.56)$$

Hier wurde der Einfluss von $\mathcal{Q}\varrho(t_r)$ nicht berücksichtigt, da vorausgesetzt werden kann, dass er für hinreichend weit in der Vergangenheit liegende Referenzzeiten tatsächlich dynamisch irrelevant ist.

Der Einschalteteffekt kann nur bei Systemen auftreten, bei denen das untersuchte Teilsystem bis zum Zeitpunkt der Präparation von seiner Umgebung isoliert ist oder wenn durch die Präparation Korrelationen zwischen Teilsystem und Umgebung zerstört werden. Entgegen dem Gebrauch in der Literatur [14] handelt es sich bei dem Einschalteteffekt strenggenommen nicht um einen „nicht-markowschen“ Effekt, da die Bewegungsgleichung (Gl. 3.47) zeitlich lokal ist. Die reduzierte Dichte wird nicht von *ihrer* Vergangenheit beeinflusst, wohl aber von der Vergangenheit *des Gesamtsystems*. Diese Nachwirkung des Einschaltens kann

insofern wohl als Gedächtniseffekt bezeichnet werden. Als „nicht-markowsche“ Effekte sollten aber nur solche bezeichnet werden, bei denen sich die relevante Dichte auf der Zeitskala der Umgebungskorrelationen τ_c ändert. Diese werden auch in der Langzeitdynamik zu finden sein. Die Messung von Kurzeffekten, wie dem Einschalteffekt, erscheint jedenfalls problematisch, da eine quantenmechanische Messung eine Wechselwirkung mit einer makroskopischen Umgebung (dem Messgerät) voraussetzt. Diese muss von der Umgebung, deren dissipativer Einfluss auf das System untersucht werden soll, verschieden sein: Die Zeit τ_M , auf der die Messung das System in einen Messzustand „projiziert“ [6], muss kürzer sein als die zu messende Korrelationszeit τ_c . An einem solchen Experiment würden sich eine Fülle grundlegender Fragestellungen untersuchen lassen: Unitäre und dissipative Dynamik unterscheiden sich fundamental in ihrem Kurzzeitverhalten. Während sich der Zustand eines Systems bei unitärer Zeitentwicklung für kurze Zeiten $t \rightarrow 0$ stets quadratisch mit der Zeit ändert, führt Dissipation auf einen linearen Anteil. So ist z. B. das Verhalten eines an ein Zwei-Niveau-System gekoppelten Oszillators (Jaynes-Cummings-Modell) ohne Dämpfung für bestimmte Anfangszustände scheinbar dissipativ (Besetzungszustände sterben aus, „collapse“), tatsächlich aber unitär, was nicht nur am Wiederaufleben der Oszillationen („revival“) sondern auch am quadratischen Kurzzeitverhalten abgelesen werden kann. Bei Systemen mit Einschalteffekt gilt diese Unterscheidung hingegen nicht, da die Dissipation für $t \rightarrow 0$ verschwindet und sich daher auch ein quadratisches Kurzzeitverhalten ergibt. Dies ist z. B. für Messungen des Quanten-Zeno-Effektes relevant, bei dem die Dynamik eines Systems durch wiederholte Messungen beeinflusst und im Grenzfall hoher Wiederholraten sogar unterbunden wird [15]. Hier kommt es nämlich besonders auf die im Grenzfall $t \rightarrow 0$ quadratische Zeitentwicklung an – wenn der lineare Anteil überwiegt, also bei starker Dämpfung, tritt der Effekt nicht auf. Bei Systemen mit Einschalteffekt könnte der Effekt hingegen auch bei starker Dämpfung auftreten, wenn der Zeitabstand zwischen den Messungen kleiner als die Einschaltzeit realisiert werden kann.

3.3.2 Zwei-Zeiten-Erwartungswerte

Aus der reduzierten Dichte $\varrho_S(t)$ können die Erwartungswerte aller Systemoperatoren berechnet werden. Zur Berechnung zeitlicher Systemkorrelationen genügt sie allerdings nicht. Diese sind nämlich über die Dynamik der Operatoren im Heisenbergbild bezüglich des vollen Liouville-Operators \mathcal{L} definiert

$$\langle A(t + \tau)B(t) \rangle \equiv \text{Sp}((e^{i\mathcal{L}(t+\tau)}A)(e^{i\mathcal{L}t}B)\varrho) \quad . \quad (3.57)$$

Zwar sind $A(0)$ und $B(0)$ reine Systemoperatoren, dies gilt wegen der in \mathcal{L} enthaltenen Kopplung jedoch nicht für $A(t + \tau)$ und $B(t)$. Nach Gleichung (2.22) erfüllt die volle (unitäre) Dynamik die Beziehung

$$(e^{i\mathcal{L}(t+\tau)}A)(e^{i\mathcal{L}t}B) = e^{i\mathcal{L}t}(e^{i\mathcal{L}\tau}A)B \quad , \quad (3.58)$$

daher entspricht nach Gleichung (2.10)

$$\langle A(t + \tau)B(t) \rangle = \text{Sp}((e^{i\mathcal{L}\tau} A) B e^{-i\mathcal{L}t} \varrho) = \text{Sp}((e^{i\mathcal{L}\tau} A) B \varrho(t)) \quad (3.59)$$

die Korrelationsfunktion dem Erwartungswert des Operators $(e^{i\mathcal{L}\tau} A)B$ zur Zeit t . Da auch dieser Operator kein reiner Systemoperator ist, genügt zur Berechnung nicht allein die relevante Dichte $\mathcal{P}\varrho(t)$. Auch der irrelevante Anteil $\mathcal{Q}\varrho(t)$ trägt zum Erwartungswert bei:

$$\langle A(t + \tau)B(t) \rangle = \text{Sp}((e^{i\mathcal{L}\tau} A) B \mathcal{P}\varrho(t)) + \text{Sp}((e^{i\mathcal{L}\tau} A) B \mathcal{Q}\varrho(t)) \quad (3.60)$$

Wenn jedoch dessen Beitrag wesentlich ist, also bei einer Messung zwischen der vollständigen Korrelationsfunktion und $\text{Sp}((e^{i\mathcal{L}\tau} A) B \mathcal{P}\varrho(t))$ unterschieden werden kann, dann muss die Einteilung in physikalisch relevante und irrelevante Dichte überprüft werden. Die ursprüngliche Wahl von \mathcal{P} als Projektion auf die Systemdichte scheint nun in Frage gestellt. Sollen auch Korrelationsfunktionen zu den relevanten Observablen gehören, so reicht die Systemdichte zur Beschreibung strenggenommen nicht aus. Ist jedoch der von $\mathcal{Q}\varrho(t)$ stammende Beitrag bei der Berechnung der physikalisch messbaren Observablen – hier also $(e^{i\mathcal{L}\tau} A)B$ – vernachlässigbar, so kann er weiterhin als irrelevant gelten. Der entscheidende Punkt dieser Überlegung ist, dass die Irrelevanz von $\mathcal{Q}\varrho(t)$ von den zu messenden Observablen abhängt.

Bei schwacher Kopplung zwischen System und Umgebung ist der Beitrag der irrelevanten Dichte zum Erwartungswert tatsächlich klein, denn sowohl die Abweichung von $(e^{i\mathcal{L}\tau} A)B$ von einem reinen Systemoperator, als auch die durch $\mathcal{Q}\varrho(t)$ beschriebenen System-Umgebungs-Korrelationen hängen von der Stärke der Wechselwirkung ab. Bei der Berechnung des Beitrages der relevanten Dichte wird gleich die reduzierte Bewegungsgleichung (Gl. 3.51) ausgenutzt werden, die bereits die Born-Näherung beinhaltet. Im Rahmen dieser Näherung trägt der hintere Term in Gleichung (3.60) nicht bei.

Damit bleibt

$$\langle A(t + \tau)B(t) \rangle = \text{Sp}(A e^{-i\mathcal{L}\tau} B \mathcal{P}\varrho(t)) = \text{Sp}(A \mathcal{P} e^{-i\mathcal{L}\tau} B \mathcal{P}\varrho(t)) \quad (3.61)$$

wobei im letzten Schritt ausgenutzt wurde, dass A ein reiner Systemoperator ist und es daher auch nur auf den relevanten Anteil von

$$\Omega(\tau) \equiv e^{-i\mathcal{L}\tau} B \mathcal{P}\varrho(t) \quad (3.62)$$

ankommt. Dieser erfüllt auch die Mastergleichung (Gl. 3.51)

$$\frac{d}{d\tau} \mathcal{P}\Omega(\tau) = -i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d) \mathcal{P}\Omega(\tau) \Rightarrow \mathcal{P}\Omega(\tau) = e^{-i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d)\tau} \mathcal{P}\Omega(0) \quad (3.63)$$

die für jede Linearkombination von relevanten Anfangszuständen $\mathcal{P}\varrho(0)$ gilt – also auch für $\mathcal{P}\Omega(0) = \mathcal{P}B\mathcal{P}e^{-i\mathcal{L}t}\varrho$. Dies führt auf

$$\langle A(t + \tau)B(t) \rangle = \text{Sp}(A e^{-i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d)\tau} \mathcal{P}B\mathcal{P}\varrho(t)) = \text{Sp}((e^{i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d^*)\tau} A) B \mathcal{P}\varrho(t)) \quad (3.64)$$

wobei im letzten Schritt noch $\mathcal{P}B\mathcal{P}\varrho(t) = B\mathcal{P}\varrho(t)$ genutzt werden konnte, da es sich um einen reinen Systemoperator handelt. Auch

$$A(\tau) \equiv e^{i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_A^*)\tau} A \quad (3.65)$$

wirkt nur auf das System. Daher kann die gesuchte Korrelation als

$$\langle A(t + \tau)B(t) \rangle = \text{Sp}_S(A(\tau)B(0)\varrho_S(t)) \quad (3.66)$$

geschrieben werden. Die Dynamik von Zwei-Zeiten-Observablen wird also mit Hilfe derselben reduzierten Bewegungsgleichung berechnet, wie die von Ein-Zeiten-Observablen. Dieser Zusammenhang wird Quanten-Regressions-Theorem genannt (s. z. B. [16]).

3.4 Darstellung der Mastergleichung

Die Bewegungsgleichung für die reduzierte Dichte soll nun weiter vereinfacht werden. Am Ende dieser Betrachtung wird die konkrete Form der Mastergleichung für die reduzierte Dichte stehen, in der an Stelle abstrakter Superoperatoren Operatoren und Parameter stehen, die sich aus dem angesetzten Hamiltonoperator und dem Zustand des Gesamtsystems ergeben.

Wird die Bewegungsgleichung (3.51) mit dem unitären Anteil

$$-i\mathcal{L}_S\varrho_S(t) = \frac{[H_S, \varrho_S(t)]}{i\hbar} \quad (3.67)$$

und dem dissipativem Anteil (Gl. 3.50) betrachtet, so ergibt sich mit der Definition des Projektors (Gl. 3.27) und $\tilde{\mathcal{L}}_W(t) = \hbar^{-1}[\tilde{H}_W(t), \cdot]$

$$\dot{\varrho}_S(t) = \frac{[H_S, \varrho_S(t)]}{i\hbar} - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \text{Sp}_B \left\{ [\tilde{H}_W(0), [\tilde{H}_W(-\tau), \varrho_B(0) \otimes \varrho_S(t)]] \right\} \quad (3.68)$$

Der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator H_W kann in Bad- und Systemanteil aufgespalten werden. Hierbei bieten sich Übergangoperatoren $S_{nm} = |n\rangle_{SS}\langle m|$ zwischen Eigenzuständen des System-Hamiltonoperators H_S an, da diese Eigenoperatoren zum Liouville-Operator des System \mathcal{L}_S sind (Gl. 2.7) und ihre freie Zeitentwicklung daher durch die Bohr-Frequenzen ω_{nm} gegeben ist. Sie bilden eine Basis des System-Liouvillerraums \mathcal{L}_S . Folglich gilt

$$|H_W) = \sum_{n,m} |S_{nm})(S_{nm}|H_W) \quad , \quad (3.69)$$

wobei

$$(S_{nm}|H_W) = \text{Sp}_S(|m\rangle_{SS}\langle n|H_W) = {}_S\langle n|H_W|m\rangle_S \equiv \hbar\kappa B_{nm} \quad (3.70)$$

noch ein Operator auf dem Bad-Hilbertraum ist, von dem eine geeignete charakteristische Energie $\hbar\kappa$ abgespalten wird. Mit dem Übergangsindex $k = \{n, m\}$ kann die Wechselwirkung dann als

$$H_W = \hbar\kappa \sum_k S_k \otimes B_k \quad (3.71)$$

geschrieben werden.

Diese Zerlegung wird nun in Gleichung (3.68) eingesetzt. Damit wird

$$\begin{aligned} & \hbar^{-2} [\tilde{H}_W(0), [\tilde{H}_W(-\tau), \varrho_B(0) \otimes \varrho_S(t)]] \\ &= \kappa^2 \sum_{k,k'} [\tilde{B}_k(0) \otimes \tilde{S}_k(0), [\tilde{B}_{k'}(-\tau) \otimes \tilde{S}_{k'}(-\tau), \varrho_B(0) \otimes \varrho_S(t)]] \\ &= \kappa^2 \sum_{k,k'} \tilde{B}_k(0) \tilde{B}_{k'}(-\tau) \varrho_B(0) \otimes \tilde{S}_k(0) \tilde{S}_{k'}(-\tau) \varrho_S(t) \\ & \quad - \tilde{B}_{k'}(-\tau) \varrho_B(0) \tilde{B}_k(0) \otimes \tilde{S}_{k'}(-\tau) \varrho_S(t) \tilde{S}_k(0) \\ & \quad - \tilde{B}_k(0) \varrho_B(0) \tilde{B}_{k'}(-\tau) \otimes \tilde{S}_k(0) \varrho_S(t) \tilde{S}_{k'}(-\tau) \\ & \quad + \varrho_B(0) \tilde{B}_{k'}(-\tau) \tilde{B}_k(0) \otimes \varrho_S(t) \tilde{S}_{k'}(-\tau) \tilde{S}_k(0) \quad . \end{aligned} \quad (3.72)$$

Die Kopplung ist insgesamt hermitisch; daher taucht in der Summe über k zu jedem Term $\tilde{B}_k(t) \otimes \tilde{S}_k(t)$ der entsprechende adjungierte $\tilde{B}_k^\dagger(t) \otimes \tilde{S}_k^\dagger(t)$ auf. Die Summationsreihenfolge wird nun so umgestellt, dass in den beiden letzten Zeilen jeder Operator durch sein Adjunkt ersetzt wird. Dann sind die beiden letzten Zeilen zu den ersten beiden hermitisch adjungiert. In Gleichung (3.68) können nun die Systemoperatoren aus der Spur herausgezogen und die Badoperatoren unter der Spur zyklisch vertauscht werden, so dass sich schreiben lässt

$$\begin{aligned} \dot{\varrho}_S(t) &= \frac{[H_S, \varrho_S(t)]}{i\hbar} \\ & \quad + \kappa^2 \sum_{k,k'} \int_0^\infty d\tau \text{Sp}_B \{ \tilde{B}_k(0) \tilde{B}_{k'}(-\tau) \varrho_B(0) \} \left[\tilde{S}_{k'}(-\tau) \varrho_S(t), \tilde{S}_k(0) \right] + \text{h.c.} \end{aligned} \quad (3.73)$$

Nun werden die Korrelationsfunktionen $\text{Sp}_B \{ \tilde{B}_k(0) \tilde{B}_{k'}(-t) \varrho_B(0) \}$ betrachtet. Da $[H_B, \varrho_B(0)] = 0$ angenommen ist (Gl. 3.30), können die Zeitargumente verschoben werden:

$$\text{Sp}_B \{ \tilde{B}_k(0) \tilde{B}_{k'}(-t) \varrho_B(0) \} = \text{Sp}_B \{ \tilde{B}_k(t) \tilde{B}_{k'}(0) \varrho_B(0) \} \equiv g_{kk'}(t) \quad . \quad (3.74)$$

Wenn die Badanteile der Kopplung B_k (Gl. 3.70) jeweils an viele Umgebungsmoden angreifen – wie es bei einem makroskopischem Bad der Fall sein sollte – so

fallen deren Korrelationsfunktionen $g_{kk'}(t)$ schnell auf Null. Die langlebigste dieser Korrelationen bestimmt die Gedächtniszeit τ_c , die in die Markow-Näherung (Gl. 3.46) eingeht.

Wird nun noch die Zeitabhängigkeit der Systemoperatoren $\tilde{S}_k(t) = e^{i\omega_k t} S_k$ genutzt, so ergibt sich

$$\dot{\varrho}_S(t) = \frac{[H_S, \varrho_S(t)]}{i\hbar} + \kappa^2 \sum_{k,k'} G_{kk'}(-\omega_{k'}) \left[S_{k'} \varrho_S(t), S_k \right] + \text{h.c.} \quad , \quad (3.75)$$

mit der Spektralfunktion

$$G_{kk'}(\omega) \equiv \int_0^\infty dt e^{i\omega t} g_{kk'}(t) \quad . \quad (3.76)$$

Deren Real- und Imaginärteil sind durch eine Kramers-Kronig-Relation miteinander verknüpft:

$$\text{Re } G_{kk'}(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} g_{kk'}(t) = \frac{1}{\pi} \text{P} \int_{-\infty}^\infty d\omega' \frac{\text{Im } G_{kk'}(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (3.77)$$

$$\text{Im } G_{kk'}(\omega) = - \frac{1}{\pi} \text{P} \int_{-\infty}^\infty d\omega' \frac{\text{Re } G_{kk'}(\omega')}{\omega' - \omega} \quad . \quad (3.78)$$

3.4.1 Lindblad-Bedingungen

Die Gleichung (3.75) kann allerdings nur die gesuchte Bewegungsgleichung sein, wenn sie die Lindblad-Bedingungen (Gln. 2.32, 2.35, 2.36) erfüllt. Das soll nun überprüft werden. Die durch $-i\mathcal{L}_S$ erzeugte freie Dynamik des Systems ist unitär und muss somit nicht näher betrachtet werden. Der Einfluss der Umgebung spiegelt sich in

$$-i\mathcal{L}_d = \kappa^2 \sum_{kk'} G_{kk'}(-\omega_{k'}) \left[S_{k'} \cdot, S_k \right] + G_{kk'}^*(-\omega_{k'}) \left[S_k^\dagger, \cdot S_{k'}^\dagger \right] \quad (3.79)$$

wider. Die Lindblad-Bedingungen (Gln. 2.32, 2.35, 2.36) sind für den adjungierten Superoperator im Heisenbergbild

$$i\mathcal{L}_d^* = \kappa^2 \sum_{kk'} G_{kk'}(-\omega_{k'}) \left[S_k, \cdot \right] S_{k'} + G_{kk'}^*(-\omega_{k'}) S_{k'}^\dagger \left[\cdot, S_k^\dagger \right] \quad (3.80)$$

formuliert. Die ersten zwei Lindblad-Bedingungen (Erhaltung von Norm und Hermitizität) sind erfüllt – wie leicht zu sehen ist. Soll die Dynamik vollständig positiv sein, muss

$$\begin{aligned} & i\mathcal{L}_d^* A^\dagger A - (i\mathcal{L}_d^* A^\dagger) A - A^\dagger i\mathcal{L}_d^* A \\ &= \kappa^2 \sum_{kk'} G_{kk'}(-\omega_{k'}) \left\{ \left[S_k, A^\dagger A \right] S_{k'} - \left[S_k, A^\dagger \right] S_{k'} A - A^\dagger \left[S_k, A \right] S_{k'} \right\} + \text{h.c.} \\ &= \kappa^2 \sum_{kk'} G_{kk'}(-\omega_{k'}) \left[S_k, A^\dagger \right] \left[A, S_{k'} \right] + \text{h.c.} \end{aligned} \quad (3.81)$$

für jeden Testoperator A positiv sein. Dies ist aber nur genau dann der Fall, wenn der Realteil der Spektralfunktion positiv ist und nur Summanden mit $S_{k'} = S_k^\dagger$ beitragen.

□ Zunächst wird die Positivität von Summanden mit $S_{k'} = S_k^\dagger$ bewiesen. Mit $C_k = [A, S_k^\dagger]$ haben sie die Form

$$\kappa^2 G_{k-k}(\omega_k) C_k^\dagger C_k + \text{h.c.} \quad , \quad (3.82)$$

sind also wegen $\langle \phi | C_k^\dagger C_k | \phi \rangle \geq 0$ positiv, wenn der Realteil der Spektralfunktion positiv ist.

Umgekehrt dürfen zu einer positiven Dynamik keine Summanden mit $S_{k'} \neq S_k^\dagger$ beitragen, wie durch einen Test mit $A = H_S$ bewiesen wird. H_S bietet sich an, da seine Vertauschrelationen mit den S_k bekannt sind (Gl. 2.7):

$$[H_S, S_k] = \hbar \mathcal{L}_S S_k = \hbar \omega_k S_k \quad . \quad (3.83)$$

Ausgehend von Gleichung (3.81) ergibt sich

$$\begin{aligned} & \kappa^2 \sum_{k \neq -k'} G_{kk'}(-\omega_{k'}) [S_k, H_S] [H_S, S_{k'}] + \text{h.c.} \\ & = -\hbar^2 \kappa^2 \sum_{nm \neq m'n'} G_{nm, n'm'}(-\omega_{n'm'}) \omega_{nm} \omega_{n'm'} |n\rangle \langle m| n'\rangle \langle m'| + \text{h.c.} \end{aligned} \quad (3.84)$$

wenn man die Übergangsindizes k durch die Niveauidizes n, m ausdrückt. Die Erwartungswerte dieses Operators bezüglich der Zustände $|\phi_\pm\rangle = (|i\rangle \pm |j\rangle)/\sqrt{2}$

$$\langle \phi_\pm | \dots | \phi_\pm \rangle = \mp \hbar^2 \kappa^2 \sum_m G_{im, mj}(-\omega_{mj}) \omega_{im} \omega_{mj} + G_{jm, mi}(-\omega_{mi}) \omega_{jm} \omega_{mi} + \text{h.c.} \quad (3.85)$$

haben unterschiedliches Vorzeichen, der Operator ist also nicht positiv. ■

Eine physikalisch sinnvolle Dynamik ergibt sich also nur, wenn die Summation in den Gleichungen (3.79) und (3.80) durch die Bedingung $S_{k'} = S_k^\dagger$ eingeschränkt wird. Wie im Folgenden gezeigt wird, kann diese Beschränkung gewöhnlich durch den vernachlässigbar kleinen Einfluss der weggelassenen Terme physikalisch gerechtfertigt werden.

3.4.2 Säkularnäherung

Wird die Bewegungsgleichung (3.75) im Wechselwirkungsbild dargestellt,

$$\dot{\tilde{Q}}_S(t) = \kappa^2 \sum_{k, k'} e^{i(\omega_k + \omega_{k'})t} G_{kk'}(-\omega_{k'}) [S_{k'} \tilde{Q}_S(t), S_k] + \text{h.c.} \quad , \quad (3.86)$$

so zeigt sich – wie bei der Markow-Näherung – eine Zeitabhängigkeit auf stark unterschiedlichen Skalen: Die Dynamik des Dichteoperators ist im Wechselwirkungsbild gewöhnlich viel langsamer als die Systemfrequenzen ω_k . Daher kann die Bewegung auf einer groben Zeitskala Δt betrachtet werden:

$$\frac{\Delta \tilde{\varrho}_S(t)}{\Delta t} = \frac{\tilde{\varrho}_S(t + \Delta t/2) - \tilde{\varrho}_S(t - \Delta t/2)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2} dt' \dot{\tilde{\varrho}}_S(t') \quad . \quad (3.87)$$

Rechts darf Gleichung (3.86) eingesetzt und dabei ähnlich wie bei der Markow-Näherung $\tilde{\varrho}_S(t') \approx \tilde{\varrho}_S(t)$ als konstant angenommen und aus dem Integral gezogen werden,

$$\frac{\Delta \tilde{\varrho}_S(t)}{\Delta t} = \kappa^2 \sum_{k,k'} G_{kk'}(-\omega_{k'}) \left[S_{k'} \tilde{\varrho}_S(t), S_k \right] \frac{1}{\Delta t} \int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2} dt' e^{i(\omega_k + \omega_{k'})t'} + \text{h.c.} \quad (3.88)$$

Das Integral

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2} dt' e^{i(\omega_k + \omega_{k'})t'} = \frac{\sin[(\omega_k + \omega_{k'})\Delta t/2]}{(\omega_k + \omega_{k'})\Delta t/2} e^{i(\omega_k + \omega_{k'})t} \quad (3.89)$$

verschwindet für $|\omega_k + \omega_{k'}|\Delta t \gg 1$, liegt aber für $|\omega_k + \omega_{k'}|\Delta t \ll 1$ dicht bei 1. Auf einer Zeitskala, die langsamer als die Schwebungen $\omega_k + \omega_{k'}$ von Systemfrequenzen ist, tragen nur noch die Summanden bei, bei denen $\omega_{k'} = -\omega_k$ ist. Sind die Übergangsoperatoren S_k eindeutig durch ihre Bohr-Frequenz bestimmt, muss also $S_{k'} = S_k^\dagger$ gelten. Dies ist die sogenannte „Säkularnäherung“. Die nun auftretenden Spektralfunktionen $G_{k-k}(\omega_k)$ lassen sich noch vereinfachen, wenn der Systemanteil der Wechselwirkung selbstadjungiert ist. Dann koppeln nämlich S_k und S_k^\dagger identisch an das Bad an und es gilt $G_{k-k} = G_{kk}$. Damit ergibt sich aus Gleichung (3.79) der Lindblad-Operator

$$-i\mathcal{L}_d = \kappa^2 \sum_k G_{kk}(\omega_k) \left[S_k^\dagger \cdot, S_k \right] + G_{kk}^*(\omega_k) \left[S_k^\dagger, \cdot S_k \right] \quad . \quad (3.90)$$

Mit den Bezeichnungen

$$\Gamma_k \equiv 2\kappa^2 \text{Re } G_{kk}(\omega_k) \quad , \quad \Delta_k \equiv \kappa^2 \text{Im } G_{kk}(\omega_k) \quad (3.91)$$

wird der Lindblad-Operator in die Form

$$\begin{aligned} -i\mathcal{L}_d &= \sum_k \left(\frac{1}{2}\Gamma_k + i\Delta_k \right) \left(S_k^\dagger \cdot S_k - S_k S_k^\dagger \cdot \right) + \left(\frac{1}{2}\Gamma_k - i\Delta_k \right) \left(S_k^\dagger \cdot S_k - \cdot S_k S_k^\dagger \right) \\ &= \sum_k \frac{1}{i\hbar} \left[\hbar\Delta_k S_k S_k^\dagger, \cdot \right] - \frac{1}{2}\Gamma_k \left(S_k S_k^\dagger \cdot + \cdot S_k S_k^\dagger - 2S_k^\dagger \cdot S_k \right) \quad (3.92) \end{aligned}$$

gebracht, dessen Struktur nun auch der geforderten (Gl. 2.37) entspricht. Die Imaginärteile Δ_k der Spektralfunktionen bestimmen den selbstadjungierten Anteil von \mathcal{L}_d und modifizieren damit die Eigenwerte des freien Hamiltonoperators – sie beschreiben Frequenzverschiebungen. Die Realteile Γ_k stellen die durch die Umgebung induzierten Übergangsraten im System dar.

Der Lindblad-Operator hängt aufgrund der Säkularnäherung auch im Wechselwirkungsbild nicht von der Zeit ab: Er vertauscht mit \mathcal{L}_S , woraus $\tilde{\mathcal{L}}_d = \mathcal{L}_d$ folgt. Für die Zeitabhängigkeit der Dichte im Schrödingerbild gilt damit (Gl. 3.75)

$$\dot{\varrho}_S(t) = -i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d)\varrho_S(t) \quad \Leftrightarrow \quad \varrho_S(t) = e^{-i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d)t} \varrho_S(0) \quad . \quad (3.93)$$

Diese Mastergleichung gilt allerdings nur für $t > 0$, denn die durch $-i\mathcal{L}_d$ erzeugte dissipative Dynamik bildet eine Halbgruppe und zeichnet damit diese Zeitrichtung aus. Im Heisenbergbild bestimmt der adjungierte Lindblad-Operator (Gl. 2.38)

$$\begin{aligned} i\mathcal{L}_d^* &= \kappa^2 \sum_k G_{kk}(\omega_k) \left[S_k, \cdot \right] S_k^\dagger + G_{kk}^*(\omega_k) S_k \left[\cdot, S_k^\dagger \right] \\ &= \sum_k \frac{i}{\hbar} \left[\hbar \Delta_k S_k S_k^\dagger, \cdot \right] - \frac{1}{2} \Gamma_k \left(S_k S_k^\dagger \cdot + \cdot S_k S_k^\dagger - 2 S_k \cdot S_k^\dagger \right) \end{aligned} \quad (3.94)$$

zusammen mit dem (selbstadjungierten) Liouville-Operator des Systems die Dynamik

$$\dot{A}_S(t) = i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d^*)A_S(t) \quad \Leftrightarrow \quad A_S(t) = e^{i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d^*)t} A_S(0) \quad (3.95)$$

der System-Operatoren (für $t > 0$).

3.5 Erweiterung der Markow-Näherung

Bei der Markow-Näherung wurde in Gleichung (3.45) $\mathcal{P}\tilde{\varrho}(t - \tau) \approx \mathcal{P}\tilde{\varrho}(t)$ angenommen. Dies soll nun durch

$$\mathcal{P}\tilde{\varrho}(t - \tau) \approx \mathcal{P}\tilde{\varrho}(t) - \tau \mathcal{P}\dot{\tilde{\varrho}}(t) \quad \text{für} \quad \tau \lesssim \tau_C \quad , \quad (3.96)$$

also durch eine lineare Näherung in τ , verbessert werden. Der neu hinzugekommene lineare Term in τ führt gegenüber Gleichung (3.47) zu einer Korrektur

$$\mathcal{P}\dot{\tilde{\varrho}}(t) = -i\tilde{\mathcal{L}}_d(t) \mathcal{P}\tilde{\varrho}(t) + \tilde{\mathcal{L}}_{\text{NM}}(t) \mathcal{P}\tilde{\varrho}(t) \quad (3.97)$$

mit dem Nicht-Markowschen Superoperator

$$\tilde{\mathcal{L}}_{\text{NM}}(t) = \int_0^t d\tau \tau \mathcal{P}\tilde{\mathcal{L}}_W(t) \tilde{\mathcal{L}}_W(t - \tau) \mathcal{P} \quad . \quad (3.98)$$

Die Korrektur sollte klein im Vergleich zu $\mathcal{P}\dot{\tilde{\varrho}}(t)$ sein (sonst würde der Ansatz (Gl. 3.96) keine Verbesserung bedeuten), folglich gilt auch :

$$\mathcal{P}\dot{\tilde{\varrho}}(t) = (1 - \tilde{\mathcal{L}}_{\text{NM}}(t))^{-1} (-i\tilde{\mathcal{L}}_{\text{d}}(t)) \mathcal{P}\tilde{\varrho}(t) \approx -i(1 + \tilde{\mathcal{L}}_{\text{NM}}(t)) \tilde{\mathcal{L}}_{\text{d}}(t) \mathcal{P}\tilde{\varrho}(t). \quad (3.99)$$

\mathcal{L}_{NM} kann nun, wie vorher der Lindblad-Operator (Gl. 3.90), berechnet werden. Der Faktor τ führt dabei anstelle der Spektralfunktion (Gl. 3.76) auf deren Ableitung:

$$\int_0^\infty d\tau \tau e^{-i\omega_{k'}\tau} g_{kk'}(\tau) = i \frac{\partial}{\partial i\omega} G_{kk'}(\omega) \Big|_{-\omega_{k'}} \equiv -i\partial_\omega G_{kk'}(-\omega_{k'}) \quad (3.100)$$

Damit ergibt sich bis auf Einschalteffekte (s. 3.3.1) mit der Säkularnäherung (s. 3.4.2)

$$\mathcal{L}_{\text{NM}} = i\kappa^2 \sum_k \partial_\omega G_{kk}(\omega_k) \left[S_k^\dagger \cdot, S_k \right] - \partial_\omega G_{kk}^*(\omega_k) \left[S_k^\dagger, \cdot S_k \right] . \quad (3.101)$$

Wie schon beim Lindblad-Operator gilt auch $\tilde{\mathcal{L}}_{\text{NM}}(t) = \mathcal{L}_{\text{NM}}$, da er aufgrund der Säkularnäherung mit \mathcal{L}_{S} vertauscht werden kann. Insgesamt ergibt sich also für die Zeitabhängigkeit der Dichte im Schrödingerbild

$$\dot{\varrho}_{\text{S}}(t) = -i(\mathcal{L}_{\text{S}} + (1 + \mathcal{L}_{\text{NM}})\mathcal{L}_{\text{d}}) \varrho_{\text{S}}(t) \Leftrightarrow \varrho_{\text{S}}(t) = e^{-i(\mathcal{L}_{\text{S}} + (1 + \mathcal{L}_{\text{NM}})\mathcal{L}_{\text{d}})t} \varrho_{\text{S}}(0) \quad (3.102)$$

und entsprechend für Systemoperatoren im Heisenbergbild

$$\dot{A}_{\text{S}}(t) = i(\mathcal{L}_{\text{S}} + \mathcal{L}_{\text{d}}^*(1 + \mathcal{L}_{\text{NM}}^*)) A_{\text{S}}(t) \Leftrightarrow A_{\text{S}}(t) = e^{i(\mathcal{L}_{\text{S}} + \mathcal{L}_{\text{d}}^*(1 + \mathcal{L}_{\text{NM}}^*))t} A_{\text{S}}(0) . \quad (3.103)$$

Die Herleitung dieser Korrektur gegenüber den Gleichungen (3.93) und (3.95) ist allerdings zu oberflächlich, insofern stillschweigend die Gültigkeit der anderen Näherungen vorausgesetzt wurde. Dies ist aber sowohl bei der Säkularnäherung als auch bei der Born-Näherung problematisch. Diese Schwierigkeiten werden in den folgenden Abschnitten näher betrachtet.

3.5.1 Säkular- und erweiterte Markow-Näherung

In der bisherigen Darstellung wurde sowohl von \mathcal{L}_{d} als auch von \mathcal{L}_{NM} nur der in der freien Dynamik stationäre, also der mit \mathcal{L}_{S} vertauschende Anteil berücksichtigt. Dies geschah aus zwei Gründen: Einerseits erfüllt \mathcal{L}_{d} nur so die Lindblad-Bedingungen – wobei es besonders auf die Positivität der Dichte (s. Abschnitt 3.4.1) ankommt. Andererseits können die nicht stationären Anteile von \mathcal{L}_{d} auf einer Zeitskala $\Delta t \gg \omega_k^{-1}$ vernachlässigt werden (Säkularnäherung, s. Abschnitt 3.4.2).

Diese Argumentation wurde auf \mathcal{L}_{NM} übertragen, wobei sich allerdings folgende Schwierigkeiten ergeben: In der Bewegungsgleichung (3.102) taucht nicht

\mathcal{L}_{NM} allein, sondern das Produkt $\mathcal{L}_{\text{NM}}\mathcal{L}_{\text{d}}$ auf – daher muss dessen Positivität bzw. Zeitabhängigkeit untersucht werden.

Das Produkt der jeweils stationären Anteile von \mathcal{L}_{S} und \mathcal{L}_{NM} vertauscht ebenfalls mit \mathcal{L}_{S} :

$$[\mathcal{L}_{\text{d}}, \mathcal{L}_{\text{S}}] = [\mathcal{L}_{\text{NM}}, \mathcal{L}_{\text{S}}] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\mathcal{L}_{\text{NM}}\mathcal{L}_{\text{d}}, \mathcal{L}_{\text{S}}] = 0 \quad . \quad (3.104)$$

Dies gilt allerdings nicht umgekehrt: Die Zeitabhängigkeit der Faktoren hebt sich teilweise gegenseitig auf. Dies wird deutlich, wenn bei der Herleitung der nicht-markowschen Korrekturen zunächst auf die Säkularnäherung verzichtet wird. Mit der Zerlegung der Kopplung (Gl. 3.71) ergibt sich (bis auf Einschalteneffekte) aus Gleichung (3.99) für die nicht-markowsche Korrektur gegenüber Gleichung (3.86)

$$\dot{\tilde{\varrho}}_{\text{S,NM}}(t) = i\kappa^2 \sum_{k,k'} e^{i(\omega_k + \omega_{k'})t} \partial_\omega G_{kk'}(-\omega_{k'}) \left[S_{k'} \dot{\tilde{\varrho}}_{\text{S}}(t), S_k \right] + \text{h.c.}, \quad (3.105)$$

wobei $\tilde{\varrho}_{\text{S}}(t)$ durch Gleichung (3.86) gegeben ist. Dies führt auf

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\varrho}}_{\text{S,NM}}(t) &= i\kappa^2 \sum_{k,k'} e^{i(\omega_k + \omega_{k'})t} \partial_\omega G_{kk'}(-\omega_{k'}) \\ &\quad \left[S_{k'} \left\{ \kappa^2 \sum_{l,l'} e^{i(\omega_l + \omega_{l'})t} G_{ll'}(-\omega_{l'}) \left[S_{l'} \tilde{\varrho}_{\text{S}}(t), S_l \right] + \text{h.c.} \right\}, S_k \right] + \text{h.c.} \\ &= i\kappa^4 \sum_{k,k',l,l'} e^{i(\omega_k + \omega_{k'} + \omega_l + \omega_{l'})t} \left\{ \right. \\ &\quad \partial_\omega G_{kk'}(-\omega_{k'}) G_{ll'}(-\omega_{l'}) \left[S_{k'} \left[S_{l'} \tilde{\varrho}_{\text{S}}(t), S_l \right], S_k \right] \\ &\quad \left. - \partial_\omega G_{kk'}(-\omega_{k'}) G_{ll'}^*(+\omega_{l'}) \left[S_{k'} \left[\tilde{\varrho}_{\text{S}}(t) S_{l'}, S_l \right], S_k \right] \right\} + \text{h.c.}, \quad (3.106) \end{aligned}$$

wobei in der letzten Zeile die Summationsreihenfolge umgestellt ($S_{l,l'}^\dagger \rightarrow S_{l,l'}$, s. Bem. nach Gl. 3.72) und $G_{-l,-l'} = G_{l,l'}$ (s. Bem. vor Gl. 3.90) ausgenutzt wurde. Die Summanden, bei denen sowohl $S_{l'} = S_l^\dagger$ als auch $S_{k'} = S_k^\dagger$ gilt, sind in Gleichung (3.102), also bei „getrennter“ Säkularnäherung von \mathcal{L}_{d} und \mathcal{L}_{NM} , berücksichtigt. Offensichtlich tragen jedoch auch Summanden mit $S_{l'} = S_k^\dagger$ und $S_{k'} = S_l^\dagger$ bzw. $S_{l'} = S_{k'}^\dagger$ und $S_l = S_k^\dagger$ zeitunabhängig bei, denn es kommt nur auf die gemeinsame Resonanzbedingung $\omega_k + \omega_{k'} + \omega_l + \omega_{l'} = 0$ an. Eine Bewegungsgleichung mit „gemeinsamer“ Säkularnäherung enthält also mehr Terme, als Gleichung (3.102). Dies wurde von anderen Autoren, die von einem ähnlichen Ansatz ausgehen [17], nicht berücksichtigt.

Bei beiden Formen der verbesserten Mastergleichung (Gln. 3.102, 3.106) bleibt jedoch die Frage nach der konsistenten Darstellung offen: Über die Erhaltung der Positivität der Dichte können an dieser Stelle keine allgemeingültigen Aussagen

gemacht werden. Die Frage, ob die Positivität des Produktes $\mathcal{L}_{\text{NM}}\mathcal{L}_{\text{d}}$ die getrennte Positivität von \mathcal{L}_{d} und \mathcal{L}_{NM} erfordert (und damit durch eine „getrennte“ Säkularnäherung erreicht werden kann), konnte bisher nicht beantwortet werden. Es bleibt damit bei der Anwendung auf ein konkretes Modellsystem im Einzelfall zu prüfen, ob die jeweilige Bewegungsgleichung die Positivität der Dichte garantiert.

3.5.2 Born- und erweiterte Markow-Näherung

Ausgangspunkt der Herleitung der Mastergleichung war die Zwanzig-Gleichung im Wechselwirkungsbild *in Born-Näherung*, d.h. genähert in zweiter Ordnung der Kopplung. Die gegenüber der Markow-Näherung verbesserten Anteile in den Gleichungen (3.102) und (3.103) sind aber vierter Ordnung in der Kopplung, da sowohl \mathcal{L}_{d} (Gl. 3.90) als auch \mathcal{L}_{NM} (Gl. 3.101) proportional zum Quadrat der Kopplungskonstanten κ sind. Vermutlich ist also die Mastergleichung (Gl. 3.93) in zweiter Ordnung exakt ist und die Markow-Annahme stellt somit keine weitere Näherung dar. Eine Bestätigung dieser Vermutung ergibt sich aus der exakten Zwanzig-Gleichung (3.40). Diese kann mit dem Zeitentwicklungsoperator $e^{i\mathcal{L}\tau}$ formal in eine markowsche Form gebracht werden

$$\mathcal{P} \dot{\varrho}(t) = -i\mathcal{L}_{\text{S}}\mathcal{P} \varrho(t) - \int_0^t d\tau \mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{W}} e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}\tau} \mathcal{L}_{\text{W}}\mathcal{P} e^{i\mathcal{L}\tau} \varrho(t) \quad , \quad (3.107)$$

was zunächst allerdings nutzlos erscheint, denn es handelt sich nun nicht mehr um eine geschlossene Bewegungsgleichung für die relevante Dichte $\mathcal{P}\varrho$ – zur Lösung wäre die Kenntnis der vollen Dichte zum Zeitpunkt t nötig. Geht man jedoch bei der Born-Näherung von dieser Gleichung aus, so ergibt sich in zweiter Ordnung in \mathcal{L}_{W} mit Gleichung (3.42)

$$\mathcal{P} \dot{\varrho}(t) = -i\mathcal{L}_{\text{S}}\mathcal{P} \varrho(t) - \int_0^t d\tau \mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{W}} e^{-i\mathcal{L}_0\tau} \mathcal{L}_{\text{W}}\mathcal{P} e^{i\mathcal{L}_0\tau} \varrho(t) \quad . \quad (3.108)$$

Da der freie Liouville-Operator \mathcal{L}_0 im Gegensatz zu dem mit Kopplung \mathcal{L} mit dem Projektor \mathcal{P} vertauscht, entspricht dies genau dem Ergebnis der Markow-Näherung (Gl. 3.47). Gedächtniseffekte, also der Einfluss der *Änderung* der relevanten Dichte in der Vergangenheit, treten in zweiter Ordnung der Kopplung nicht auf. Dies ist verständlich, da solche Änderungen nur durch Wechselwirkung mit der Umgebung zustande kommen (die freie Dynamik tritt in der Beschreibung im Wechselwirkungsbild nicht auf) und daher höherer Ordnung sind. Das Zeitargument der Dichte kann mit dem Zeitverschiebungsoperator sogar zu beliebigen Werten t' verschoben werden, wobei in dieser Ordnung gilt

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{W}} e^{-i\mathcal{L}_0\tau} \mathcal{L}_{\text{W}}\mathcal{P} \varrho(t - \tau) \approx \mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{W}} e^{-i\mathcal{L}_0\tau} \mathcal{L}_{\text{W}} e^{-i\mathcal{L}_0(t-\tau-t')} \mathcal{P} \varrho(t') \quad . \quad (3.109)$$

Die entsprechenden Bewegungsgleichungen sind zwar in Born-Näherung identisch; sie unterscheiden sich aber in höherer Ordnung erheblich und sind daher verschieden sinnvoll. Jede Gleichung, die sich auf eine feste Zeit bezieht (z. B. $t' = 0$),

wird nur in der Nähe dieser Zeit physikalische Lösungen liefern: Dissipativ ändert sich $\mathcal{P}\rho(t)$ (für $t \gtrsim \tau_c$) linear mit der Zeit, was zu einer Verletzung der Positivität führt. Hier summieren sich die Abweichungen der höheren Ordnungen mit der Zeit auf.

Die geringste Abweichung in höherer Ordnung wird die ursprüngliche Gleichung (3.43) zeigen, denn bei ihr ist keine weitere Näherung (Gl. 3.109) nötig. Abgesehen von der Schwierigkeit, diese Integrodifferentialgleichung zu lösen, ist aber nicht klar, ob sie die Eigenschaften der Dichte, insbesondere die Positivität, bewahrt.

Somit ist die markowsche Mastergleichung (Gl. 3.47, bzw. Gl. 3.108) die beste Bewegungsgleichung in Born-Näherung, denn sie lässt sich mit der Säkularnäherung in Lindblad-Form bringen und garantiert so die wichtigen Eigenschaften der Dichte.

Da eine Verbesserung der markowschen Mastergleichung nur in höherer Ordnung der Kopplung möglich ist, muss diese bereits bei der Entwicklung der Zwanzig-Gleichung (3.40) berücksichtigt werden. Hierzu wird der Superoperator $e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}t} = e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_0t - i\mathcal{Q}\mathcal{L}_Wt}$ mit Hilfe der Kubo-Identität (s. Anhang A) in zweiter Ordnung in \mathcal{L}_W entwickelt :

$$\begin{aligned} e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}t} &= e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_0t} + \int_0^t dt' e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_0t'} (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_W) e^{i\mathcal{Q}\mathcal{L}_0(t'-t)} \\ &\quad + \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_0t''} (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_W) e^{i\mathcal{Q}\mathcal{L}_0(t''-t')} (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_W) e^{i\mathcal{Q}\mathcal{L}_0(t'-t)} \quad . \end{aligned} \quad (3.110)$$

Dies führt mit $\mathcal{Q}\mathcal{L}_0 = \mathcal{L}_0\mathcal{Q}$ und $\mathcal{P}\mathcal{L}_W\mathcal{P} = 0$ auf

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\mathcal{L}_W e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}t} \mathcal{L}_W \mathcal{P} &= \mathcal{P}\mathcal{L}_W e^{-i\mathcal{L}_0t} \mathcal{L}_W \mathcal{P} - i \int_0^t dt' \mathcal{P}\mathcal{L}_W e^{-i\mathcal{L}_0t'} \mathcal{L}_W e^{i\mathcal{L}_0(t'-t)} \mathcal{L}_W \mathcal{P} \\ &\quad - \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \mathcal{P}\mathcal{L}_W e^{-i\mathcal{L}_0t''} \mathcal{L}_W e^{i\mathcal{L}_0t''} \mathcal{Q} e^{-i\mathcal{L}_0t'} \mathcal{L}_W e^{i\mathcal{L}_0(t'-t)} \mathcal{L}_W \mathcal{P}. \end{aligned} \quad (3.111)$$

Wenn die Umgebung gaußsche Fluktuationen zeigt (s. 4.2), verschwinden alle ungeraden Korrelationsfunktionen, also auch die Korrektur dritter Ordnung in \mathcal{L}_W . In der Korrektur vierter Ordnung wird noch \mathcal{Q} durch $1 - \mathcal{P}$ ersetzt, was mit $\mathcal{P}\rho(t - \tau) \approx e^{i\mathcal{L}_0\tau} \mathcal{P}\rho(t)$ auf den Superoperator 4ter-Ordnung

$$\begin{aligned} -i\mathcal{L}_{40}(t) &= \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' \int_0^{\tau'} d\tau'' \mathcal{P}\tilde{\mathcal{L}}_W(0)\tilde{\mathcal{L}}_W(-\tau'') \tilde{\mathcal{L}}_W(-\tau')\tilde{\mathcal{L}}_W(-\tau)\mathcal{P} \\ &\quad - \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' \int_0^{\tau'} d\tau'' \mathcal{P}\tilde{\mathcal{L}}_W(0)\tilde{\mathcal{L}}_W(-\tau'')\mathcal{P}\tilde{\mathcal{L}}_W(-\tau')\tilde{\mathcal{L}}_W(-\tau)\mathcal{P} \end{aligned} \quad (3.112)$$

führt. In dieser Arbeit wird diese Korrektur nicht weiter berücksichtigt, da hier keine vollständige Beschreibung in vierter Ordnung erfolgen, sondern Gedächtniseffekte untersucht werden sollen. Daher beschränkt sich die weitere Beschreibung auf die nicht-markowsche Korrektur (Gl. 3.102, 3.103). Zu der markowschen Korrektur vierter Ordnung (Gl. 3.112) sollen aber noch zwei Bemerkungen gemacht werden: Zum einen führt die vierfache Wechselwirkung in der ersten Zeile auf Korrelationsfunktionen von vier Badoperatoren $\langle B_{k_1}(0)B_{k_2}(-\tau)B_{k_3}(-\tau')B_{k_4}(-\tau'') \rangle$, die sich bei gaußschen Fluktuationen (s. 4.2) durch Produkte von Zweierkorrelationen darstellen lassen. So kann die erste Zeile zusammen mit der zweiten sicher weiter vereinfacht werden. Zum anderen ist unklar, ob diese Korrektur die Positivität der Dichte erhält. Dies sollte in zukünftigen Untersuchungen einer vollständigen Beschreibung in vierter Ordnung besonders beachtet werden.

Kapitel 4

Caldeira-Leggett-Modell

In den vorhergehenden Kapiteln wurde dargestellt, wie die Ankopplung eines Objekts an eine makroskopische Umgebung zu dissipativem Verhalten führen kann. Dies soll nun an einem speziellen, analytisch exakt lösbaren Modell näher gezeigt werden: Das Caldeira-Leggett-Modell ist ein Standardsystem bei der Untersuchung von Dissipation (s. z. B. [18–22]). Es beschreibt eine Umgebung aus harmonischen Oszillatoren, die linear an das zu untersuchende Teilsystem ankopeln. Die Bewegungsgleichungen für die Umgebungsschwinger sind stets linear und damit lösbar. Dies führt auf eine Bewegungsgleichung für das System, die nur von den Modellparametern (Massen, Frequenzen und Kopplungskonstanten) und dem Anfangszustand der Umgebung abhängt. Diese Gleichung hat die Form einer verallgemeinerten Langevin-Gleichung.

4.1 Quanten-Langevin-Gleichung

In diesem Abschnitt soll die reduzierte Bewegungsgleichung für das Teilsystem hergeleitet werden. Hierbei wird wie folgt vorgegangen: Zunächst wird der Hamiltonoperator des Gesamtsystems definiert. Mit diesem werden Bewegungsgleichungen für das System einerseits und die Umgebung andererseits hergeleitet. Diese Gleichungen sind gekoppelt. Die linearen Gleichungen für die Umgebung werden gelöst und die Lösungen in die Systemgleichung eingesetzt. Dies führt auf eine Integrodifferentialgleichung für den Systemfreiheitsgrad – die gesuchte verallgemeinerte Quanten-Langevin-Gleichung.

Es wird folgendes Modellsystem betrachtet: Ein Teilchen der Masse m mit den kanonischen Variablen (x, p) habe eine potentielle Energie $V(x)$. Sein Hamiltonoperator lautet dann

$$H_S = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad . \quad (4.1)$$

Die Umgebung besteht aus N nicht untereinander wechselwirkenden harmonischen Oszillatoren mit Massen m_j und Normalfrequenzen ω_j . Der Hamiltonope-

rator des Bades ist also

$$H_B = \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2 x_j^2}{2} \quad . \quad (4.2)$$

Die Kopplung zwischen System und Umgebung hängt bilinear von den Badkoordinaten und der Systemkoordinate ab. Die Wechselwirkung ist demnach

$$H_W = - \sum_{j=1}^N d_j x x_j \quad , \quad (4.3)$$

womit sich als Hamiltonoperator des Gesamtsystems

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2 x_j^2}{2} - d_j x x_j \quad (4.4)$$

ergibt.

4.1.1 Bewegungsgleichungen

Für die kanonischen Observablen Ort und Impuls des Systems ergeben sich die Heisenberg-Gleichungen

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= \frac{[x(t), H]}{i\hbar} = \frac{p(t)}{m} \quad , \\ \dot{p}(t) &= \frac{[p(t), H]}{i\hbar} = -\frac{dV(x)}{dx} + \sum_{j=1}^N d_j x_j \quad , \end{aligned} \quad (4.5)$$

die sich zu folgender Operatorgleichung zusammenfassen lassen:

$$m\ddot{x} + \frac{dV(x)}{dx} = \sum_{j=1}^N d_j x_j \quad . \quad (4.6)$$

Der Einfluss der Umgebung steckt hier in dem Kraft-Operator $\sum d_j x_j$. Analog gelten für die Badfreiheitsgrade die Bewegungsgleichungen

$$m_j \ddot{x}_j + m_j \omega_j^2 x_j = d_j x \quad , \quad j \in \{1, \dots, N\} \quad , \quad (4.7)$$

in denen der Systemeinfluss $d_j x$ als Inhomogenität aufgefasst wird. Sie lassen sich mit Hilfe der linearen Antwortfunktion¹

$$\chi_j(t) = \frac{\sin(\omega_j t)}{m_j \omega_j} \Theta(t) \quad , \quad j \in \{1, \dots, N\} \quad , \quad (4.8)$$

¹Der Wert der Heaviside-Sprungfunktion $\Theta(t) = \begin{cases} 1 & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$ an der Stelle $t = 0$ wird $\Theta(0) = \frac{1}{2}$ gewählt. Im streng mathematischen Sinne ist diese Wahl natürlich bedeutungslos, da es sich bei der Sprungfunktion um eine Distribution handelt. Für „physikalische“ Sprungfunktionen (stetige Funktionen mit kleiner aber endlicher Sprungdauer) ist diese Wahl hingegen nützlich. Sie entspricht der Wahl nach Spiegelsymmetrie $\delta(-t) = \delta(t)$ bei „physikalischen“ Deltafunktionen (mit endlicher Breite).

lösen: Die Lösung mit den Anfangsbedingungen $(x_j(0), p_j(0))$ setzt sich zusammen aus der Lösung der homogenen Gleichungen

$$x_j^{\text{hom}}(t) = m_j x_j(0) \dot{\chi}_j(t) + p_j(0) \chi_j(t) \quad (4.9)$$

– welche die Anfangsbedingungen enthält – und der speziellen Lösung der inhomogenen Gleichungen

$$x_j^{\text{inh}}(t) = \int_0^\infty dt' \chi_j(t-t') d_j x(t') \quad (4.10)$$

– welche nicht von den Anfangsbedingungen abhängt. Hier werden die durch das System verursachten Kräfte auf die Umgebungsfreiheitsgrade $d_j x(t')$ jeweils mit $\sin[\omega_j(t-t')]$ gewichtet. Die maximalen Beträge der Gewichtsfunktionen (bei $t' \approx t - \pi(n + \frac{1}{2})/\omega_j$) liegen für Freiheitsgrade mit unterschiedlichen Frequenzen ω_j bei unterschiedlichen Zeiten. Deshalb bietet sich eine partielle Integration an,

$$\begin{aligned} x_j^{\text{inh}}(t) &= \int_0^t dt' \frac{\sin[\omega_j(t-t')] d_j x(t')}{m_j \omega_j} = -\frac{d_j}{m_j \omega_j^2} \int_0^t dt' \omega_j \sin[\omega_j(t-t')] x(t') \\ &= \frac{d_j}{m_j \omega_j^2} \left\{ x(t) - \cos(\omega_j t) x(0) - \int_0^t dt' \cos[\omega_j(t-t')] \dot{x}(t') \right\}, \quad (4.11) \end{aligned}$$

denn die nun auftretenden Gewichtsfunktionen $\cos[\omega_j(t-t')]$ haben bei $t' = t$ ein gemeinsames Maximum: Die Antwort der Umgebungsschwinger auf das System überlagert sich zu dieser Zeit konstruktiv.

Wird die Lösung der Umweltkoordinaten nun in die Bewegungsgleichung des Systems eingesetzt, so ergibt sich

$$m\ddot{x}(t) + \frac{dV(x(t))}{dx} = \sum_{j=1}^N d_j x_j^{\text{hom}}(t) \quad (4.12)$$

$$+ \sum_{j=1}^N \frac{d_j^2}{m_j \omega_j^2} x(t) \quad (4.13)$$

$$- \sum_{j=1}^N \frac{d_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos(\omega_j t) x(0) \quad (4.14)$$

$$- \int_0^t dt' \sum_{j=1}^N \frac{d_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos[\omega_j(t-t')] \dot{x}(t') \quad (4.15)$$

Die vier Summen werden nun diskutiert:

- Über den Integralterm (4.15) hängt $\ddot{x}(t)$ nicht nur von den Größen zur Zeit t , sondern auch von der Vorgeschichte ($\dot{x}(t')$ mit $0 \leq t' \leq t$) ab. Dieser

Einfluss wird durch den Gedächtniskern

$$\gamma(t) \equiv \Theta(t) \frac{1}{m} \sum_{j=1}^N \frac{d_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos(\omega_j t) \quad (4.16)$$

beschrieben. Dieser hat die Dimension Zeit^{-2} , so dass sich nach der Integration die Dimension einer Dämpfungskonstanten (Zeit^{-1}) ergibt. Hier ist es nützlich, die sogenannte Spektraldichte

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N \frac{d_j^2}{m_j \omega_j} \delta(\omega - \omega_j) \quad (4.17)$$

einzuführen. Sie beschreibt die frequenzabhängige Kopplung an die Umgebung und bestimmt den Gedächtniskern

$$\gamma(t) = \Theta(t) \frac{1}{m} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} J(\omega) \cos(\omega t) \quad . \quad (4.18)$$

Die Spektraldichte wird häufig phänomenologisch durch eine kontinuierliche Funktion ersetzt. Dieser Grenzübergang zu unendlich dicht liegenden Umgebungsmode entspricht einem thermodynamischen Limes. Ein solches Bad zeigt keine Periodizität (die Wiederkehrzeit geht gegen unendlich). In diesem Fall ist die reduzierte Dynamik tatsächlich irreversibel.

- Der Term (4.13) wirkt wie ein zusätzliches Kraftfeld auf das System – das Teilchen bewegt sich wie in einem effektiven Potential:

$$V_e(x) = V(x) - \sum_{j=1}^N \frac{d_j^2 x^2}{2m_j \omega_j^2} \quad . \quad (4.19)$$

Wird der Hamiltonoperator (Gl. 4.4) mit diesem effektiven Potential dargestellt, so taucht ein zusätzlicher Renormierungs-Anteil auf

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_e(x) + \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2 x_j^2}{2} - d_j x_j x + \underbrace{\frac{d_j^2 x^2}{2m_j \omega_j^2}}_{H_{\text{ren}}} \quad , \quad (4.20)$$

der durch den Gedächtniskern (Gl. 4.16) oder die Spektraldichte (Gl. 4.18) ausgedrückt werden kann:

$$H_{\text{ren}} = \frac{d_j^2 x^2}{2m_j \omega_j^2} = m \gamma(0) x^2 = \left(\frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \right) x^2 \quad . \quad (4.21)$$

- Der Term (4.12) wird als Restkraft bezeichnet:

$$F(t) \equiv \sum_{j=1}^N d_j x_j^{\text{hom}}(t) \quad . \quad (4.22)$$

Er wirkt zusammen mit dem verbleibenden Term (4.14)

$$- \sum_{j=1}^N \frac{d_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos[\omega_j t] x(0) = -m\gamma(t)x(0) \quad (4.23)$$

(s. Gl. 4.16), der einen Kraftstoß beim Loslassen des Systems aus seinen Anfangsbedingungen (Einschalteffekt) beschreibt, als treibende Kraft auf das System.

Mit diesen Ersetzungen wird aus der Bewegungsgleichung für das System

$$m \ddot{x}(t) + \frac{dV_e(x(t))}{dx} + m \int_0^t dt' \gamma(t-t') \dot{x}(t') = F(t) - m\gamma(t)x(0) \quad . \quad (4.24)$$

Der Einfluss der Umgebung auf das System steckt nun in

- der harmonischen Korrektur des Potentials.
- dem Gedächtniskern $\gamma(t)$, der über die Antwort der Umgebung das System an seine Vergangenheit koppelt. Da die Antwort der Umgebung linear ist, spielt hier der *Anfangszustand* der Umgebung keine Rolle. Es gehen nur die Modellparameter – Massen, Frequenzen und Kopplungskonstanen – ein.
- der Restkraft $F(t)$, welche bezüglich der Umgebung Operatorcharakter besitzt. Um reduzierte Bewegungsgleichungen für Systemoperatoren zu erhalten, muss der Erwartungswert bezüglich einer angenommenen Umgebung berechnet werden; hier kommt es also auf den Anfangszustand der Umgebung an. Aufgrund dieser Erwartungswertbildung geht $F(t)$ statistisch ein und hat somit denselben Einfluss wie eine stochastische Kraft.

Diese (quantenmechanische) Gleichung hat die Form einer verallgemeinerten Langevin-Gleichung, denn $F(t)$ kann als stochastische Kraft aufgefasst werden. Sie ist die gesuchte reduzierte Bewegungsgleichung für das System.

An dieser Stelle ist anzumerken, dass die Wahl des Zeitnullpunktes für die Herleitung dieser Bewegungsgleichung willkürlich ist. Andererseits bestimmt diese Wahl, wie weit sich das Gedächtnisintegral in die Vergangenheit erstreckt. Weiterhin ändern sich auch die Restkraft, da diese ja von den Anfangsbedingungen der Umgebung abhängt, sowie der Einschalteffekt $-m\gamma(t)x(0)$. Es ist also möglich, Teile der Systembeschleunigung zwischen Gedächtnisintegral und

Restkraft „umzuwidmen“. Wenn der Gedächtniskern $\gamma(t)$ nur auf einer charakteristischen Zeitskala τ_c beiträgt, kommt es nicht auf die Wahl des Zeitnullpunktes an – sofern er sich hinreichend weit in der Vergangenheit befindet: $t \gg \tau_c$. In diesem Fall kann der Zeitnullpunkt symbolisch unendlich weit in die Vergangenheit gelegt werden. Bei manchen physikalischen Realisierungen ist jedoch ein Präparationszeitpunkt ausgezeichnet, z. B. wenn zu einem bestimmten Zeitpunkt die Wechselwirkung zwischen System und Umgebung eingeschaltet wird. Diese Überlegungen entsprechen denen zum Einschalteffekt in Abschnitt (3.3.1).

4.2 Quantenfluktuationen der Umgebung

Der Einfluss der Umgebung auf das System ist durch die statistischen Eigenschaften des Restkraftoperators $F(t)$ vollständig bestimmt. Diese sind durch die Momentfunktionen $\langle F(t_1)F(t_2) \dots F(t_n) \rangle$ gegeben. Sie können aus dem Anfangszustand der Umgebung berechnet werden, über den nun spezifische Annahmen gemacht werden müssen. Bei der Präparation des Gesamtsystems soll die Umgebung vollständig durch kollektive Parameter bestimmt sein. Die Umgebungsdichte wird daher thermisch angenommen. Der Dichteoperator faktorisiert in die untereinander unkorrelierten Normalmoden:

$$\varrho_B = \bigotimes_{j=1}^N \varrho_j \quad . \quad (4.25)$$

Nun ist es zweckmäßig, zunächst die Orts-Momentfunktionen einer Mode zu berechnen. Für diese Rechnung wird der Modenindex j weggelassen. Allgemein lassen sich diese Momente aus einer erzeugenden Funktion

$$\phi(u_1, \dots, u_n; t_1, \dots, t_n) = \langle e^{iu_1 x(t_1)} e^{iu_2 x(t_2)} \dots e^{iu_n x(t_n)} \rangle \quad (4.26)$$

bestimmen:

$$\langle x(t_1)x(t_2) \dots x(t_n) \rangle = \frac{1}{i^n} \frac{\partial^n}{\partial u_1 \partial u_2 \dots \partial u_n} \phi(u_1, \dots, u_n; t_1, \dots, t_n) \Big|_{u_1 = \dots = u_n = 0} \quad . \quad (4.27)$$

Zur Berechnung der erzeugenden Funktion wird das Produkt der Exponentialfunktionen mit der Hausdorff-Formel $[A, [A, B]] = 0 \Rightarrow e^A e^B = e^{A+B+[A,B]/2}$ zusammengefasst, wobei neben $x(t) = \frac{x_0}{2}(a^\dagger e^{i\omega t} + a e^{-i\omega t})$ die Vertauschbeziehung

$$\begin{aligned} [iu_\alpha x(t_\alpha), iu_\beta x(t_\beta)] &= -\frac{x_0^2}{4} [a^\dagger e^{i\omega t_\alpha} + a e^{-i\omega t_\alpha}, a^\dagger e^{i\omega t_\beta} + a e^{-i\omega t_\beta}] u_\alpha u_\beta \\ &= i\frac{x_0^2}{2} \sin[\omega(t_\alpha - t_\beta)] u_\alpha u_\beta \end{aligned} \quad (4.28)$$

benötigt wird. Damit wird

$$\phi(u_1, \dots, u_n; t_1, \dots, t_n) = e^{\frac{i}{4}x_0^2 \sin[\omega(t_1 - t_2)]u_1 u_2} \langle e^{i(u_1 x(t_1) + u_2 x(t_2))} e^{iu_3 x(t_3)} \dots e^{iu_n x(t_n)} \rangle \quad . \quad (4.29)$$

Werden die folgenden Terme sukzessive einbezogen

$$\left\langle e^{i \sum_{\alpha=1}^{k-1} u_{\alpha} x(t_{\alpha})} e^{i u_k x(t_k)} \dots e^{i u_n x(t_n)} \right\rangle = e^{\frac{i}{4} x_0^2 \sum_{\alpha=1}^{k-1} \sin[\omega(t_{\alpha}-t_k)] u_{\alpha} u_k} \left\langle e^{i \sum_{\alpha=1}^k u_{\alpha} x(t_{\alpha})} e^{i u_{k+1} x(t_{k+1})} \dots e^{i u_n x(t_n)} \right\rangle, \quad (4.30)$$

so ergibt sich schließlich

$$\phi(u_1, \dots, u_n; t_1, \dots, t_n) = e^{i \frac{x_0^2}{4} \sum_{\alpha < \beta} \sin[\omega(t_{\alpha}-t_{\beta})] u_{\alpha} u_{\beta}} \left\langle e^{i \sum_{\alpha} u_{\alpha} x(t_{\alpha})} \right\rangle. \quad (4.31)$$

Der verbleibende Erwartungswert lässt sich mit dem Kürzel $\xi = i \frac{x_0}{2} \sum_{\alpha} u_{\alpha} e^{i \omega t_{\alpha}}$ als (symmetrisch geordnete) charakteristische Funktion darstellen

$$\left\langle e^{i \sum_{\alpha} u_{\alpha} x(t_{\alpha})} \right\rangle = \left\langle e^{i \frac{x_0}{2} \sum_{\alpha} u_{\alpha} (a^{\dagger} e^{i \omega t_{\alpha}} + a e^{-i \omega t_{\alpha}})} \right\rangle = \left\langle e^{\xi a^{\dagger} - \xi^* a} \right\rangle, \quad (4.32)$$

deren Form im thermischen Gleichgewicht bekannt ist [23]

$$\left\langle e^{\xi a^{\dagger} - \xi^* a} \right\rangle = e^{-\langle n + \frac{1}{2} \rangle \xi \xi^*} = e^{-\langle n + \frac{1}{2} \rangle \frac{x_0^2}{4} \sum_{\alpha, \beta} \exp[i \omega(t_{\alpha} - t_{\beta})] u_{\alpha} u_{\beta}}, \quad (4.33)$$

wobei für die mittlere Besetzungszahl im thermischen Gleichgewicht

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\hbar \omega / k T} - 1} = \frac{1}{2} \left(\coth \left[\frac{\hbar \omega}{2 k T} \right] - 1 \right) \quad (4.34)$$

gilt. Die Doppelsumme wird noch umgeschrieben:

$$\sum_{\alpha, \beta} e^{i \omega(t_{\alpha} - t_{\beta})} u_{\alpha} u_{\beta} = 2 \sum_{\alpha < \beta} \cos[\omega(t_{\alpha} - t_{\beta})] u_{\alpha} u_{\beta} + \sum_{\alpha} u_{\alpha}^2. \quad (4.35)$$

Die zweite Summe muss bei der erzeugenden Funktion nicht berücksichtigt werden, denn bei der Berechnung der Korrelationen gemäß Gleichung (4.27) wird die jeweilige Ableitung an der Stelle $u_{\alpha} = 0$ ausgewertet, so dass in u_{α} quadratische Terme nicht beitragen. Die erzeugende Funktion (Gl. 4.31) ist demnach

$$\phi(u_1, \dots, u_n; t_1, \dots, t_n) = e^{-\sum_{\alpha < \beta} \frac{x_0^2}{4} (\coth \left[\frac{\hbar \omega}{2 k T} \right] \cos[\omega(t_{\alpha} - t_{\beta})] - i \sin[\omega(t_{\alpha} - t_{\beta})]) u_{\alpha} u_{\beta}}. \quad (4.36)$$

Damit sind die statistischen Eigenschaften des quantenmechanischen Systems durch eine erzeugende Funktion dargestellt, wie sie aus der Theorie stochastischer Prozesse bekannt ist (s. z. B. [24]). Es können daher von dort bekannte Ergebnisse übertragen werden. So lassen sich die Korrelationsfunktionen²

$$k_n(t_1, \dots, t_n) = \frac{1}{i^n} \frac{\partial^n}{\partial u_1 \partial u_2 \dots \partial u_n} \ln \phi(u_1, \dots, u_n; t_1, \dots, t_n) \Big|_{u_1 = \dots = u_n = 0} \quad (4.37)$$

²Die Bezeichnung ist in der Literatur nicht einheitlich. Sie werden häufig auch als Kumulantenfunktionen (z. B. [8]) bezeichnet. Da diese Funktionen bei statistisch unabhängigen Variablen verschwinden, halte ich Stratonovichs Bezeichnung Korrelation für sinnvoll.

aus dem Logarithmus der erzeugenden Funktion ableiten. Aus der bilinearen Form in u_α, u_β folgt sofort, dass nur die zweite Korrelation

$$k_2(t_1, t_2) = \frac{x_0^2}{4} \left(\coth \left[\frac{\hbar\omega}{2kT} \right] \cos[\omega(t_1 - t_2)] - i \sin[\omega(t_1 - t_2)] \right) \quad (4.38)$$

von Null verschieden ist. Im Gegensatz zu den Korrelationen verschwinden höhere Momentfunktionen nicht, sie lassen sich jedoch auf $k_2(t_1, t_2)$ zurückführen [8]: Alle ungeraden Momente verschwinden und alle geraden sind

$$\langle x(t_1)x(t_2) \dots x(t_{2n}) \rangle = \frac{(2n)!}{n!2^n} \{k_2(t_1, t_2)k_2(t_3, t_4) \dots k_2(t_{2n-1}, t_{2n})\}_{\text{sym}} \quad , \quad (4.39)$$

wobei das Symbol $\{ \}_{\text{sym}}$ für die (bezüglich der t -Argumente) symmetrisierte Form stehen soll. So gilt

$$\langle x(t_1)x(t_2) \rangle = k_2(t_1, t_2) \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} \langle x(t_1)x(t_2)x(t_3)x(t_4) \rangle &= k_2(t_1, t_2)k_2(t_3, t_4) + k_2(t_1, t_3)k_2(t_2, t_4) \\ &+ k_2(t_1, t_4)k_2(t_2, t_3) \quad . \end{aligned} \quad (4.41)$$

Ein klassischer stochastischer Prozess mit dieser Eigenschaft heißt Gauß-Prozess. Dieser Begriff lässt sich auf die hier berechneten quantenmechanischen Momente übertragen: Der Ort eines harmonischen Oszillators im thermischen Gleichgewicht zeigt Gaußsche Quantenfluktuationen. Die quantenmechanische Natur dieser Fluktuationen spiegelt sich in der speziellen Form der Korrelationsfunktion (Gl. 4.38) wider.

Im Restkraftoperator $F(t) = \sum d_j x_j^{\text{hom}}(t)$ werden die Orte *unkorrelierter* Moden (Gl. 4.25) *linear* kombiniert. Damit überträgt sich der Gaußsche Charakter auf die Momentfunktionen von $F(t)$: Alle ungeraden Momente verschwinden, insbesondere ist

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad , \quad (4.42)$$

und aus Gleichung (4.38) folgt mit $x_0 = \sqrt{2\hbar/m\omega}$

$$\langle F(t_1)F(t_2) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{\hbar d_j^2}{2m_j \omega_j} \left(\coth \left[\frac{\hbar\omega_j}{2kT} \right] \cos[\omega_j(t_1 - t_2)] - i \sin[\omega_j(t_1 - t_2)] \right) \quad . \quad (4.43)$$

Die höheren Momentfunktionen lassen sich mit Gleichung (4.39) hierauf zurückführen.

4.3 Fluktuations-Dissipations-Theorem

Die Kraft-Kraft-Korrelation ist durch die Spektraldichte $J(\omega)$ (Gl. 4.17) eindeutig bestimmt:

$$\begin{aligned} L(t-t') &\equiv \frac{1}{\hbar} \langle F(t)F(t') \rangle \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left(\coth \left[\frac{\hbar\omega}{2kT} \right] \cos[\omega(t-t')] - i \sin[\omega(t-t')] \right). \end{aligned} \quad (4.44)$$

Allerdings wurde hierbei angenommen, dass sich die Umgebung in einem thermischen Gleichgewicht befindet. Auch der Gedächtniskern $\gamma(\tau)$ wurde mit Gleichung (4.18) über die Spektraldichte dargestellt, wobei es dort allerdings nicht auf den Zustand der Umgebung ankam.

Im thermischen Gleichgewicht hängen also sowohl die Fluktuationen (Kraft-Kraft-Korrelation) als auch die Dissipation (Gedächtniskern) mit der Spektraldichte und daher auch miteinander zusammen. Diese Relation lässt sich am besten im Frequenzbild darstellen. Für die jeweiligen Fourier-Transformierten gilt nämlich einerseits³

$$\begin{aligned} L(\omega) &= \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega' J(\omega') \left(\coth \left[\frac{\hbar\omega'}{2kT} \right] \cos(\omega't) - i \sin(\omega't) \right) \\ &= \frac{\omega}{|\omega|} J(|\omega|) \left(\coth \left[\frac{\hbar\omega}{2kT} \right] + 1 \right) \\ &= \frac{J(|\omega|)}{|\omega|} \frac{2\omega}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \end{aligned} \quad (4.45)$$

und andererseits – mit der in der Literatur üblichen Bezeichnung

$$\gamma'(\omega) \equiv \text{Re } \gamma(\omega) = \int_{-\infty}^\infty dt \cos(\omega t) \gamma(t) \quad , \quad \gamma''(\omega) \equiv \text{Im } \gamma(\omega) = \int_{-\infty}^\infty dt \sin(\omega t) \gamma(t) \quad (4.46)$$

(s. z. B. [20]) – wegen $\gamma(t) = \gamma^*(t)$ und $\gamma(t) = 0$ für $t < 0$ und Gleichung (4.18)

$$\gamma'(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \gamma(|t|) \quad (4.47)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \frac{1}{m} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'} \cos(\omega't) \\ &= \frac{1}{m} \frac{J(|\omega|)}{|\omega|} \quad . \end{aligned} \quad (4.48)$$

³Wenn zuerst die t -Integration ausgeführt und $\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \frac{\cos(\omega't)}{i \sin(\omega't)} = \delta(\omega + \omega') \pm \delta(\omega - \omega')$ genutzt wird.

Hieraus ergibt sich der gesuchte Zusammenhang, das Fluktuations-Dissipations-Theorem, in der Gestalt

$$L(\omega) = \frac{2m\omega}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \gamma'(\omega) \quad . \quad (4.49)$$

Im klassischen Grenzfall, also bei hohen Temperaturen $kT \gg \hbar\omega$, vereinfacht sich diese Beziehung, da dann die Näherung

$$\frac{\omega}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \approx \frac{kT}{\hbar} \quad (4.50)$$

ausgenutzt werden kann, womit sich mit Gleichung (4.47) das klassische Fluktuations-Dissipations-Theorem

$$\langle F(t)F(0) \rangle = \hbar L(t) \approx m kT \gamma(|t|) \quad (4.51)$$

ergibt.

4.4 System: Harmonischer Oszillator

Soll der Einfluss der Umgebung auf die Dynamik von Systemgrößen untersucht werden, muss das relevante System näher spezifiziert werden. Als leicht rechenbares Beispiel bietet sich auch hier ein harmonischer Oszillator an, dessen quadratisches Potential

$$V_e(x) = \frac{1}{2} D x^2 \quad (4.52)$$

zusammen mit der Kreisfrequenz $\omega_0 = \sqrt{D/m}$ auf eine lineare Bewegungsgleichung (Gl. 4.24)

$$m\ddot{x}(t) + m\omega_0^2 x(t) + m \int_0^t dt' \gamma(t-t') \dot{x}(t') = F(t) - m\gamma(t)x(0) \quad (4.53)$$

führt. Hier wird bereits mit dem effektiven Potential V_e gerechnet, das die mittlere Wechselwirkung mit der Umgebung beschreibt. Die Bewegungsgleichung wird mit der Laplace-Transformation

$$\hat{x}(s) = \int_0^\infty dt e^{-st} x(t) \quad (4.54)$$

in die algebraische Gleichung

$$ms^2 \hat{x}(s) - msx(0) - m\dot{x}(0) + m\omega_0^2 \hat{x}(s) + m\hat{\gamma}(s)s\hat{x}(s) = \hat{F}(s) \quad (4.55)$$

überführt und gelöst:

$$\hat{x}(s) = \frac{1}{\underbrace{m\omega_0^2 + s^2 + s\hat{\gamma}(s)}_{\equiv \hat{\chi}(s)}} \left(m\dot{x}(0) + msx(0) + \hat{F}(s) \right) \quad . \quad (4.56)$$

Bei der Rücktransformation ergibt sich aus $\hat{\chi}(s)$ die lineare Antwortfunktion

$$\chi(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} ds e^{st} \hat{\chi}(s) \quad , \quad (4.57)$$

die für $t < 0$ verschwindet und den Anfangsbedingungen

$$\chi(0) = 0 \quad , \quad \dot{\chi}(0) = \frac{1}{m} \quad (4.58)$$

genügt. Zusammen mit $p(t) = m\dot{x}(t)$ erhält man schließlich für den Ort

$$x(t) = p(0) \chi(t) + mx(0) \dot{\chi}(t) + \int_0^t dt' \chi(t') F(t-t') \quad (4.59)$$

und wegen $\int_0^t dt' \chi(t') F(t-t') = \int_0^t dt' \chi(t-t') F(t')$ für den Impuls

$$p(t) = mp(0) \dot{\chi}(t) + m^2 x(0) \ddot{\chi}(t) + m \int_0^t dt' \dot{\chi}(t') F(t-t') \quad . \quad (4.60)$$

Da sowohl $\chi(t)$ als auch $\gamma(t)$ den Faktor $\Theta(t)$ enthalten, gilt für ihre Fourier-Transformierten

$$\chi(\omega) = \hat{\chi}(s) \quad , \quad \gamma(\omega) = \hat{\gamma}(s) \quad \text{mit} \quad s = -i\omega \quad (4.61)$$

und damit

$$\chi(\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma(\omega)} \quad . \quad (4.62)$$

Später wird es besonders auf den Imaginärteil dieser dynamischen Suszeptibilität

$$\chi''(\omega) = m\omega\gamma'(\omega) |\chi(\omega)|^2 \quad (4.63)$$

ankommen. Zwei weitere Eigenschaften, die sich in der weiteren Berechnung als nützlich erweisen werden, sollen hier noch genannt werden. Zunächst ist $\chi(\omega)$ über Gleichung (4.61) auch für komplexe ω fortsetzbar und ist dabei in der oberen Halbebene analytisch [25, 4.4.3.1]. Weiterhin ist das Verhalten von $\chi(\omega)$ für große Frequenzen durch den quadratischen Term bestimmt, da $\gamma(\omega)$ dort verschwinden sollte – eine physikalische Umgebung darf keine Oszillatoren beliebig hoher Frequenz enthalten. Somit gilt

$$\chi(\omega) \simeq -\frac{1}{m\omega^2} \quad (4.64)$$

für $|\omega| \rightarrow \infty$.

4.4.1 Renormierung der Masse

Es ist zweckmäßig, von $\gamma(\omega)$ den linearen Anteil des Imaginärteils abzuspalten

$$\gamma(\omega) = i\omega \left. \frac{\partial \gamma''(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} + \gamma_r(\omega) \quad , \quad (4.65)$$

da sich dieser wie eine Veränderung der Masse um

$$\delta m = -m \left. \frac{\partial \gamma''(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \quad (4.66)$$

auswirkt:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{D - (m + \delta m)\omega^2 - i\omega m \gamma_r(\omega)} \quad . \quad (4.67)$$

Hier wurde noch die freie Kreisfrequenz durch die Federkonstante ausgedrückt. In diesen Ausdruck geht die „nackte“ Masse m nicht mehr ein – auch in den Dämpfungsterm nicht, da nach Gleichung (4.18) $\gamma(\omega) \propto 1/m$ ist. Dafür tritt nun die „beobachtete“ Masse $M = m + \delta m$ auf. Dieser Ausdruck ergäbe sich auch, wenn im ursprünglichen Hamiltonoperator (Gl.4.4) als kinetische Energie $p^2/2(m + \delta m)$ stehen würde.

4.4.2 Beobachtungsgrößen

Ausgehend von den Gleichungen (4.59) und (4.60) sollen nun Erwartungswerte für Systemgrößen berechnet werden. Hierbei ist zu beachten, dass es sich immer noch um Operatorgleichungen im vollen System handelt. Zur Verdeutlichung kann auch

$$x(t) = \chi(t) p_S(0) \otimes 1_B + m \dot{\chi}(t) x_S(0) \otimes 1_B + \int_0^t dt' \chi(t') 1_S \otimes F_B(t-t') \quad (4.68)$$

(und analog für den Impuls) geschrieben werden. Es wird nun der Argumentation aus Abschnitt 3.2 folgend angenommen, dass der *Anfangszustand* des Gesamtsystems faktorisiert (Gl. 3.23), wobei sich die Umgebung in einem thermischen Zustand befinden soll:

$$\varrho = \varrho_S \otimes \varrho_B^{\text{th}}(T) \quad . \quad (4.69)$$

Die Momentfunktionen des Restkraftoperators sind damit (Gln. 4.42, 4.43) bekannt. Damit ergibt sich für den mittleren Ort und Impuls

$$\langle x(t) \rangle = \langle p(0) \rangle \chi(t) + m \langle x(0) \rangle \dot{\chi}(t) \quad (4.70)$$

$$\langle p(t) \rangle = m \langle p(0) \rangle \dot{\chi}(t) + m^2 \langle x(0) \rangle \ddot{\chi}(t) \quad , \quad (4.71)$$

die selbstverständlich (Ehrenfest-Theorem) den klassischen Bahnen folgen und nicht von den Quantenfluktuationen der Umgebung beeinflusst werden. Diese

spielen erst bei Größen eine Rolle, die nicht linear in x und p sind (Orts- und Impulsunschärfe, Energie, usw.). Aus der Autokorrelationsfunktion des Ortes können alle quadratischen Beobachtungsgrößen bestimmt werden. Hier kommt es nun besonders auf die faktorisierende Anfangsbedingung (Gl. 4.69) an, mit der

$$\langle x(0)F(t) \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle p(0)F(t) \rangle = 0 \quad (4.72)$$

gilt. Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} \langle x(t_1)x(t_2) \rangle &= \langle p^2(0) \rangle \chi(t_1)\chi(t_2) + m^2 \langle x^2(0) \rangle \dot{\chi}(t_1)\dot{\chi}(t_2) \\ &+ m \left(\langle p(0)x(0) \rangle \chi(t_1)\dot{\chi}(t_2) + \langle x(0)p(0) \rangle \dot{\chi}(t_1)\chi(t_2) \right) \\ &+ \int_0^{t_1} dt' \int_0^{t_2} dt'' \chi(t')\chi(t'') \langle F(t_1 - t')F(t_2 - t'') \rangle. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Jede physikalische Antwortfunktion $\chi(t)$ geht im Laufe der Zeit gegen Null – die Anfangsbedingungen werden ausgedämpft. Für große Zeiten wird die Korrelationsfunktion stationär, hängt also nur noch von der Zeitdifferenz $\tau = t_1 - t_2$ ab:

$$\begin{aligned} C_{xx}(\tau) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle x(t + \tau)x(t) \rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^{t+\tau} dt' \int_0^t dt'' \chi(t')\chi(t'') \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(\tau-t'+t'')} L(\omega) \\ &= \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} L(\omega) \int_0^{\infty} dt' e^{i\omega t'} \chi(t') \int_0^{\infty} dt'' e^{-i\omega t''} \chi(t'') \\ &= \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} L(\omega) |\chi(\omega)|^2 \quad . \end{aligned} \quad (4.74)$$

Ihre Fouriertransformierte

$$C_{xx}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} C_{xx}(t) = \hbar L(\omega) |\chi(\omega)|^2 \quad (4.75)$$

wird Spektrum genannt. Aus ihr können nun die gesuchten Beobachtungsgrößen im stationären Limes berechnet werden, z. B. die Ortsunschärfe:

$$\Delta x_{\text{SS}}^2 = C_{xx}(t=0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega C_{xx}(\omega) \quad . \quad (4.76)$$

Ausgehend von Gleichung (4.60) wird auch die Autokorrelationsfunktion des Impulses

$$C_{pp}(t) = -m^2 \frac{d^2}{dt^2} C_{xx}(t) = \frac{m^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \omega^2 C_{xx}(\omega) \quad (4.77)$$

berechnet, aus der sich die Impulsunschärfe

$$\Delta p_{\text{SS}}^2 = C_{pp}(t=0) = \frac{m^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^2 C_{xx}(\omega) \quad (4.78)$$

ergibt.

Ist die Umgebung im thermischen Gleichgewicht, so gilt das Fluktuations-Dissipations-Theorem (Gl. 4.49) und es folgt mit den Gleichungen (4.75) und (4.63) das Spektrum:

$$C_{xx}(\omega) = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \chi''(\omega) = \hbar \left(\coth \left[\frac{\hbar\omega}{2kT} \right] + 1 \right) \chi''(\omega) \quad . \quad (4.79)$$

Nun kann auch die stationäre Korrelationsfunktion berechnet werden

$$C_{xx}(t) = \underbrace{\frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \coth \left[\frac{\hbar\omega}{2kT} \right] \chi''(\omega)}_{\equiv S(t)} + \underbrace{\frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \chi''(\omega)}_{\equiv iA(t)}, \quad (4.80)$$

wobei sich die hier angegebene Aufteilung der Funktion in einen symmetrischen Anteil $S(t) = S(-t)$ und einen antisymmetrischen $A(t) = -A(-t)$ aus der Antisymmetrie von $\chi''(\omega)$ ergibt: Eine reellwertige Antwortfunktion fordert nämlich $\chi^*(\omega) = \chi(-\omega)$, was auf $\chi''(\omega) = \frac{\chi(\omega) - \chi(-\omega)}{2i} = -\chi''(-\omega)$ führt. Der antisymmetrische Anteil der Korrelationsfunktion ergibt sich nun einfach aus der linearen Antwortfunktion:

$$A(t) = -\hbar \frac{\chi(t) - \chi(-t)}{2} = -\text{sgn}(t) \frac{\hbar}{2} \chi(|t|) \quad \Leftrightarrow \quad \chi(t) = -\frac{2}{\hbar} \Theta(t) A(t) \quad . \quad (4.81)$$

Zur Berechnung des symmetrischen Anteils wird der hyperbolische Kotangens in Partialbrüche zerlegt:

$$\coth(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{x - i\pi n} \quad . \quad (4.82)$$

Zusammen mit der Definition der Matsubara-Frequenzen⁴

$$\nu_n = \frac{2\pi kT}{\hbar} n \quad (4.83)$$

ist dann

$$S(t) = \frac{kT}{2\pi i} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \frac{\chi(\omega) - \chi(-\omega)}{\omega - i\nu_n} \quad . \quad (4.84)$$

Die Integration kann mit Hilfe des Residuensatzes durchgeführt werden, wenn der Integrationsweg über die untere komplexe Halbebene (für $t > 0$) geschlossen wird. Es tragen die Pole bei $\omega = i\nu_n$ mit negativem n und die Pole⁵ ω_k von $\chi(\omega)$

⁴Diese Bezeichnung stammt aus der Vielteilchen-Theorie, s. z. B. [26, §37]

⁵Hier wird davon ausgegangen, dass es sich bei $\chi(\omega)$ um eine gebrochen rationale Funktion handelt, die also abzählbar viele Pole besitzt.

bei. Dabei ist nach Abschnitt 4.4 $\chi(-\omega)$ in der unteren Halbebene analytisch. Es ergibt sich für positive t

$$S(t) = kT \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\nu_n t} (\chi(i\nu_n) - \chi(-i\nu_n)) - kT \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_k e^{-i\omega_k t} \frac{\text{Res}_{\omega_k} [\chi(\omega)]}{\omega_k - i\nu_n} , \quad (4.85)$$

wobei im hinteren Ausdruck die Summe über n auch wieder zum hyperbolischen Kotangens zusammengefasst werden kann.

Die stationäre Ortsunschärfe folgt aus dem symmetrischen Teil der Korrelationsfunktion bei $t = 0$. Ausgehend von Gleichung (4.84) ist

$$\Delta x_{\text{SS}}^2 = S(0) = \frac{kT}{2\pi i} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\chi(\omega) - \chi(-\omega)}{\omega - i\nu_n} \quad (4.86)$$

zu berechnen. Da $\chi(\omega)$ für große $|\omega|$ in der oberen Halbebene verschwindet (Gl. 4.64), kann auch dieses Integral berechnet werden,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\chi(\omega) - \chi(-\omega)}{\omega - i\nu_n} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \chi(\omega) \left(\frac{1}{\omega - i\nu_n} + \frac{1}{\omega + i\nu_n} \right) \\ &= 2\pi i \chi(i|\nu_n|) , \end{aligned} \quad (4.87)$$

denn der Integrationsweg kann auch hier im Unendlichen geschlossen werden; diesmal allerdings über die obere Halbebene, in der $\chi(\omega)$ analytisch ist. Also ergibt sich mit Gleichung (4.62)

$$\Delta x_{\text{SS}}^2 = \frac{kT}{m\omega_0^2} + \frac{2kT}{m} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_0^2 + \nu_n^2 + \nu_n \gamma(i\nu_n)} . \quad (4.88)$$

Hier wurde der Beitrag von $n = 0$ zuerst angegeben. Die übrigen Summanden, die von der Dämpfung $\gamma(\omega)$ abhängen, sind für hohe Temperaturen vernachlässigbar: Im klassischen Grenzfall erhält man den Gleichverteilungssatz.

Die stationäre Impulsunschärfe ist nach Gleichung (4.78) durch

$$\Delta p_{\text{SS}}^2 = \frac{m^2 kT}{2\pi i} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^2 \frac{\chi(\omega) - \chi(-\omega)}{\omega - i\nu_n} \quad (4.89)$$

gegeben. Nun muss bei der Integration allerdings noch der Grenzwert (Gl. 4.64)

$$\lim_{|\omega| \rightarrow \infty} \omega^2 \chi(\omega) \equiv -\frac{1}{m} \quad (4.90)$$

berücksichtigt werden. Aus Gleichung (4.87) folgt

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{(\omega^2 \chi(\omega) + \frac{1}{m}) - (\omega^2 \chi(-\omega) + \frac{1}{m})}{\omega - i\nu_n} = 2\pi i \left(\frac{1}{m} - \nu_n^2 \chi(i|\nu_n|) \right) , \quad (4.91)$$

woraus sich mit Gleichung (4.62)

$$\Delta p_{\text{SS}}^2 = mkT + 2mkT \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\omega_0^2 + \nu_n \gamma(i\nu_n)}{\omega_0^2 + \nu_n^2 + \nu_n \gamma(i\nu_n)} \quad (4.92)$$

ergibt. Auch hier entspricht der Beitrag des Summanden mit $n = 0$ dem klassischen Gleichverteilungssatz. Dieser gilt quantenmechanisch allerdings nicht – die Verteilung auf kinetische und potentielle Energie ist hier durch die Kopplung an die Umgebung modifiziert:

$$\frac{\Delta p_{\text{SS}}^2}{2m} = \frac{1}{2} m \omega_0^2 \Delta x_{\text{SS}}^2 + kT \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n \gamma(i\nu_n)}{\omega_0^2 + \nu_n^2 + \nu_n \gamma(i\nu_n)} \quad (4.93)$$

Übrigens können die Ergebnisse für die stationären Unschärfen auch mit der reduzierten Zustandssumme des Systemoszillators ausgedrückt werden. Diese kann als Verhältnis der Zustandssummen von Gesamtsystem und Umgebung berechnet werden [20]. Es gilt dann folgender Zusammenhang zwischen reduzierter Zustandssumme Z und dynamischer Suszeptibilität

$$Z = \frac{mkT}{\hbar\omega_0} \prod_{n=1}^{\infty} \nu_n^2 \chi(i\nu_n) = \frac{kT}{\hbar\omega_0} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n^2}{\omega_0^2 + \nu_n^2 + \nu_n \gamma(i\nu_n)} \quad (4.94)$$

Der Zustandssumme entspricht eine freie Energie

$$F = -kT \ln Z = kT \ln \left[\frac{\hbar\omega_0}{kT} \right] + kT \sum_{n=1}^{\infty} \ln \left[\frac{\omega_0^2 + \nu_n^2 + \nu_n \gamma(i\nu_n)}{\nu_n^2} \right] \quad (4.95)$$

aus der nun die gesuchten Größen durch Ableiten nach externen Parametern gewonnen werden können [27]. Diese externen Parameter sind die Federkonstante $D = m\omega_0^2$ (sie bestimmt die Längenskala des Systemoszillators), eine mittlere Dämpfungskonstante γ_0 , die von der frequenzabhängigen Dämpfung abgespalten wird

$$\gamma(\omega) = \gamma_0 f_\gamma(\omega) \quad \text{mit} \quad f_\gamma(0) = 1 \quad (4.96)$$

sowie die Temperatur T der Umgebung. Als Funktion dieser Parameter hat die freie Energie die Form

$$F(D, \gamma_0, T) = kT \ln \left[\frac{\hbar\sqrt{D/m}}{kT} \right] + kT \sum_{n=1}^{\infty} \ln \left[\frac{D/m + \nu_n^2 + \nu_n \gamma_0 f_\gamma(i\nu_n)}{\nu_n^2} \right] \quad (4.97)$$

Aus deren Ableitungen

$$\frac{\partial F}{\partial D} = \frac{kT}{2D} + \frac{kT}{m} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{D/m + \nu_n^2 + \nu_n \gamma_0 f_\gamma(i\nu_n)} = \frac{1}{2} \Delta x_{\text{SS}}^2 \quad ,$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial F}{\partial \gamma_0} &= kT \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n f_{\gamma}(i\nu_n)}{D/m + \nu_n^2 + \nu_n \gamma_0 f_{\gamma}(i\nu_n)} = \frac{1}{\gamma_0} \left(\frac{\Delta p_{\text{SS}}^2}{2m} - \frac{1}{2} D \Delta x_{\text{SS}}^2 \right) , \\ \frac{\partial F}{\partial T} &= -k(1 + \ln Z) = -S\end{aligned}\quad (4.98)$$

können nun sowohl die gesuchten Unschärfen als auch die Entropie S des reduzierten Systems berechnet werden. Anstatt nach der Federkonstanten kann natürlich auch nach der freien Kreisfrequenz differenziert werden ($\frac{\partial}{\partial \omega_0} = 2m\omega_0 \frac{\partial}{\partial D}$). Hier sollte nur verdeutlicht werden, dass die Federkonstante der externe Parameter des Systems ist.

4.4.3 Modellierung der Umgebung

Ohmsches Bad

Für die Spektraldichte der Umgebung muss eine konkrete Funktion angenommen werden. Zunächst wird ein Modell betrachtet, das keinerlei Gedächtnis zeigt, wo also der Gedächtniskern proportional einer δ -Funktion ist. Dies ist gerade bei sogenannter *ohmscher* Spektraldichte

$$J(\omega) = m\gamma_0\omega \quad (4.99)$$

der Fall – vgl. Gleichung (4.18) –

$$\gamma(t) = \Theta(t) \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \gamma_0 \cos(\omega t) = 2\gamma_0 \Theta(t) \delta(t) = \gamma_0 \delta(t) \quad , \quad (4.100)$$

und entspricht einer frequenzunabhängigen Dämpfung

$$\gamma(\omega) = \gamma_0 \quad . \quad (4.101)$$

Damit ist nach Gleichung (4.62) die dynamische Suszeptibilität

$$\chi(\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma_0\omega} = \frac{-1}{m} \frac{1}{(\omega - \omega_+)(\omega - \omega_-)} \quad (4.102)$$

bekannt, deren Pole

$$\omega_{\pm} = \pm\Omega - i\Gamma/2 \quad \text{mit} \quad \Omega = \Omega_0 \equiv \sqrt{\omega_0^2 - (\gamma_0/2)^2} \quad \text{und} \quad \Gamma = \gamma_0 \quad (4.103)$$

in der unteren Halbebene und spiegelsymmetrisch zur imaginären Achse liegen: $\omega_- = -\omega_+^*$, wie auch schon aus $\chi(-\omega^*) = \chi^*(\omega)$ folgt.

Die Suszeptibilität führt auf die lineare Antwortfunktion

$$\chi(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \chi(\omega) = e^{-\frac{\Gamma}{2}t} \frac{\sin(\Omega t)}{m\Omega} \Theta(t) \quad , \quad (4.104)$$

die der eines klassischen gedämpften Oszillators entspricht.

Aus den Gleichungen (4.70, 4.71) werden nun die Erwartungswerte von Ort und Impuls für $t > 0$ berechnet:

$$\langle x(t) \rangle = e^{-\frac{\Gamma}{2}t} \left\{ \langle x(0) \rangle \left(\cos(\Omega t) - \frac{\Gamma}{2\Omega} \sin(\Omega t) \right) + \langle p(0) \rangle \frac{\sin(\Omega t)}{m\Omega} \right\} \quad (4.105)$$

$$\begin{aligned} \langle p(t) \rangle = e^{-\frac{\Gamma}{2}t} \left\{ \langle p(0) \rangle \left(\cos(\Omega t) - \frac{\Gamma}{2\Omega} \sin(\Omega t) \right) \right. \\ \left. - \langle x(0) \rangle \left(m\Omega \left(1 - \frac{\Gamma^2}{4\Omega^2} \right) \sin(\Omega t) + m\Gamma \cos(\Omega t) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.106)$$

Im Grenzfall kleiner Zeiten geht der Erwartungswert des Impulses nicht gegen $\langle p(0) \rangle$:

$$\lim_{t \rightarrow +0} \langle p(t) \rangle = \langle p(0) \rangle - m\Gamma \langle x(0) \rangle \quad . \quad (4.107)$$

Dies liegt an dem Kraftstoß (Gl. 4.23), der beim Einschalten der Kopplung auf das System wirkt (Gl. 4.53) und beim ohmschen Bad δ -förmig ist:

$$m\gamma(t)x(0) = m\gamma_0\delta(t)x(0) \quad . \quad (4.108)$$

Der Impuls des Systems ändert sich bei $t = 0$ also unstetig von $\langle p(0) \rangle$ auf den in Gleichung (4.107) angegebenen Grenzwert – daher sind die Gleichungen (4.105, 4.106) auch nur für $t > 0$ gültig.

Mit dem Imaginärteil der Suszeptibilität (Gl. 4.63)

$$\chi''(\omega) = m\omega\gamma'(\omega)|\chi(\omega)|^2 = \frac{\omega}{m} \frac{\Gamma}{((\omega - \Omega)^2 + (\Gamma/2)^2) ((\omega + \Omega)^2 + (\Gamma/2)^2)} \quad (4.109)$$

erhält man nach einer Partialbruchzerlegung das Spektrum (Gl. 4.79)

$$C_{xx}(\omega) = \frac{\hbar}{m\Omega} \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \left(\frac{\Gamma/2}{(\omega - \Omega)^2 + (\Gamma/2)^2} - \frac{\Gamma/2}{(\omega + \Omega)^2 + (\Gamma/2)^2} \right), \quad (4.110)$$

das aus zwei Lorentz-Funktionen besteht, die mit dem frequenzabhängigen Bose-Faktor $(1 - e^{-\hbar\omega/kT})^{-1}$ gewichtet sind.

Als nächstes soll die Zustandssumme und mit ihrer Hilfe die stationären Unschärfen berechnet werden. Nach Gleichung (4.94) ist (mit $\nu = 2\pi kT/\hbar$)

$$Z = \frac{kT}{\hbar\omega_0} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n^2}{\omega_0^2 + \nu_n^2 + \gamma_0\nu_n} = \frac{kT}{\hbar\omega_0} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{n^2}{(n + i\omega_+/\nu)(n + i\omega_-/\nu)} \quad . \quad (4.111)$$

An dieser Stelle ist die Darstellung der Gammafunktion als unendliches Produkt nützlich [25, 3.1.15]

$$\Gamma(1 + z) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{n}{n + z} \left(\frac{n + 1}{n} \right)^z, \quad (4.112)$$

woraus wegen $\prod_{n=1}^N \frac{n+1}{n} = N + 1$

$$\prod_{n=1}^{\infty} \frac{n}{n+z_1} \frac{n}{n+z_2} = \Gamma(1+z_1)\Gamma(1+z_2) \lim_{N \rightarrow \infty} (N+1)^{-(z_1+z_2)} \quad (4.113)$$

folgt. Aufgrund des verbleibenden Grenzwertes ist dieses Produkt nur unter der Bedingung $z_1 + z_2 = 0$ endlich. Bei $\gamma_0 \neq 0$ gilt aber $\omega_+ \neq -\omega_-$, so dass für ohmsche Dämpfung keine Zustandssumme definiert werden kann. Dies resultiert aus der unphysikalischen Annahme eines Bades *ohne Gedächtnis*, in dem also Oszillatoren beliebig hoher Frequenz enthalten sind.

Drude-Bad

Die Spektraldichte muss derart modifiziert werden, dass sie für hohe Frequenzen abnimmt. Diese Eigenschaft hat die sogenannte *Drude-Spektraldichte*

$$J(\omega) = m\gamma_0 \frac{\omega}{1 + (\omega/\omega_c)^2} \quad , \quad (4.114)$$

mit der Abschneidefrequenz ω_c . Dem entspricht ein exponentiell abfallender Gedächtniskern

$$\gamma(t) = \Theta(t)\gamma_0\omega_c e^{-\omega_c t} \quad (4.115)$$

bzw. eine frequenzabhängige Dämpfung

$$\gamma(\omega) = \gamma_0 \frac{\omega_c}{\omega_c - i\omega} \quad . \quad (4.116)$$

Im Grenzfall großer Abschneidefrequenz geht aus diesem Modell das ohmsche hervor. Die dynamische Suszeptibilität des Drude-Bades ist

$$\chi(\omega) = \frac{1}{m} \frac{\omega_c - i\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)(\omega_c - i\omega) - i\gamma_0\omega_c\omega} \quad , \quad (4.117)$$

deren Pole durch die Nullstellen von

$$\omega^3 + i\omega_c\omega^2 - (\gamma_0\omega_c + \omega_0^2)\omega - i\omega_0^2\omega_c = 0 \quad (4.118)$$

gegeben sind. Bei einer ungeraden Anzahl von Polen muss aufgrund der Spiegelsymmetrie bezüglich der imaginären Achse ein Pol rein imaginär sein. Daher schreibt man

$$\omega_{1,2} = \pm\Omega - i\Gamma/2 \quad , \quad \omega_3 = -i\Lambda \quad . \quad (4.119)$$

Bei einem Polynom k -ten Grades ist die Summe der Nullstellen gleich dem negativen des $(k-1)$ -ten Koeffizienten (Vieta-Relation [25, 2.4.2.4]). Daher gilt noch

$$\omega_c = \Lambda + \Gamma \quad , \quad (4.120)$$

womit sich die Suszeptibilität als

$$\chi(\omega) = \frac{-1}{m} \frac{\omega + i(\Lambda + \Gamma)}{(\omega + \Omega + i\frac{\Gamma}{2})(\omega - \Omega + i\frac{\Gamma}{2})(\omega + i\Lambda)} \quad (4.121)$$

darstellen lässt. Die reellen Parameter Ω und Γ können mit der Cardanischen Formel berechnet werden. Im Folgenden wird aber nur mit der Näherung

$$\Omega \approx \Omega_0 \left(1 + \frac{\gamma_0}{2\omega_c} \frac{\Omega_0^2 - (\gamma_0/2)^2}{\Omega_0^2} \right) \quad , \quad \Gamma \approx \gamma_0 \left(1 + \frac{\gamma_0}{\omega_c} \right) \quad (4.122)$$

für $\omega_c \gg \omega_0, \gamma_0$ gerechnet. Mit wachsendem ω_c entfernt sich der Pol bei $-i\Lambda = -i(\omega_c - \Gamma)$ von der reellen Achse, so dass dort sein Einfluss immer schwächer wird. Im Grenzfall $\omega_c \rightarrow \infty$ ergibt sich so der ohmsche Fall.

Der Einfluss der Umgebung auf die Trägheit des Systems spiegelt sich in der Renormierung der Masse wider. Nach den Gleichungen (4.66) und (4.116) ist diese Korrektur

$$\delta m = -m \frac{\partial}{\partial \omega} \left(\gamma_0 \omega_c \frac{\omega}{\omega_c^2 + \omega^2} \right)_{\omega=0} = -m \frac{\gamma_0}{\omega_c} \quad (4.123)$$

im Grenzfall großer ω_c zu vernachlässigen und wird daher im Folgenden nicht weiter betrachtet.

Die lineare Antwortfunktion für das Drude-Bad ergibt sich unter Verwendung des Kürzels

$$\alpha = \frac{\Gamma}{(\Lambda - \frac{\Gamma}{2})^2 + \Omega^2} \quad (4.124)$$

zu

$$\chi(t) = \left(\left(1 + \alpha(\Lambda - \frac{\Gamma}{2}) \right) e^{-\frac{\Gamma}{2}t} \frac{\sin(\Omega t)}{m\Omega} + \frac{\alpha}{m} \left(e^{-\Lambda t} - e^{-\frac{\Gamma}{2}t} \cos(\Omega t) \right) \right) \Theta(t) \quad , \quad (4.125)$$

wobei α für große ω_c verschwindet, so dass sich wiederum das ohmsche Ergebnis ergibt.

Auch das Spektrum (Gl. 4.79) ähnelt dem ohmschen, es enthält nur einen zusätzlichen Faktor, der für ein schnelleres Abfallen bei großen Frequenzen $|\omega| \gg \omega_c$ sorgt:

$$C_{xx}(\omega) = \frac{\hbar}{m\Omega} \frac{\gamma_0}{\Gamma} \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \left(\frac{\Gamma/2}{(\omega - \Omega)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} - \frac{\Gamma/2}{(\omega + \Omega)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \right) \frac{\omega_c^2}{\omega^2 + \Lambda^2} \quad (4.126)$$

Die Zustandssumme ist

$$\begin{aligned} Z &= \frac{kT}{\hbar\omega_0} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n^2 (\nu_n + \omega_c)}{(\nu_n + i\Omega + \frac{\Gamma}{2})(\nu_n - i\Omega + \frac{\Gamma}{2})(\nu_n + \Lambda)} \\ &= \frac{kT}{\hbar\omega_0} \frac{\Gamma \left(1 + \frac{i\Omega + \Gamma/2}{\nu} \right) \Gamma \left(1 + \frac{-i\Omega + \Gamma/2}{\nu} \right) \Gamma \left(1 + \frac{\Lambda}{\nu} \right)}{\Gamma \left(1 + \frac{\omega_c}{\nu} \right)} \quad , \quad (4.127) \end{aligned}$$

wobei erneut die Produktdarstellung der Gammafunktion (Gl. 4.112) genutzt wurde – diesmal allerdings erfolgreich, da hier die Summen der Nullstellen von Nenner und Zähler aufgrund der Vieta-Relation gleich sind. Beim Differenzieren der freien Energie taucht die logarithmische Ableitung der Gammafunktion, die Digammafunktion [28, 6.3]

$$\psi(z) = \frac{d}{dz} \ln \Gamma(z) \quad (4.128)$$

auf. Weiterhin werden die partiellen Ableitungen der Resonanzen (Gl. 4.119) benötigt. In niedrigster Ordnung in γ_0/ω_c ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega}{\partial \omega_0} &= \frac{\omega_0}{\Omega_0} & \frac{\partial \Gamma}{\partial \omega_0} &= 0 & \frac{\partial \Lambda}{\partial \omega_0} &= 0 \\ \frac{\partial \Omega}{\partial \gamma_0} &= -\frac{\gamma_0}{4\Omega_0} & \frac{\partial \Gamma}{\partial \gamma_0} &= 1 & \frac{\partial \Lambda}{\partial \gamma_0} &= -1 \quad , \end{aligned} \quad (4.129)$$

womit sich wegen $\psi(z^*) = \psi^*(z)$

$$\Delta x_{\text{SS}}^2 = \frac{1}{m\omega_0} \frac{\partial F}{\partial \omega_0} = \frac{kT}{m\omega_0^2} + \frac{\hbar}{\pi m \Omega_0} \operatorname{Im} \psi \left(1 + \frac{\hbar(i\Omega_0 + \gamma_0/2)}{2\pi kT} \right) \quad (4.130)$$

ergibt. Der Polarwinkel der Resonanzen

$$\phi = \arctan \frac{\gamma_0}{2\Omega_0} \quad (4.131)$$

führt auf $\Omega_0 = \omega_0 \cos \phi$ und $\gamma_0 = 2\omega_0 \sin \phi$ und damit auf

$$\Delta x_{\text{SS}}^2 = \frac{kT}{m\omega_0^2} + \frac{\hbar}{m\pi\omega_0 \cos \phi} \operatorname{Im} \psi \left(1 + i e^{-i\phi} \frac{\hbar\omega_0}{2\pi kT} \right) \quad . \quad (4.132)$$

Die Impulsunschärfe ist entsprechend

$$\begin{aligned} \Delta p_{\text{SS}}^2 &= m^2 \omega_0^2 \Delta x_{\text{SS}}^2 + 2m\gamma_0 \frac{\partial F}{\partial \gamma_0} \\ &= m^2 \omega_0^2 \Delta x_{\text{SS}}^2 + \frac{2m\hbar\omega_0 \sin \phi}{\pi} \psi \left(1 + \frac{\hbar(\omega_c - \gamma_0)}{2\pi kT} \right) \\ &\quad - \frac{2m\hbar\omega_0 \sin \phi}{\pi \cos \phi} \operatorname{Re} \left[\psi \left(1 + i e^{-i\phi} \frac{\hbar\omega_0}{2\pi kT} \right) e^{-i\phi} \right] \quad . \end{aligned} \quad (4.133)$$

Der letzte Term kann noch mittels

$$\frac{\sin \phi}{\cos \phi} \operatorname{Re} [z e^{-i\phi}] = \operatorname{Im} \left[z \left(\frac{i \sin \phi + \cos \phi}{\cos \phi} - 1 \right) e^{-i\phi} \right] = \operatorname{Im} \left[\frac{z}{\cos \phi} - z e^{-i\phi} \right] \quad (4.134)$$

umgeschrieben werden, was zusammen mit der Ortsunschärfe

$$\Delta p_{\text{SS}}^2 = mkT - \frac{m\hbar\omega_0}{\pi \cos \phi} \operatorname{Im} \psi \left(1 + i e^{-i\phi} \frac{\hbar\omega_0}{2\pi kT} \right) \quad (4.135)$$

$$+ \frac{2m\hbar\omega_0}{\pi} \operatorname{Im} \left[\psi \left(1 + i e^{-i\phi} \frac{\hbar\omega_0}{2\pi kT} \right) e^{-i\phi} \right] \quad (4.136)$$

$$+ \frac{2m\hbar\omega_0 \sin \phi}{\pi} \psi \left(1 + \frac{\hbar(\omega_c - \gamma_0)}{2\pi kT} \right) \quad (4.137)$$

ergibt. Der klassische Grenzwert wird also durch drei Terme korrigiert. Der erste (4.135) entspricht genau der Korrektur der Ortsunschärfe (Gl. 4.132) – allerdings mit umgekehrtem Vorzeichen: Er vermindert die mittlere kinetische Energie um den Betrag, um den die mittlere potentielle Energie ansteigt. Der zweite Term (4.136) hingegen erhöht die Impulsunschärfe zusätzlich: Insgesamt wird auch die mittlere kinetische Energie durch den Einfluss des Bades erhöht. Der dritte Term (4.137) stammt von der mittleren Wechselwirkungsenergie im thermischen Gleichgewicht. Abbildung 4.1 zeigt die einzelnen Beiträge zu den Unschärfen als Funktion der Temperatur.

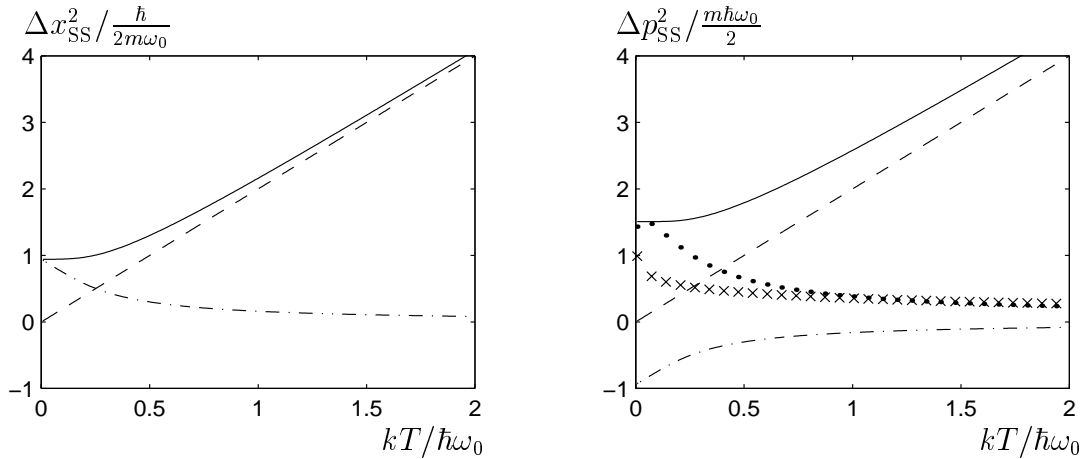


Abbildung 4.1: Stationäre Unschärfen als Funktionen der Temperatur. Die einzelnen Kurven sind: der klassische Grenzwert (– –), die Korrekturterme in (Gl. 4.132) bzw. in den Termen (4.135) (– · –), (4.136) (· · ·) und (4.137) (× ×), sowie die Summe aller Beiträge (—). Parameter: $\gamma_0 = 0, 2 \omega_0, \omega_c = 100 \omega_0$

Bei hohen Temperaturen $kT \gg \hbar\omega_c \gg \hbar\omega_0$ können die obigen Ausdrücke mit Hilfe der Entwicklung

$$\psi(1+z) = \frac{\pi^2}{6}z + o(|z|^2) \quad |z| \ll 1 \quad (4.138)$$

genähert werden. Es ergibt sich

$$\Delta x_{\text{SS}}^2 \approx \frac{kT}{m\omega_0^2} \left(1 + \frac{1}{12} \left(\frac{\hbar\omega_0}{kT} \right)^2 \right) , \quad (4.139)$$

bzw.

$$\Delta p_{\text{SS}}^2 \approx mkT \left(1 + \frac{1}{12} \frac{\hbar^2(\omega_0^2 + \gamma_0\omega_c)}{(kT)^2} \right) . \quad (4.140)$$

Anders als bei der Ortsunschärfe tritt hier die Kreisfrequenz $\sqrt{\omega_0^2 + \gamma_0\omega_c}$ auf. Diese entspricht aber nach Gleichung (4.21), (4.52) und (4.115)

$$V(x) = V_e(x) + m\gamma(0)x^2 = \frac{m}{2}(\omega_0^2 + \gamma_0\omega_c)x^2 \quad (4.141)$$

genau der des „nackten“ Systemoszillators, also ohne die Renormierung des Potentials durch die mittlere Wechselwirkung.

Für kleine Temperaturen $kT \ll \hbar\omega_0$ liefert die asymptotische Darstellung

$$\psi(1+z) = \ln z + \frac{1}{2z} - \frac{1}{12z^2} + o(|z|^{-4}) \quad (4.142)$$

wegen $\ln z = \ln |z| + i \arg z$

$$\psi \left(1 + ie^{-i\phi} \frac{\hbar\omega_0}{2\pi kT} \right) \approx \ln \left(\frac{\hbar\omega_0}{2\pi kT} \right) + i(\pi/2 - \phi) - i\pi e^{i\phi} \frac{kT}{\hbar\omega_0} + \frac{\pi^2}{3} e^{2i\phi} \left(\frac{kT}{\hbar\omega_0} \right)^2 . \quad (4.143)$$

Dies führt mit $\sin 2\phi / \cos \phi = 2 \sin \phi = \gamma_0 / \omega_0$ auf

$$\Delta x_{\text{SS}}^2 \approx \frac{\hbar}{2m\omega_0} \left(\frac{1 - 2\phi/\pi}{\cos \phi} + \frac{2\pi}{3} \frac{\gamma_0}{\omega_0} \left(\frac{kT}{\hbar\omega_0} \right)^2 \right) . \quad (4.144)$$

Bei $T = 0$ ergibt sich für schwache Dämpfung ($\gamma \ll \omega_0 \Rightarrow \phi \approx 0$) die Ortsunschärfe eines Oszillators im Grundzustand $\Delta x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_0}$ – allerdings nur näherungsweise: Mit zunehmender Dämpfung nimmt die Ortsunschärfe ab. Für die Impulsunschärfe gilt

$$\Delta p_{\text{SS}}^2 \approx \frac{m\hbar\omega_0}{2} \left(1 - \frac{\gamma_0^2}{2\omega_0^2} \right) \left(\frac{1 - 2\phi/\pi}{\cos \phi} \right) + \frac{m\hbar\gamma_0}{\pi} \ln \left(\frac{\omega_c}{\omega_0} \right) , \quad (4.145)$$

sie hängt erst in vierter Ordnung von der Temperatur ab. Auch die Impulsunschärfe nähert sich für schwache Dämpfung dem Wert des Grundzustandes $\Delta p^2 = m\hbar\omega_0/2$. Sie wächst allerdings mit steigender Dämpfung an, da die logarithmische Korrektur überwiegt.

4.5 Umgebung: Mikroskopisches Modell

Bisher wurde der Hamiltonoperator des Caldeira-Leggett-Modells vorausgesetzt, ohne damit eine spezifische physikalische Realisierung zu verbinden. In diesem Abschnitt wird nun ausgehend von einer mikroskopischen Beschreibung solch ein Anwendungsbeispiel dargestellt.⁶

Ein geladenes Teilchen der Masse m und der Ladung $q = Ze$ sei in einem dreidimensionalen Potential gespeichert. Dabei wechselwirkt es mit dem elektromagnetischen Feld. Dann ist der Hamiltonoperator

$$H = \frac{(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{x}))^2}{2m} + V(\vec{x}) + \sum_j \hbar\omega_j a_j^\dagger a_j \quad , \quad (4.146)$$

wobei der Modenindex j den Wellenvektor \vec{k} und die Polarisation λ bestimmt. Das Vektorpotential in Coulombbeziehung ist durch

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_j \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 V \omega_j}} \vec{e}_j f(\omega_j) \left(a_j e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{r}} + a_j^\dagger e^{-i\vec{k}_j \cdot \vec{r}} \right) \quad , \quad (4.147)$$

gegeben [29, S.31f], wobei V das Quantisierungsvolumen ist und die frequenzabhängige Abschneidefunktion

$$f(\omega_j) = \begin{cases} 1 & : \omega_j \ll \omega_c \\ 0 & : \omega_j \gg \omega_c \end{cases} \quad (4.148)$$

Moden aus der Betrachtung ausschließt, deren Frequenz größer als eine gewisse Maximalfrequenz des Modells ω_c sind. Auf die genaue Form dieses Formfaktors kommt es an dieser Stelle noch nicht an; später werden spezifische Ansätze gemacht werden. Im Folgenden ist das Kürzel $\vec{\mathcal{A}}_j = \sqrt{\hbar/2\epsilon_0 V \omega_j} \vec{e}_j f(\omega_j)$ nützlich, das bei einer Entwicklung nach linearen Polarisationen \vec{e}_j reell ist. Das Teilchen sei durch das Potential $V(\vec{x})$ stark lokalisiert, so dass die typische Auslenkung $\Delta\vec{x}$ beträgt. Für Moden des Feldes mit kleiner Wellenzahl kann daher

$$\vec{A}_j(\vec{x}) \approx \vec{A}(\vec{0}) = \sum_j \vec{\mathcal{A}}_j \left(a_j + a_j^\dagger \right) \quad (4.149)$$

genähert werden (Lamb-Dicke-Näherung). Die Güte dieser Näherung wird durch den Lamb-Dicke-Parameter

$$\eta_j \equiv |\vec{k}_j \cdot \Delta\vec{x}| \ll 1 \quad (4.150)$$

⁶Andere mikroskopische Modelle, z. B. Kopplung eines Elektrons in einem Festkörper an optische oder akustische Polaronen, sind in [20] dargestellt.

bestimmt. Der Hamiltonoperator in Lamb-Dicke-Naherung wird nun mit dem Verschiebeoperator $D = \exp \left[q \vec{x} \cdot \vec{A}(\vec{0}) / i\hbar \right]$ unitar transformiert. Es gilt

$$D\vec{p}D^\dagger = \vec{p} + q\vec{A}(\vec{0}) \quad , \quad D\vec{x}D^\dagger = \vec{x} \quad , \quad Da_jD^\dagger = a_j + \frac{i}{\hbar}q\vec{x} \cdot \vec{A}_j \quad , \quad (4.151)$$

was bei reellem \vec{A}_j auf

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) + \sum_j \hbar\omega_j a_j^\dagger a_j + 2q\vec{x} \cdot \vec{A}_j \omega_j \frac{a_j - a_j^\dagger}{2i} + \frac{\omega_j}{\hbar} (q\vec{x} \cdot \vec{A}_j)^2 \quad (4.152)$$

fuhrt. Ferner wird die Krummung des Potentials in y - und z -Richtung als so stark angenommen, dass sich das Teilchen nur in x -Richtung bewegt (die charakteristischen Frequenzen ω_y und ω_z seien groer als die Obergrenze ω_c des Modells). Dann genugt eine Betrachtung in einer Dimension, und es ergibt sich mit

$$x_j = \sqrt{\frac{2\hbar}{m_j\omega_j}} \frac{a_j - a_j^\dagger}{2i} \quad \text{und} \quad d_j = -\sqrt{\frac{m_j}{\epsilon_0 V}} q\omega_j f(\omega_j) \vec{e}_x \cdot \vec{e}_j \quad (4.153)$$

der Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sum_j \hbar\omega_j a_j^\dagger a_j - d_j x_j x + \frac{d_j^2}{2m_j\omega_j^2} x^2 \quad . \quad (4.154)$$

Zur genaueren Bestimmung der Umgebungsmoden muss das Strahlungsfeld naher spezifiziert werden.

4.5.1 Eindimensionales Strahlungsfeld

Das Teilchen befinde sich in einem Quantisierungsvolumen mit reflektierenden Wanden, dessen Ausdehnung R in x, y -Richtung so klein sei, dass die Moden in diesen Richtungen nicht angeregt werden konnen ($R \ll \pi c / \omega_c$). Die Ausdehnung L in z -Richtung sei hingegen so gro, dass die Wellenzahlen jener Moden

$$k = \frac{\pi}{L}n \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.155)$$

sehr dicht beieinander liegen, bzw. dass der Frequenzabstand $\Delta\omega_k = \pi c / L$ klein gegen die charakteristische Bewegungsfrequenz des Systems ω_0 ist. Ein solches eindimensionale Strahlungsfeld ist beispielsweise in Mikrowellenleitern oder in Einmoden-Glasfasern realisiert. Die dicht liegenden Moden konnen durch ein Kontinuum approximiert werden. Dabei geht die Summe uber die Moden in ein Frequenzintegral uber:

$$\sum_j = \frac{L}{\pi c} \sum_k \Delta\omega_k \sum_\lambda \rightarrow \frac{L}{\pi c} \int_0^\infty d\omega_k \sum_\lambda \quad . \quad (4.156)$$

Damit ergibt sich für die Spektraldichte

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_j \frac{d_j^2}{m_j \omega_j} \delta(\omega - \omega_j) \rightarrow \frac{\pi}{2} \frac{L}{\pi c} \int_0^\infty d\omega_k \frac{q^2 \omega_k}{\epsilon_0 L R^2} f^2(\omega_k) \delta(\omega - \omega_k), \quad (4.157)$$

wobei hier nur noch die x -polarisierten Moden beitragen. Die Spektraldichte ist also

$$J(\omega) = \frac{q^2}{2\epsilon_0 c R^2} f^2(\omega) \omega \quad . \quad (4.158)$$

Abhängig vom Ansatz des Formfaktors $f(\omega)$ ergibt sich für dieses Modell daher eine ohmsche

$$f(\omega) = 1 \quad \Rightarrow \quad J(\omega) = m\gamma_0 \omega \quad , \quad (4.159)$$

bzw. eine Drude-Spektraldichte

$$f^2(\omega) = \frac{1}{1 + (\omega/\omega_c)^2} \quad \Rightarrow \quad J(\omega) = m\gamma_0 \frac{\omega}{1 + (\omega/\omega_c)^2} \quad , \quad (4.160)$$

wobei die Dämpfungskonstante

$$\gamma_0 = \frac{1}{m} \frac{q^2}{2\epsilon_0 c R^2} \quad (4.161)$$

durch die mikroskopischen Parametern des Modells bestimmt wird.

4.5.2 Dreidimensionales Strahlungsfeld

Bei einem kubischen Quantisierungsvolumen mit periodischen Randbedingungen ergibt sich im Übergang zu kontinuierlichen Feldmoden für die Spektraldichte [29, S.31f]

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_j \frac{d_j^2}{m_j \omega_j} \delta(\omega - \omega_j) \rightarrow \frac{\pi}{2} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k \frac{q^2 \omega_k}{\epsilon_0 V} f^2(\omega_k) \delta(\omega - \omega_k) \sum_\lambda \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{\vec{k},\lambda} \quad (4.162)$$

Zur Berechnung empfehlen sich Kugelkoordinaten $d^3 k = c^{-3} \omega_k^2 d\omega_k \sin \vartheta d\vartheta d\phi$. Die Polarisation der Feldmoden wird dann so gewählt, dass $\vec{e}_{\vec{k},1}$ in einer Ebene mit (bzw. $\vec{e}_{\vec{k},2}$ senkrecht zu) \vec{x} und \vec{k} liegt. Dann gilt $\vec{e}_x \cdot \vec{e}_{\vec{k},1} = \sin \vartheta$, $\vec{e}_x \cdot \vec{e}_{\vec{k},2} = 0$ und damit

$$\begin{aligned} J(\omega) &= \frac{\pi}{2} \frac{q^2}{\epsilon_0 (2\pi)^3 c^3} \int_0^\infty d\omega_k \omega_k^3 f^2(\omega_k) \delta(\omega - \omega_k) \int_0^\pi d\vartheta \sin^2 \vartheta \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= \frac{q^2}{6\pi \epsilon_0 c^3} f^2(\omega) \omega^3 \quad . \end{aligned} \quad (4.163)$$

Mit dem Ansatz für den Formfaktor

$$f^2(\omega) = \frac{1}{1 + (\omega/\omega_c)^2} \quad (4.164)$$

ergibt sich mit

$$\gamma_0 = \frac{1}{m} \frac{q^2 \omega_0^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \quad (4.165)$$

die Spektraldichte

$$J(\omega) = m\gamma_0 \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \frac{\omega}{1 + (\omega/\omega_c)^2} \quad (4.166)$$

des dreidimensionalen Strahlungsbades [27]. Sie kann in einen ohmschen und einen Drude-Anteil zerlegt werden:

$$J(\omega) = \frac{m\gamma_0\omega}{\omega_0^2} \frac{\omega^2}{1 + (\omega/\omega_c)^2} = m\gamma_0 \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2} \omega \left(1 - \frac{1}{1 + (\omega/\omega_c)^2}\right) \quad (4.167)$$

Damit folgt aus Gleichung (4.18) der Gedächtniskern

$$\begin{aligned} \gamma(t) &= \Theta(t)\gamma_0 \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \cos(\omega t) \left(1 - \frac{1}{1 + (\omega/\omega_c)^2}\right) \\ &= \gamma_0 \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2} \left(\delta(t) - \Theta(t)\omega_c e^{-\omega_c t}\right) \quad , \end{aligned} \quad (4.168)$$

bzw. die frequenzabhängige Dämpfung

$$\gamma(\omega) = \gamma_0 \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2} \frac{\omega}{\omega + i\omega_c} \quad (4.169)$$

Die Renormierung der Masse (Gl. 4.66)

$$\delta m = -m \frac{\partial}{\partial \omega} \left(\gamma_0 \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2} \frac{-\omega\omega_c}{\omega^2 + \omega_c^2} \right)_{\omega=0} = m \frac{\gamma_0 \omega_c}{\omega_0^2} \quad (4.170)$$

ist in diesem Fall nicht vernachlässigbar, da sie mit wachsender Abschneidefrequenz größer wird. Dabei ist zu beachten, dass $\gamma_0\omega_c$ nicht größer als ω_0^2 werden darf, da sonst die Massenrenormierung größer als die beobachtete Masse würde. Dies entspräche aber einer negativen „nackten“ Masse und würde zu unphysikalischem Verhalten führen. Wird nun mit der renormierten Dämpfung (Gl. 4.65)

$$\gamma_r(\omega) = \gamma(\omega) + i\omega \frac{\delta m}{m} = \frac{\gamma_0 \omega_c}{\omega_0^2} \frac{\omega^2}{\omega_c - i\omega} \quad (4.171)$$

gerechnet und dabei auch die Kreisfrequenz und die Dämpfungskonstante auf die renormierte Masse $M = m + \delta m$ bezogen

$$\omega_0 = \sqrt{D/M} \quad , \quad \gamma_0 = \frac{1}{M} \frac{q^2 \omega_0^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \quad , \quad (4.172)$$

so führt dies auf die dynamische Suszeptibilität (Gl. 4.67)

$$\chi(\omega) = \frac{1}{M} \frac{\omega_c - i\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)(\omega_c - i\omega) - i\frac{\gamma_0\omega_c}{\omega_0^2}\omega^3} \quad . \quad (4.173)$$

Wie bei einem Drude-Bad ergeben sich drei Pole

$$\omega_{1,2} = \pm\Omega - i\Gamma/2 \quad , \quad \omega_3 = -i\Lambda \quad (4.174)$$

aus den Wurzeln der kubischen Gleichung

$$\left(1 - \frac{\gamma_0\omega_c}{\omega_0^2}\right)\omega^3 + i\omega_c\omega^2 - \omega_0^2\omega - i\omega_0^2\omega_c = 0 \quad . \quad (4.175)$$

Der Pol bei $\omega = -i\Lambda$ strebt für $\omega_c \rightarrow \omega_0^2/\gamma_0$ gegen $-i\infty$. Größere Abschnidefrequenzen ergeben, abgesehen von der negativen Masse (s. o.), auch hier keine physikalisch sinnvollen Ergebnisse: Es würde sich ein Pol mit positivem Imaginärteil ergeben, womit die Kausalität der Antwortfunktion verletzt wäre.

Mit den Gleichungen (4.63, 4.79) kann nun das Spektrum berechnet werden

$$C_{xx}(\omega) = \frac{\hbar}{m\Omega} \frac{\gamma_0}{\Gamma} \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \left(\frac{\Gamma/2}{(\omega - \Omega)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} - \frac{\Gamma/2}{(\omega + \Omega)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \right) \frac{\omega_c^2}{\omega^2 + \Lambda^2} \frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \gamma_0\omega_c} \quad , \quad (4.176)$$

das im Vergleich zum Drude-Bad einen zusätzlichen Faktor $\propto \omega^2$ aufweist, der Bewegungen bei kleinen Frequenzen $\omega \ll \omega_0$ unterdrückt und für große Frequenzen $\omega \gg \omega_c$ durch den Drude-Faktor $\omega_c^2/(\omega^2 + \Lambda^2)$ kompensiert wird.

Die hier berechneten Spektren bei Kopplung an die drei untersuchten Bäder (ohmsches Bad (Gl. 4.110), Drude-Bad (Gl. 4.126) und dreidimensionales Strahlungsbad (Gl. 4.176)) sind in Kapitel 5 zusammen mit den Ergebnissen der Mastergleichung abgebildet (Abb. 5.1).

4.6 Born- und Markow-Näherung

Das in diesem Kapitel vorgestellte Modell kommt ohne einige der Näherungen aus, die zur Herleitung der Mastergleichung (s. Kap. 3) nötig waren, nämlich die Markow- und die Born-Näherung. Deren Einfluss kann nun abgeschätzt werden, indem sie nachträglich in die exakten Lösungen des Caldeira-Leggett-Modells eingebaut werden.

Die Suszeptibilität des harmonischen Oszillators (Gl. 4.62)

$$\chi(\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma(\omega)} \quad (4.177)$$

wird wesentlich durch ihre Pole bestimmt. Diese ergeben sich als Lösungen von

$$\omega^2 + i\omega\gamma(\omega) - \omega_0^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \omega = -i\frac{\gamma(\omega)}{2} \pm \omega_0 \sqrt{1 - \left(\frac{\gamma(\omega)}{2\omega_0}\right)^2} . \quad (4.178)$$

Diese Bestimmungsgleichung hilft natürlich wenig, da die Dämpfung $\gamma(\omega)$ noch von der Frequenz abhängt.

Bei schwacher Kopplung zwischen System und Bad ($|\gamma(\omega)| \ll |\omega_0|$) liegen die Lösungen in der Nähe von $\pm\omega_0$. Dort kann die Dämpfung nach der Frequenz entwickelt werden. Die nullte Ordnung, also konstantes $\gamma(\omega)$, entspricht der Markow-Näherung. Damit liegen die Nullstellen des Nenners bei

$$\omega_{\pm} = -i\frac{\gamma(\pm\omega_0)}{2} \pm \omega_0 \sqrt{1 - \left(\frac{\gamma(\pm\omega_0)}{2\omega_0}\right)^2} , \quad (4.179)$$

also wegen $\gamma(-\omega) = \gamma^*(\omega)$ symmetrisch zur imaginären Achse: $\omega_+ = -\omega_-^*$. Mit der Aufspaltung in Real- und Imaginärteil $\omega_{\pm} = \pm\Omega - i\Gamma/2$ erhält man

$$\chi(\omega) \approx \frac{-1}{m} \frac{1}{(\omega + \Omega + i\frac{\Gamma}{2})(\omega - \Omega + i\frac{\Gamma}{2})} \quad (4.180)$$

also die Suszeptibilität der ohmschen Umgebung (vgl. Gl. 4.102).

Eine verbesserte Näherung berücksichtigt bei der Entwicklung von $\gamma(\omega)$ auch die lineare Ordnung. Mit den Kürzeln $\gamma_{\pm} = \gamma(\pm\omega_0)$ und $\partial_{\omega}\gamma_{\pm} = \frac{\partial\gamma}{\partial\omega}(\pm\omega_0)$ folgt mit Gleichung (4.178)

$$(1 + i\partial_{\omega}\gamma_{\pm})\omega^2 + i(\gamma_{\pm} \mp \omega_0\partial_{\omega}\gamma_{\pm})\omega - \omega_0^2 = 0 \quad (4.181)$$

$$\Rightarrow \quad \omega_{\pm} = \frac{-i(\gamma_{\pm} \mp \omega_0\partial_{\omega}\gamma_{\pm}) \pm 2\omega_0 \sqrt{1 + i\partial_{\omega}\gamma_{\pm} - \left(\frac{\gamma_{\pm} \mp \omega_0\partial_{\omega}\gamma_{\pm}}{2\omega_0}\right)^2}}{2(1 + i\partial_{\omega}\gamma_{\pm})} . \quad (4.182)$$

Wiederum ergeben sich zwei Pole, also eine quasi-ohmsche Dämpfung. Die Pole sind allerdings durch die lineare Korrektur in $\gamma(\omega)$ gegenüber dem Ergebnis der Markow-Näherung verschoben.

Ausgehend von Gleichung (4.178) kann auch anders genähert werden: Ebenfalls aufgrund der schwachen Kopplung kann in $|\gamma(\omega)/\omega_0| \ll 1$ entwickelt werden:

$$\omega = \omega_0 \left(\pm 1 - i\frac{\gamma(\omega)}{2\omega_0} \mp \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma(\omega)}{2\omega_0}\right)^2 + o\left(\left|\frac{\gamma(\omega)}{\omega_0}\right|^4\right) \right) . \quad (4.183)$$

In niedrigster Ordnung wird nur der in $\gamma(\omega)$ lineare Anteil berücksichtigt – dies entspricht der Born-Näherung.

Beide Näherungen gehen von einer schwachen Kopplung aus und können daher nicht unabhängig voneinander betrachtet werden (siehe auch Abschnitt 3.5.2).

Die Güte der Born-Näherung hängt allerdings von der *Größe* der Dämpfung im Verhältnis zur Frequenz ab, während es bei der Markow-Näherung auf die *Frequenzabhängigkeit* der Dämpfung ankommt. Beide Näherungen werden nun kombiniert, indem $\gamma(\omega)$ in Gleichung (4.183) wiederum konstant angenommen wird (Markow), was wegen $\gamma(-\omega) = \gamma^*(\omega)$ auf

$$\Omega = \omega_0 + \frac{1}{2}\gamma''(\omega_0) \quad \text{und} \quad \Gamma = \gamma'(\omega_0) \quad (4.184)$$

führt, oder (verbessert Markow) linear in ω .

Ausgehend von einem Drude-Bad (Gl. 4.116) werden nun die Pole ω_{\pm} exakt, bzw. mit den genannten Näherungen berechnet (Abb. 4.2). Es zeigt sich, dass eine Abweichung aufgrund der Markow-Näherung allein (oben) hauptsächlich bei geringer Abschnidefrequenz zum Tragen kommt. Dies ist verständlich, da die Frequenzabhängigkeit der Dämpfung im Grenzfall großer Abschnidefrequenz verschwindet. Weiterhin ist zu bemerken, dass sich mit der linearen Erweiterung der Markow-Näherung tatsächlich eine deutliche Verbesserung ergibt. In der Kombination von Born- und Markow-Näherung (unten) überwiegt für große ω_c die Abweichung aufgrund der Störungsrechnung. Die Verbesserung der erweiterten gegenüber der Markow-Näherung ist wiederum zu erkennen, allerdings wird hier nicht das exakte, sondern das Ergebnis der Born-Näherung reproduziert. Immerhin gelingt es so, den von der Markow-Näherung stammenden Anteil der Abweichung zu eliminieren.

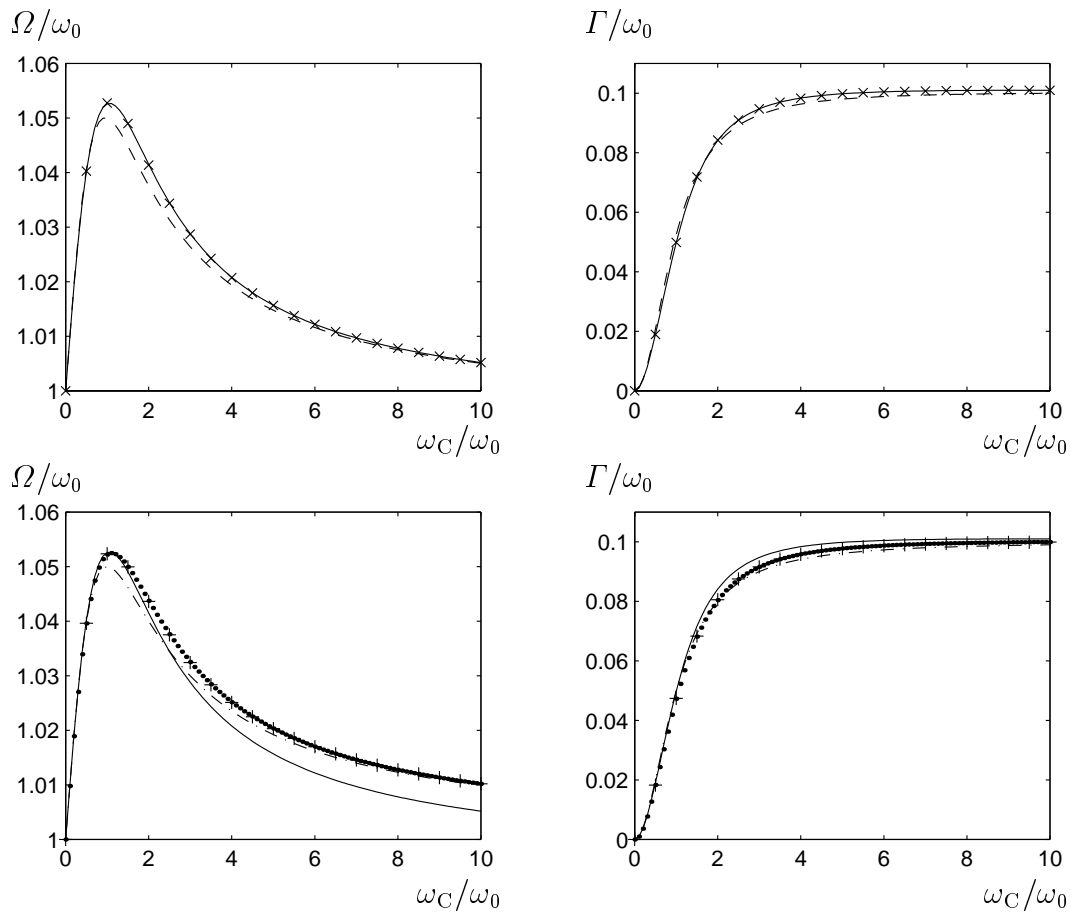


Abbildung 4.2: Real- und Imaginärteil der Pole. Oben: Exakt (—), Markow-Näherung (— —) und verbesserte Markow-Näherung ($\times \times$). Unten: Exakt (—), Born-Näherung (\dots), Born- und Markow-Näherung ($-\cdot-$) und Born- und verbesserte Markow-Näherung ($++$) Parameter: $\gamma_0 = 0,2 \omega_0$.

Kapitel 5

Mastergleichung vs. exakte Beschreibung

5.1 Mastergleichung für den Oszillator

In Kapitel 3 wurde die Beschreibung der reduzierten Dynamik mit Hilfe einer Mastergleichung vorgestellt. Sie wird nun auf das im letzten Kapitel analytisch – und ohne Näherungen – gelöste spezielle System angewandt, bei dem sowohl Teilsystem als auch Umgebung aus harmonischen Oszillatoren bestehen. Ausgehend vom Hamiltonoperator dieses Modells

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{D x^2}{2}}_{H_S} + \underbrace{\sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2 x_j^2}{2}}_{H_B} - \underbrace{\sum_{j=1}^N d_j x_j x}_{H_W} + \underbrace{m\gamma(0)x^2}_{H_{\text{ren}}} \quad , \quad (5.1)$$

der sich aus Gleichung (4.20) und dem effektiven Potential des Systemoszillators $V_e(x) = \frac{1}{2}Dx^2$ (Gl. 4.52) ergibt, soll also die Mastergleichung (Gl. 3.93) mit dem Lindblad-Operator (Gl. 3.92)

$$-i\mathcal{L}_d = \sum_k \frac{1}{i\hbar} [\hbar\Delta_k S_k S_k^\dagger, \cdot] - \frac{1}{2}\Gamma_k (S_k S_k^\dagger \cdot + \cdot S_k S_k^\dagger - 2 S_k^\dagger \cdot S_k) \quad (5.2)$$

aufgestellt werden.

Abschnitt 3.4 folgend sind zunächst die Eigenzustände des System-Hamiltonoperators zu bestimmen, um anschließend die Kopplung nach den Übergangsoperatoren zwischen diesen Zuständen zu zerlegen (Gl. 3.71). Obwohl auch der Renormierungs-Anteil H_{ren} ein Systemoperator ist, wird in diesem Schritt nur mit H_S gerechnet, denn H_S enthält über das effektive Potential den mittleren Einfluss der Umgebung und bestimmt daher in guter Näherung die Resonanzen des Systems. Die Systemoperatoren werden mit $\omega_0 = \sqrt{D/m}$ und

$a = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}} p$ umgeschrieben. Dies führt auf

$$H_S = \hbar\omega_0 \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad \text{und} \quad H_W = - \sum_{j=1}^N d_j x_j \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (a^\dagger + a) \quad (5.3)$$

Der Systemanteil der Kopplung ist offensichtlich durch die Übergangsoperatoren a und a^\dagger zwischen den Eigenzuständen $|n\rangle$ des Systemoszillators gegeben, die beide an denselben Badoperator koppeln. Mit

$$S_- = a \quad , \quad S_+ = a^\dagger \quad \text{und} \quad B = \sum_{j=1}^N \frac{-d_j x_j}{\kappa\sqrt{2\hbar m\omega_0}} \quad (5.4)$$

folgt daher die gesuchte Zerlegung:

$$H_W = \hbar\kappa B \otimes \sum_{k=\pm} S_k \quad . \quad (5.5)$$

Wegen $[a^\dagger a, \cdot] = [aa^\dagger, \cdot]$ ergibt sich mit $\Delta \equiv \Delta_+ + \Delta_-$ für den Lindblad-Operator (Gl. 5.2)

$$\begin{aligned} -i\mathcal{L}_d = & -i\Delta[a^\dagger a, \cdot] - \frac{1}{2}\Gamma_+ \left(a^\dagger a \cdot + \cdot a^\dagger a - 2a \cdot a^\dagger \right) \\ & - \frac{1}{2}\Gamma_- \left(aa^\dagger \cdot + \cdot aa^\dagger - 2a^\dagger \cdot a \right) \quad , \quad (5.6) \end{aligned}$$

so dass nun noch die Übergangsraten Γ_\pm und Frequenzverschiebungen Δ_\pm zu bestimmen sind.

Die Zeitabhängigkeit des Badanteils im Wechselwirkungsbild kann nach Gleichung (4.22) durch die Restkraft ausgedrückt werden,

$$\tilde{B}(t) = \frac{-\sum_{j=1}^N d_j x_j^{\text{hom}}(t)}{\kappa\sqrt{2\hbar m\omega_0}} = \frac{-F(t)}{\kappa\sqrt{2\hbar m\omega_0}} \quad , \quad (5.7)$$

denn die freie Baddynamik entspricht den homogenen Lösungen der Umgebungsschwinger (4.9):

$$\tilde{x}_j(t) = e^{i\mathcal{L}_B t} x_j = x_j^{\text{hom}}(t) \quad . \quad (5.8)$$

Daher ist auch die für das System relevante Bad-Korrelationsfunktion (Gl. 3.74)

$$g(t) = \langle \tilde{B}(t)\tilde{B}(0) \rangle = \frac{\langle F(t)F(0) \rangle}{2\kappa^2\hbar m\omega_0} = \frac{L(t)}{2\kappa^2 m\omega_0} \quad (5.9)$$

bis auf einen konstanten Faktor gleich der Kraft-Kraft-Korrelation des Caldeira-Leggett-Modells (Gl. 4.44). Aus ihr ergibt sich die Spektralfunktion (Gl. 3.76)

$$G(\omega) = \int_0^\infty dt e^{i\omega t} g(t) = \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \frac{L(t)}{2\kappa^2 m\omega_0} \quad , \quad (5.10)$$

deren Werte bei den Frequenzen von S_{\pm} , also bei $\pm\omega_0$

$$G_{\pm} \equiv G(\omega) \Big|_{\omega=\pm\omega_0} \quad (5.11)$$

die im Lindblad-Operator (Gl. 5.6) auftretenden Übergangsraten und Frequenzverschiebungen (Gl. 3.91)

$$\Gamma_{\pm} \equiv 2\kappa^2 \operatorname{Re} G_{\pm} \quad , \quad \Delta_{\pm} \equiv \kappa^2 \operatorname{Im} G_{\pm} \quad (5.12)$$

bestimmen.

Die Übergangsraten

$$\Gamma_{\pm} = \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dt e^{\pm i\omega_0 t} \frac{L(t)}{m\omega_0} \quad (5.13)$$

werden mit Hilfe des Fluktuations-Dissipations-Theorems (s. Gl. 4.49)

$$L(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} L(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \frac{2m\omega\gamma'(\omega)}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \quad (5.14)$$

berechnet, wenn noch die Symmetrie $\gamma(-\omega) = \gamma^*(\omega)$ ausgenutzt wird:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\pm} &= \frac{1}{\omega_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\omega\gamma'(\omega)}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \operatorname{Re} \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dt e^{-i(\omega \mp \omega_0)t} \\ &= \frac{1}{\omega_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\omega\gamma'(\omega)}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \delta(\omega \mp \omega_0) \\ &= \pm \frac{\gamma'(\omega_0)}{1 - e^{\mp \hbar\omega_0/kT}} \quad . \end{aligned} \quad (5.15)$$

Die Übergangsraten können offenbar durch die Dämpfungskonstante

$$\Gamma \equiv \Gamma_+ - \Gamma_- = \gamma'(\omega_0) \quad (5.16)$$

und die mittlere Anregungszahl eines harmonischen Oszillators im thermischen Gleichgewicht $\bar{n} = (\exp[\hbar\omega_0/kT] - 1)^{-1}$ dargestellt werden:

$$\Gamma_+ = (\bar{n} + 1)\Gamma \quad , \quad \Gamma_- = \bar{n}\Gamma \quad . \quad (5.17)$$

Die Frequenzverschiebung

$$\Delta = \Delta_+ + \Delta_- = \operatorname{Im} \int_0^{\infty} dt \cos \omega_0 t \frac{L(t)}{m\omega_0} \quad (5.18)$$

kann wegen (Gl. 4.44)

$$\operatorname{Im} L(t) = -\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \sin(\omega t) = \frac{d}{dt} \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} J(\omega) \cos(\omega t) \quad (5.19)$$

mit partieller Integration

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{m\omega_0} \left[\cos(\omega_0 t) \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} J(\omega) \cos(\omega t) \right]_0^\infty \\ &\quad + \frac{1}{m} \int_0^\infty dt \sin(\omega_0 t) \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} J(\omega) \cos(\omega t) \end{aligned} \quad (5.20)$$

berechnet werden. Da der Gedächtniskern (Gl. 4.18)

$$\gamma(t) = \Theta(t) \frac{1}{m} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} J(\omega) \cos(\omega t) \quad (5.21)$$

für große Zeiten verschwindet, trägt der obere Randterm nichts bei. Damit erhält man schließlich

$$\begin{aligned} \Delta_+ + \Delta_- &= -\frac{1}{\omega_0} \frac{1}{m\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} J(\omega) + \int_{-\infty}^\infty dt \sin(\omega_0 t) \frac{\Theta(t)}{m\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} J(\omega) \cos(\omega t) \\ &= -\frac{\gamma(0)}{\omega_0} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty dt \sin(\omega_0 t) \gamma(t) \\ &= -\frac{\gamma(0)}{\omega_0} + \frac{1}{2} \gamma''(\omega_0) \quad , \end{aligned} \quad (5.22)$$

wobei im letzten Schritt noch Gleichung (4.46) genutzt wurde.

Zur Dynamik des Lindblad-Operators kommt nun noch die unitäre Entwicklung durch den Systemanteil des Hamiltonoperators. Dabei kompensiert der Renormierungs-Anteil des Hamiltonoperators

$$H_{\text{ren}} = \frac{\hbar}{2\omega_0} \gamma(0) (a^\dagger + a)^2 = \hbar \frac{\gamma(0)}{\omega_0} (a^\dagger a + \frac{1}{2}) + \hbar \frac{\gamma(0)}{2\omega_0} (a^{\dagger 2} + a^2) \quad (5.23)$$

den (unter Umständen divergenten) ersten Teil der Frequenzverschiebung $-\frac{\gamma(0)}{\omega_0}$. In der gemachten Säkularnäherung wurden alle Terme proportional zu a^2 und $a^{\dagger 2}$ weggelassen, daher muss konsistenterweise auch der hier auftauchende Term $\propto (a^{\dagger 2} + a^2)$ vernachlässigt werden: Eventuelles durch die Ankopplung an die Umgebung hervorgerufenen Quetschen des Oszillators wird in der Mastergleichung nicht beschrieben. Lindblad-Operator und Renormierungs-Anteil ergeben zusammen die Frequenzverschiebung

$$\Delta = \frac{1}{2} \gamma''(\omega_0) \quad , \quad (5.24)$$

die bei schwacher Kopplung klein gegen ω_0 ist. Dies rechtfertigt die zu Beginn dieses Kapitels getroffene Entscheidung, das System in der Eigenbasis von H_S zu beschreiben.

Bei der Berechnung der Systemfrequenz ist eventuell noch ein weiterer Effekt zu berücksichtigen: Aus der exakten Beschreibung des Caldeira-Leggett-Modells

(s. 4.4.1) ist bekannt, dass bei bestimmten Bad-Modellen ein Teil des Umgebungseinflusses in einer Renormierung der Masse ausgedrückt werden kann. Die beobachtete Masse ist dann

$$M = m + \delta m \quad \text{mit} \quad \frac{\delta m}{m} = -\frac{\partial \gamma''(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} \quad (5.25)$$

und der Hamiltonoperator für das System hat die Form

$$H_S = \frac{p^2}{2(M-\delta m)} + \frac{Dx^2}{2} = \frac{p^2}{2M} \left(1 + \frac{\delta m}{M-\delta m} \right) + \frac{Dx^2}{2} = \hbar \omega_0 (a^\dagger a + \frac{1}{2}) + \frac{p^2}{2M} \frac{\delta m}{m}, \quad (5.26)$$

mit $\omega_0 = \sqrt{D/M}$. Der zusätzliche Term

$$\frac{p^2}{2M} \frac{\delta m}{m} = \hbar \omega_0 \frac{\delta m}{2m} (a^\dagger a + \frac{1}{2}) - \hbar \omega_0 \frac{\delta m}{4m} (a^{\dagger 2} + a^2) \quad (5.27)$$

führt, wie der Renormierungs-Anteil des Hamiltonoperators (5.23), neben einer Frequenzverschiebung zu einem Quetschen, das wieder vernachlässigt werden muss. Die Verschiebung ist nach Gleichung (4.66)

$$\frac{\omega_0}{2} \frac{\delta m}{m} = \frac{1}{2} (\gamma_r''(\omega_0) - \gamma''(\omega_0)) \quad , \quad (5.28)$$

so dass eine Massenrenormierung auf eine Frequenzverschiebung

$$\Delta = \frac{1}{2} \gamma_r''(\omega_0) \quad (5.29)$$

anstelle von Gleichung (5.24) führt.

Die Zeitentwicklung der Dichte im Schrödingerbild wird durch den Liouville-Operator des Systems und durch den Lindblad-Operator erzeugt. Insgesamt ergibt sich also mit

$$\Omega = \omega_0 + \frac{1}{2} \gamma''(\omega_0) \quad \text{oder} \quad \Omega = \omega_0 + \frac{1}{2} \gamma_r''(\omega_0) \quad (5.30)$$

– je nachdem, ob mit renormierter Masse gerechnet werden muss oder nicht – die Mastergleichung

$$\begin{aligned} \dot{\varrho}(t) &= -i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d)\varrho(t) \\ &= -i\Omega[a^\dagger a, \varrho(t)] - \frac{1}{2}\Gamma_+ \left(a^\dagger a \varrho(t) + \varrho(t) a^\dagger a - 2a \varrho(t) a^\dagger \right) \\ &\quad - \frac{1}{2}\Gamma_- \left(a a^\dagger \varrho(t) + \varrho(t) a a^\dagger - 2a^\dagger \varrho(t) a \right) \quad . \quad (5.31) \end{aligned}$$

Die Resonanzfrequenz (Gl.5.30) und die Dämpfungskonstante (Gl. 5.16) stimmen genau mit den Ergebnissen des Caldeira-Leggett-Modells überein, wenn dort die dynamische Suszeptibilität in Born- und Markow-Näherung genommen wird (Gl. 4.184).

5.2 Beobachtungsgrößen

Die Dynamik von Operatoren im Heisenbergbild wird durch die adjungierte Mastergleichung

$$\begin{aligned}\dot{A}(t) &= i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d^*)A(t) \\ &= i\Omega[a^\dagger a, A(t)] - \frac{1}{2}\Gamma_+ \left(a^\dagger a A(t) + A(t) a^\dagger a - 2a^\dagger A(t) a \right) \\ &\quad - \frac{1}{2}\Gamma_- \left(a a^\dagger A(t) + A(t) a a^\dagger - 2a A(t) a^\dagger \right) \quad (5.32)\end{aligned}$$

erzeugt. Daraus ergibt sich die Zeitentwicklung des Vernichtungsoperators

$$\dot{a}(t) = (-i\Omega - \Gamma/2)a(t) \quad \Rightarrow \quad a(t) = e^{(-i\Omega - \Gamma/2)t} a(0) \quad . \quad (5.33)$$

Sie gilt allerdings nur für $t > 0$, denn bei dissipativem Verhalten ist eine Zeitrichtung ausgezeichnet. Dies ist die in Abschnitt 3.2.2 diskutierte *Halbgruppen*-Eigenschaft.

Aus der Dynamik des Vernichters können nun die Erwartungswerte von Ort und Impuls berechnet werden:

$$\begin{aligned}\langle x \rangle(t) &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_0}} \frac{\langle a \rangle(t) + \langle a^\dagger \rangle(t)}{2} \\ &= e^{-\Gamma t/2} \left(\langle x \rangle(0) \cos(\Omega t) + \langle p \rangle(0) \frac{\sin(\Omega t)}{m\omega_0} \right) \quad (5.34)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle p \rangle(t) &= \sqrt{2\hbar m\omega_0} \frac{\langle a(t) - a^\dagger(t) \rangle}{2i} \\ &= e^{-\Gamma t/2} (\langle p \rangle(0) \cos(\Omega t) - m\omega_0 \langle x \rangle(0) \sin(\Omega t)) \quad . \quad (5.35)\end{aligned}$$

Ähnliche Resultate ergibt auch des Caldeira-Legget-Modell bei ohmscher Dämpfung (Gl. 4.105, Gl. 4.106) – ein Vergleich zeigt jedoch zwei Unterschiede: Zum einen gibt die Dynamik der Mastergleichung nicht den Sprung des Impulses aufgrund des Einschalt-Kraftstoßes (Gl. 4.107) wieder, da sie Einschalt Effekte nicht beschreibt (s. Abschnitt 3.3.1). Zum anderen sind in der exakten Beschreibung (Gl. 4.105, Gl. 4.106) die Anfangsphase und -amplitude gegenüber dem ungedämpften Fall geändert. Dieser bei schwachen Dämpfungen kleine Effekt ($\Gamma \ll \omega_0 \Rightarrow \Omega \approx \omega_0$) wird durch die Mastergleichung nicht berücksichtigt – er ist der Born-Näherung zum Opfer gefallen.

Die Dynamik der Anregungsquantenzahl $n = a^\dagger a$ wird durch

$$\dot{n}(t) = i(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_d^*)n(t) = -\Gamma n(t) + \Gamma_- \quad (5.36)$$

bestimmt, woraus sich der Erwartungswert im stationären Zustand

$$\langle n \rangle_{\text{stat}} = \frac{\Gamma_-}{\Gamma} = \bar{n} \quad (5.37)$$

und damit auch die Zeitabhängigkeit

$$\langle n \rangle(t) = e^{-\Gamma t} \left(\langle n \rangle(0) - \bar{n} \right) + \bar{n} \quad (5.38)$$

ergibt.

Nun soll noch die Autokorrelationsfunktion des Ortes im stationären Zustand berechnet werden. Nach dem Quanten-Regressions-Theorem (s. Abschnitt 3.3.2) berechnen sich Zwei-Zeiten-Erwartungswerte nach

$$\langle A(t + \tau)B(t) \rangle = \text{Sps}(A(\tau)B(0)\varrho_S(t)) \quad . \quad (5.39)$$

Dies führt mit Gleichung (4.74) auf

$$C_{xx}(\tau) = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle x(t + \tau)x(t) \rangle = \langle x(\tau)x(0) \rangle_{\text{stat}} \quad . \quad (5.40)$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} C_{xx}(t) &= \frac{\hbar}{2m\omega_0} \langle (a(t) + a^\dagger(t)) (a(0) + a^\dagger(0)) \rangle_{\text{stat}} \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega_0} \left(e^{(-i\Omega - \Gamma/2)t} \langle a^2 + aa^\dagger \rangle_{\text{stat}} + e^{(i\Omega - \Gamma/2)t} \langle a^\dagger a + a^{\dagger 2} \rangle_{\text{stat}} \right). \end{aligned} \quad (5.41)$$

Mit den stationären Erwartungswerten

$$\langle a^2 \rangle_{\text{stat}} = \langle a^{\dagger 2} \rangle_{\text{stat}} = 0 \quad , \quad \langle a^\dagger a \rangle_{\text{stat}} = \bar{n} \quad , \quad \langle aa^\dagger \rangle_{\text{stat}} = \bar{n} + 1 \quad (5.42)$$

wird daraus

$$C_{xx}(t) = \frac{\hbar}{2m\omega_0} e^{-\Gamma t/2} \left((\bar{n} + 1)e^{-i\Omega t} + \bar{n}e^{i\Omega t} \right) \quad , \quad (5.43)$$

allerdings nur für positive t , da bei der Berechnung die Halbgruppen-Dynamik verwendet wurde. Für negative t wird die Beziehung

$$C_{xx}(-t) = \langle x(-t)x(0) \rangle_{\text{stat}} = \langle x(0)x(t) \rangle_{\text{stat}} = \langle x(t)x(0) \rangle_{\text{stat}}^* = C_{xx}^*(t) \quad (5.44)$$

ausgenutzt. Damit folgt das Spektrum (Gl. 4.75):

$$\begin{aligned} C_{xx}(\omega) &= \int_0^\infty dt e^{i\omega t} C_{xx}(t) \quad + \quad \text{h. c.} \\ &= \frac{\hbar}{m\omega_0} \text{Re} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} e^{-\Gamma t/2} \left((\bar{n} + 1)e^{-i\Omega t} + \bar{n}e^{i\Omega t} \right) \\ &= \frac{\hbar}{m\omega_0} \text{Re} \left(\frac{(\bar{n} + 1)}{\frac{\Gamma}{2} - i(\omega - \Omega)} + \frac{\bar{n}}{\frac{\Gamma}{2} - i(\omega + \Omega)} \right) \\ &= \frac{\hbar}{m\omega_0} \left(\frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega_0/kT}} \frac{\Gamma/2}{(\omega - \Omega)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} - \frac{1}{1 - e^{\hbar\omega_0/kT}} \frac{\Gamma/2}{(\omega + \Omega)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \right). \end{aligned} \quad (5.45)$$

Auch dieses Ergebnis ähnelt der exakten Lösung des Caldeira-Leggett-Modells bei ohmscher Dämpfung (Gl. 4.110) – dort stand allerdings der *frequenzabhängige* Bose-Faktor $(1 - e^{-\hbar\omega/kT})^{-1}$, während hier die Lorentz-Funktionen jeweils nur mit dem *konstanten* Faktor $(1 - e^{\pm\hbar\omega_0/kT})^{-1}$ gewichtet sind. Dieser Faktor stammt aus der thermischen Spektralfunktion der Umgebung, die bei der exakten Berechnung vollständig berücksichtigt wird, während in die Mastergleichung nur ihre Werte bei $\pm\omega_0$ eingehen. Der obere Teil von Abbildung 5.1 zeigt einen Vergleich der beiden Modelle. Dabei sind Frequenzverschiebung und Dämpfung nach den Gleichungen (4.101, 5.24, 5.16) durch

$$\gamma(\omega_0) = \gamma_0 \quad \Rightarrow \quad \Delta = \frac{1}{2}\gamma''(\omega_0) = 0 \quad , \quad \Gamma = \gamma'(\omega_0) = \gamma_0 \quad (5.46)$$

gegeben. In der Nähe der Resonanzen ergibt sich eine gute Übereinstimmung, während die Abweichung besonders bei negativen Frequenzen $\omega \ll -\omega_0$ mehrere Größenordnungen beträgt.

Bei Ankopplung an ein Drude-Bad sind die Resonanzen durch (s. Gl. 4.116)

$$\gamma(\omega_0) = \gamma_0 \frac{\omega_c}{\omega_c - i\omega_0} \quad \Rightarrow \quad \Delta = \frac{\omega_0}{2\omega_c} \frac{\gamma_0}{1 + \omega_0^2/\omega_c^2} \quad , \quad \Gamma = \frac{\gamma_0}{1 + \omega_0^2/\omega_c^2} \quad (5.47)$$

gegeben. Im Fall des dreidimensionalen Strahlungsbades (mit renormierter Masse) ist die frequenzabhängige Dämpfung (Gl. 4.171) an der Stelle ω_0

$$\gamma_r(\omega_0) = \frac{\gamma_0\omega_c}{\omega_0^2} \frac{\omega_0^2}{\omega_c - i\omega_0} \quad (5.48)$$

gleich der des Drude-Bades. Daher führen diese beiden Bäder zur selben Mastergleichung bzw. zum selben Spektrum. Dies ist im unteren Teil von Abbildung 5.1 zusammen mit den aus dem Caldeira-Leggett-Modell gewonnenen exakten Spektren (Drude-Bad (Gl. 4.126), dreidimensionales Strahlungsbad (Gl. 4.176)) dargestellt. Die Abschneidefrequenz wurde für diese Darstellung sehr niedrig ($\omega_c = \omega_0$) gewählt, damit die Frequenzverschiebung relativ zum ohmschen Bad deutlich wird. Wie für das ohmsche Bad stimmen auch hier die mit der Mastergleichung berechneten Spektren mit den exakten in der Nähe der Resonanzen gut überein.

Abseits der Resonanzen wird der Einfluss der zusätzlichen spektralen Eigenschaften der Umgebung (nämlich die Faktoren $\omega_c^2/(\omega^2 + \Lambda^2)$ beim Drude-Bad bzw. $\omega^2\omega_c^2/(\omega^2 + \Lambda^2)(\omega_0^2 - \gamma_0\omega_c)$ beim dreidimensionalen Strahlungsbad) allerdings nicht wiedergegeben – hier ist die Abweichung noch stärker als im ohmschen Falle. An dieser Stelle zeigt sich der Einfluss der Markow-Näherung, die spektrale Eigenschaften der Umgebung vernachlässigt.

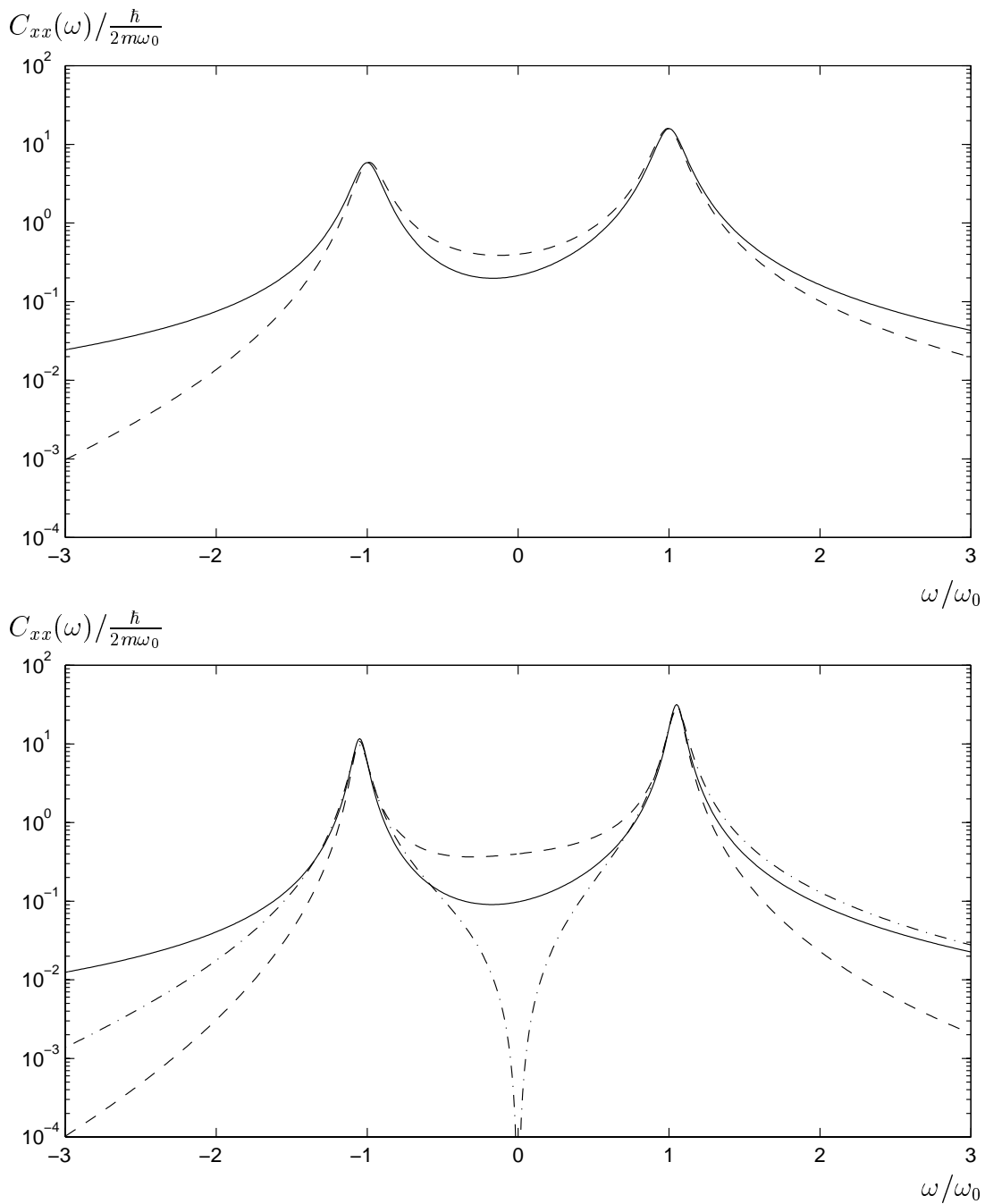


Abbildung 5.1: Vergleich der mit der Mastergleichung berechneten Spektren mit den exakten. Oben: Ohmsches Bad: Mastergleichung (—), exakt (— —). Unten: Drude und dreidimensionales Strahlungsbad: Mastergleichung (—), Drude exakt (— —), dreidimensionales Strahlungsbad exakt (— · —). Parameter: $\gamma_0 = 0, 2\omega_0$, $T = \hbar\omega_0/k$, $\omega_c = \omega_0$.

Kapitel 6

Zusammenfassung

Ein fundamentales Problem der Quantenmechanik ist die Unmöglichkeit, mit einer unitären Zeitentwicklung Dissipationseffekte zu beschreiben. Diese treten aber immer auf und sind besonders wichtig (Dekohärenz), wenn man scheinbare Widersprüche zwischen Quanten- und klassischer Mechanik – wie das Paradoxon mit Schrödingers Katze – auflösen möchte. Die Dekohärenz stellt z. B. auch das momentan größte Problem bei der Realisierung von Quantenrechnern dar [30].

In dieser Arbeit wurde die reduzierte Beschreibung mikroskopischer Teilsysteme untersucht. Dabei kommt es besonders auf eine physikalisch sinnvolle Einteilung des Gesamtsystems in einen relevanten und einen irrelevanten Anteil an. Für eine gegebene Zerlegung liefert dann der Projektions-Formalismus von Zwanzig eine geschlossene Bewegungsgleichung für den relevanten Anteil. Für den Fall eines Teilsystems, das an eine makroskopische Umgebung gekoppelt ist, konnte diese Zerlegung in dieser Arbeit eindeutig bestimmt werden. Dazu wurde gefordert, dass die Erzeugende der resultierenden Dynamik linear und zeitunabhängig ist. Diese Annahme ist plausibel, da so der dissipative Einfluss des Wärmebades durch allgemeine, zeitunabhängige Parameter charakterisiert werden kann.

Bei der Herleitung der Mastergleichung aus der Zwanzig-Gleichung stützt man sich im allgemeinen auf eine schwache Kopplung (Störungstheorie zweiter Ordnung) zwischen dem betrachteten System und seiner stabilen Umgebung (im thermischen Gleichgewicht), wobei über die Freiheitsgrade des Bades gemittelt wird und schnelle Relaxationsprozesse im Bad angenommen werden (Markow-Näherung).

Bei Systemen, bei denen die Kopplung zwischen System und Umgebung erst zum Präparationszeitpunkt eingeschaltet wird, setzt der dissipative Einfluss der Umgebung erst nach deren Korrelationszeit ein. Dieser Einschalteffekt wird mit der Mastergleichung nicht beschrieben.

Eine nicht-unitäre Dynamik muss bekanntlich der Lindblad-Form genügen, um die fundamentalen Eigenschaften (Norm, Hermitizität, Positivität) der Dichte zu erhalten. Im Allgemeinen erfüllt die aus der Zwanzig-Gleichung abgeleitete Mastergleichung diese Bedingung noch nicht. Dies wird aber mit einer wei-

teren Näherung erreicht, bei der nur die bezüglich der Systemdynamik stationären Terme berücksichtigt werden (Säkularnäherung). Einige Autoren nehmen eine Verletzung der Positivität in Kauf und rechnen auch mit unphysikalischen Zuständen [31,32]. Dies erscheint jedoch sehr fragwürdig, da die Verletzung dieser grundlegenden Eigenschaft zu unvorhersehbaren Schwierigkeiten führt.

Da die Markow-Näherung nicht immer gerechtfertigt ist, wurde in dieser Arbeit eine erweiterte Form der Mastergleichung aufgestellt. Dabei wurde von Markow-ähnlichen Systemen ausgegangen, in denen sich die Entwicklung des System-Dichteoperators innerhalb der (kurzen, aber nicht infinitesimalen) Bad-Korrelationszeit noch linear in der Zeit approximieren lässt.

Hierbei hat sich gezeigt, dass keine Korrekturen 2. Ordnung auftreten: Strenggenommen ist bei der Herleitung der Mastergleichung keine Markow-Näherung nötig, da diese schon in der störungstheoretischen Behandlung niedrigster Ordnung impliziert ist. Die Erweiterung berücksichtigt also Kopplungsterme 4. Ordnung, so dass die Zeitentwicklung vollständig bis zu dieser Ordnung beschrieben werden muss. Als größtes Hindernis stellt sich hier die Anforderung an eine konsistente Darstellung dar: Es konnte nicht entschieden werden, ob oder unter welchen Bedingungen die Beschreibung in 4. Ordnung der Lindblad-Form entspricht. Bei der erweiterten Form musste auch die Säkularnäherung erneut untersucht werden. Geht man bei der Erweiterung nämlich von der bereits in Säkularnäherung beschriebenen Mastergleichung aus, so bleiben Terme unberücksichtigt, die bei der umgekehrten Reihenfolge (zuerst Erweiterung, dann Säkularnäherung) mitgenommen werden.

Die Güte der Markow-Näherung entscheidet sich an den Korrelationen des Badanteils der Wechselwirkung. Im Frequenzbild entsprechen sehr kurzlebige Korrelationen einer flachen Spektralfunktion. In der Mastergleichung mit Markow-Näherung wird der Einfluss der Umgebung durch die Werte dieser Spektralfunktion bei den Resonanzfrequenzen des Systems parametrisiert. Die erweiterte Form enthält zusätzlich die linearen Änderungen mit der Frequenz.

Im Gegensatz zur Mastergleichung müssen bekanntlich bei einer Beschreibung mit der Quanten-Langevin-Gleichung keine Näherungen gemacht werden. Diese ist andererseits nur für spezielle Modellsysteme lösbar. Anhand eines solchen analytisch lösbaren Systems (Caldeira-Leggett-Modell) wurden in dieser Arbeit Beobachtungsgrößen berechnet und der Einfluss der in die Mastergleichung eingehenden Näherungen untersucht. Betrachtet wurde dabei die Lage der Resonanzen des Systems in Abhängigkeit von der Badkorrelationszeit. Die Abweichung von der analytischen Lösung kommt dabei hauptsächlich durch die Born-Näherung zustande. Ein Einfluss der Markow-Näherung ergibt sich, wenn die Korrelationszeiten in der Nähe der charakteristischen Zeitskala des Systems liegen. Die Einflüsse der beiden Näherungen auf diese Verschiebung hängen aber voneinander ab: Wie oben erwähnt, impliziert eine gute Born-Näherung die Gültigkeit der Markow-Näherung.

Im Caldeira-Leggett-Modell wird der Einfluss der Umgebung durch eine Spek-

traldichte parametrisiert. Diese muss nicht ad hoc angenommen, sondern kann aus der mikroskopischen Beschreibung hergeleitet werden. Dies wurde für ein geladenes Teilchen getan, das an die Moden des elektromagnetischen Feldes koppelt. Dabei wurde zwischen dem freien (dreidimensionalen) Feld und einem durch Randbedingungen auf eine Dimension beschränkten Feld unterschieden.

Das analytisch gelöste System wurde schließlich auch mit der Mastergleichung beschrieben und die Beobachtungsgrößen auf diese Weise berechnet. Die Erwartungswerte von Ort und Impuls unterscheiden sich von den exakt berechneten durch den in der Mastergleichung nicht berücksichtigten Einschaltteffekt. Deutliche Unterschiede ergeben sich im Bewegungsspektrum des Systems. Zum einen weicht die Lage der Resonanzen ab (s. o.). Zum anderen nähert die Mastergleichung das Spektrum in der Nähe der Resonanzen durch Lorentzkurven gut an, während sich fernab der Resonanzen exakte und genäherte Lösung unterscheiden.

Als Ausgangspunkt für zukünftige Arbeiten ist vor allem die schwierige Forderung nach einer konsistenten Darstellung zu sehen. Schon bei der herkömmlichen Mastergleichung ist das Zusammenspiel der gemachten Näherungen bemerkenswert: Erst am Ende der Herleitung ergibt sich eine Form, die die Positivität der Systemdichte garantiert. Jede Veränderung dieser kanonischen Form muss daher sorgfältig auf ihre Konsequenzen geprüft werden. Ein allgemeiner Beweis für die Erhaltung der Positivität durch die erweiterte Mastergleichung ist ein lohnenswertes Ziel künftiger Untersuchungen. Dies gilt sowohl für die Verbesserung der Markow-Näherung als auch für die Zusätze, die sich aus der Beschreibung in höherer Ordnung ergeben.

Anhang A

Reihenentwicklung mit Kubo-Identität

Es ist der Operator

$$e^{A+\lambda B} \quad (\text{A.1})$$

bis in zweiter Ordnung des kleinen Parameters λ nach Taylor zu entwickeln:

$$e^{A+\lambda B} = e^A + \lambda \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{A+\lambda B} \right)_{\lambda=0} + \frac{\lambda^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} e^{A+\lambda B} \right)_{\lambda=0} + o(|\lambda|^3) \quad (\text{A.2})$$

Die Ableitungen werden mit Hilfe der Kubo-Identität (s. z. B. [33])

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{F(\lambda)} = \int_0^1 dx e^{xF(\lambda)} \frac{\partial F(\lambda)}{\partial \lambda} e^{(1-x)F(\lambda)} \quad (\text{A.3})$$

berechnet:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{A+\lambda B} = \int_0^1 dx e^{x(A+\lambda B)} B e^{(1-x)(A+\lambda B)} \quad (\text{A.4})$$

bzw.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} e^{A+\lambda B} \\ &= \int_0^1 dx \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{x(A+\lambda B)} \right) B e^{(1-x)(A+\lambda B)} + e^{x(A+\lambda B)} B \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{(1-x)(A+\lambda B)} \right) \\ &= \int_0^1 dx \int_0^1 dy e^{yx(A+\lambda B)} x B e^{(1-y)x(A+\lambda B)} B e^{(1-x)(A+\lambda B)} \\ & \quad + \int_0^1 dx \int_0^1 dy e^{x(A+\lambda B)} B e^{y(1-x)(A+\lambda B)} (1-x) B e^{(1-y)(1-x)(A+\lambda B)} \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

In den letzten beiden Zeilen werden nun die Substitutionen

$$y = \frac{x'}{x} \Rightarrow \int_0^1 dy = \int_0^x \frac{dx'}{x} \quad \text{bzw.} \quad y = \frac{x' - x}{1 - x} \Rightarrow \int_0^1 dy = \int_x^1 \frac{dx'}{1 - x} \quad (\text{A.6})$$

durchgeführt. Damit ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} e^{A+\lambda B} &= \int_0^1 dx \int_0^x dx' e^{x'(A+\lambda B)} B e^{(x-x')(A+\lambda B)} B e^{(1-x)(A+\lambda B)} \\ &+ \int_0^1 dx \int_x^1 dx' e^{x(A+\lambda B)} B e^{(x'-x)(A+\lambda B)} B e^{(1-x')(A+\lambda B)} \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

Wird nun die Eigenschaft der Flächenintegration

$$\int_0^1 dx \int_x^1 dx' f(x, x') = \int_0^1 dx \int_0^x dx' f(x', x) \quad (\text{A.8})$$

genutzt, so ergibt sich

$$\frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} e^{A+\lambda B} = 2 \int_0^1 dx \int_0^x dx' e^{x'(A+\lambda B)} B e^{(x-x')(A+\lambda B)} B e^{(1-x)(A+\lambda B)} \quad (\text{A.9})$$

Die gesuchte Entwicklung ist also

$$\begin{aligned} e^{A+\lambda B} &= e^A \\ &+ \int_0^1 dx e^{xA} \lambda B e^{-xA} e^A \\ &+ \int_0^1 dx \int_0^x dx' e^{x'A} \lambda B e^{(x-x')A} \lambda B e^{-xA} e^A \\ &+ o(|\lambda|^3) \quad (\text{A.10}) \end{aligned}$$

Literaturverzeichnis

- [1] H. Franke (Hg.). *Lexikon der Physik*. Franckh'sche Verlagshandlung, W. Keller & Co, Stuttgart, 1969.
- [2] E. T. Jaynes. *Information Theory and Statistical Mechanics*. Phys. Rev. **106** (1957) 620–630.
- [3] E. T. Jaynes. *Information Theory and Statistical Mechanics. II*. Phys. Rev. **108** (1957) 171–190.
- [4] J. v. Neumann. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer, Berlin, 1932.
- [5] E. Schrödinger. *Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik*. Die Naturwissenschaften **23** (1935) 807–812, 823–828, 844–849.
- [6] M. Brune, J. Hagley, X. Maître, A. Maali, C. Wunderlich, J. M. Raimond und S. Haroche. *Observing the Progressive Decoherence of the "Meter" in a Quantum Measurement*. Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 4887–4890.
- [7] D. Giulini, E. Joos, J. Kupsch, I.-O. Stamatescu und H. D. Zeh. *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*. Springer, Berlin, 1996.
- [8] C. W. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods*. Springer, Berlin, 1983.
- [9] G. Lindblad. *On the Generators of Quantum Dynamical Semigroups*. Commun. math. Phys. **48** (1976) 119–130.
- [10] E. Fick und G. Sauer mann. *Quantenstatistik dynamischer Prozesse*, Bd. 1. Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main, 1983.
- [11] A. Săndulescu und H. Scutaru. *Open Quantum Systems and the Damping of Collective Modes in Deep Inelastic Collisions*. Ann. Phys. **173** (1987) 277–317.
- [12] P. Pechukas. *Reduced Dynamics Need Not Be Completely Positive*. Phys. Rev. Lett. **73** (1994) 1060–1062.

- [13] R. Zwanzig. *Ensemble Method in the Theory of Irreversibility*. J. Chem. Phys. **33** (1960) 1338–1341.
- [14] H.-P. Breuer, B. Kappler und F. Petruccione. *Stochastic wave-function method for non-Markovian quantum master equations*. Phys. Rev. A **59** (1999) 1633–1643.
- [15] B. Misra und E. C. G. Sudarshan. *The Zeno's paradox in quantum theory*. J. Math. Phys. **18** (1977) 756–763.
- [16] C. W. Gardiner. *Quantum Noise*. Springer, Berlin, 1991.
- [17] G. Gangopadhyay und D. S. Ray. *Non-Markovian master equation for linear and nonlinear systems*. Phys. Rev. A **46** (1992) 1507–1515.
- [18] R. P. Feynman und F. L. Vernon, Jr. *The Theory of a General Quantum System Interacting with a Linear Dissipative System*. Annals of Physics **24** (1963) 118–173.
- [19] A. O. Caldeira und A. J. Leggett. *Path integral approach to quantum brownian motion*. Physica A **121** (1983) 587–616.
- [20] U. Weiss. *Quantum Dissipative Systems*, Bd. 2 von *Series in Modern Condensed Matter Physics*. World Scientific, Singapore, 1993.
- [21] K. Lindenberg und B. J. West. *The Nonequilibrium Statistical Mechanics of Open and Closed Systems*. VCH, New York, 1990.
- [22] M. V. Korolkov und G. K. Paramonov. *State-selective vibrational excitation of diatomic molecules coupled to a quasis resonant environment: Markov approximation and non-Markov approach*. Phys. Rev. A **55** (1997) 589–604.
- [23] A. Lindner. *Grundkurs Theoretische Physik*. Teubner, Berlin, 2. Aufl., 1997.
- [24] R. L. Stratonovich. *Topics in the Theory of Random Noise, Volume I*, Bd. 3 von *Mathematics and its Applications*. Gordon and Breach, London, 1963.
- [25] I. N. Bronstein und K. A. Semendjajew. *Taschenbuch der Mathematik*. Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main, 24. Aufl., 1989.
- [26] L. D. Landau und E. M. Lifschitz. *Lehrbuch der theoretischen Physik*, Bd. IX, *Statistische Physik, Teil 2*. Akademie, Berlin, 2. Aufl., 1984.
- [27] G. W. Ford, J. T. Lewis und R. F. O'Connell. *Quantum Oscillator in a Blackbody Radiation Field*. Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 2273–2276.
- [28] M. Abramowitz und I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publ., New York, 1965.

- [29] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont und G. Grynberg. *Photons & Atoms - Introduction to Quantum Electrodynamics*. Wiley & Sons, New York, 1989.
- [30] S. Haroche und J.-M. Raimond. *Quantum Computing: Dream or Nightmare*. Physics Today S. 51–52.
- [31] D. Schirrneister. *Zur Theorie der photoinduzierten Dynamik offener Molekularsysteme: Kontrolle von Dissipation durch ultrakurze Laserimpulse*. Dissertation, Berlin, 1998.
- [32] G. W. Ford und R. F. O’Connell. *Comment on “Dissipative Quantum Dynamics with a Lindblad Functional”*. Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 3376.
- [33] M. Suzuki. *Decomposition formulas of exponential operators and Lie exponentials with some application to quantum mechanics and statistical physics*. J. Math. Phys. **26** (1985) 601–612.

Danksagung

Herrn Prof. Albrecht Lindner gilt mein Dank für die Gelegenheit, diese Arbeit unter seiner Betreuung durchzuführen, und für seine (nahezu unerschöpfliche) Geduld.

Eine noch größere Belastungsprobe hat wohl die Geduld von Sven Willenbücher (und mittelbar auch Silke Rode) erfahren. Die nicht zählbaren Diskussionen mit ihm waren ein großer Bestandteil dieser Arbeit. Nu sieh zu, Sven!

Gerade in der Endphase meiner Arbeit schreckte ich auch nicht davor zurück, noch weitere Mitarbeiter des Instituts für Laser-Physik in die Thematik dieser Arbeit zu verstricken. Besonders gedankt sei hier Dr. Christof Wunderlich und Kathrin Schiller.

Diese haben, wie auch Prof. Werner Neuhauser, Dr. Bernd Appasamy, Dr. Torsten Latz, Jörg Hünkemeier, Arnold Stark und viele andere zu der sehr angenehmen Arbeitsatmosphäre beigetragen, die mich all die Jahre gerne hierher kommen ließ.

Sehr geschätzt habe ich in all der Zeit auch die wissenschaftliche Zusammenarbeit mit Prof. Peter E. Toschek und seiner Arbeitsgruppe, die mir (so hoffe ich) stets die „Bodenhaftung“ bewahrt hat.

Für die finanzielle Förderung dieser Arbeit danke ich der DFG und dem Graduiertenkolleg „Felder und lokalisierte Atome - Atome und lokalisierte Felder“.

Großer Dank für die stete Unterstützung und viel Verständnis gilt meinen Eltern und ganz besonders Irene.