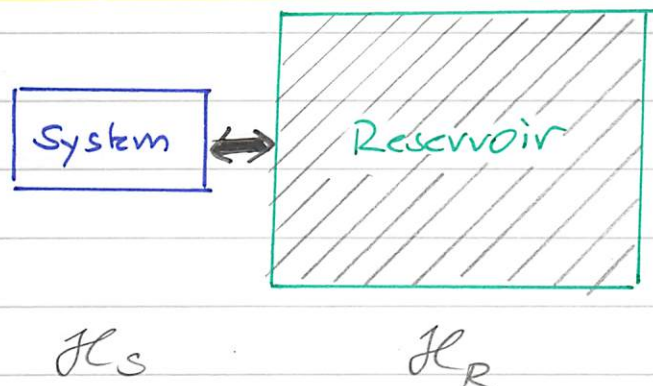


I) Offene Quantensysteme im Schrödingerbild

I.1. Quantenoptische Mastergleichung



$$\dim(\mathcal{H}_S) \ll \dim(\mathcal{H}_R)$$

Ziel: effektive Beschreibung des Systems ohne detaillierte Verfolgung der Dynamik des Reservoirs $\Rightarrow$ unvollständige Information!

$$|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_S \longrightarrow \rho = \sum_n p_n \underbrace{|\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|}_{\text{Projektor auf } |\varphi_n\rangle}$$

Zustandsvektor

Dichtoperator

p_n Wahrscheinlichkeiten

$$\text{d.h. } \sum_n p_n = 1; \quad p_n \geq 0$$

$\{|\varphi_n\rangle\}$ wählbar als ONB

phys. Größen

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \langle \varphi | \hat{O} | \varphi \rangle \longrightarrow \sum_n p_n \langle \varphi_n | \hat{O} | \varphi_n \rangle \\ &= \text{Tr} \{ \rho \hat{O} \} \end{aligned}$$

$$\text{Tr}\{\hat{S}\hat{O}\} = \sum_m \langle \phi_m | \hat{S}\hat{O} | \phi_m \rangle = \sum_{mn} p_n \langle \phi_m | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{O} | \phi_m \rangle$$

$$= \sum_n \sum_m p_n \langle \psi_n | \hat{O} | \phi_m \rangle \underbrace{\langle \phi_m | \psi_n \rangle}_{= \hat{1}}$$

$$= \sum_n p_n \langle \psi_n | \hat{O} | \psi_n \rangle$$

(A) Eigenschaften gemischter Zustände (Dichtoperatoren)

(i) $\boxed{\hat{S}^\dagger = \hat{S}}$ (reelle Eigenwerte) Selbstadjungiert

(ii) $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}_S$ $\boxed{\langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle \geq 0}$ Positivität

$$\langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle = \sum_n p_n \langle \psi | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle = \sum_n p_n |\langle \psi | \psi_n \rangle|^2 \geq 0$$

(Eigenwerte sind Wahrscheinlichkeiten)

(iii) $\forall |\phi\rangle \in \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_{aux} \quad \forall \eta_{aux}$ vollständige Positivität

$$\boxed{\langle \phi | \hat{S} \otimes \eta_{aux} | \phi \rangle \geq 0}$$

Positivität gilt auch für Erweiterung von $\hat{S}$ auf zusätzliche Anzahl Freiheitsgrade!

(iv) $\boxed{\text{Tr}\{\hat{S}\} = \sum_n p_n = 1}$ d.h. $\frac{d}{dt} \text{Tr}\{\hat{S}\} = 0$

Erhaltung der Spur (Wahrscheinlichkeitserhaltung)

$$(v) \quad \boxed{\text{Tr} \{S^2\} \leq \text{Tr} \{S\} = 1} \quad \text{Reinheit}$$

$$\text{Tr} \{S^2\} = \sum_n \langle \varphi_n | \sum_{m,k} p_m p_k | \varphi_m \rangle \underbrace{\langle \varphi_m | \varphi_k \rangle}_{=\delta_{mk}} \langle \varphi_k | \varphi_n \rangle = \sum_m p_m^2 \quad (\{\varphi_k\}: \text{ONB})$$

$$= \sum_m p_m^2 \leq \sum_m p_m = 1$$

$$\boxed{\text{Tr} \{S^2\} = 1 \Leftrightarrow S = |\varphi\rangle \langle \varphi|} \quad \text{reiner Zustand}$$

(vi) falls S_1 und S_2 Dichtematrizen

$$\Rightarrow \quad \boxed{S = p S_1 + (1-p) S_2} \quad \text{Dichtematrix}$$

konvexe Summe $0 \leq p \leq 1$

aber: Menge aller S ist kein linearer Raum

(vii) Orthogonalität Zustände $\langle \phi | \varphi \rangle = 0$
 Matrizen $\text{Tr} \{u v^\dagger\} = 0$

$$\text{Tr} \{S_1^\dagger S_2\} = \text{Tr} \{S_1 S_2\} = 0$$

(viii) Abstand zweier Dichtematrizen

$$\|A\| = \text{Tr} \{ \sqrt{A^\dagger A} \} \quad \text{Trace Norm}$$

$$\|S_1 - S_2\| = \frac{1}{2} \text{Tr} \{ \sqrt{(S_1 - S_2)^+ (S_1 - S_2)} \}$$

$$\|S_1 - S_2\| = 0 \Leftrightarrow S_1 = S_2$$

$$0 \leq \|S_1 - S_2\| \leq 1$$

$$\|S_1 - S_2\| = 1 \quad S_1, S_2 \text{ orthogonal}$$

$$\|U S_1 U^+ - U S_2 U^+\| = \|S_1 - S_2\|$$

$$\left\| \sum_n p_n S_n - \mathcal{O} \right\| \leq \sum_n p_n \|S_n - \mathcal{O}\|$$

(ix) Eindeutigkeit

falls $\{| \varphi_n \rangle\}$ orthogonal (muß nicht der Fall sein)

$\Rightarrow$

$$S = \sum_n p_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad \text{eindeutig wenn} \\ p_n \neq p_m \quad \forall n, m$$

falls $p_n = p_m \rightarrow$ Rotationen

(x) Zerlegung

$$S: N \times N \quad \omega: N \times N$$

$$S = \omega \omega^+$$

ω bilden linearen Raum!

$$\text{Eichfreiheit} \quad \omega \rightarrow \tilde{\omega} = \omega U \quad U \in U(N)$$

$$\tilde{\omega} \tilde{\omega}^+ = \omega U U^+ \omega^+ = \omega \omega^+$$

(B) Zeitentwicklung: Lindbladgleichung

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}$$

/ | \

System Reservoir Kopplung

Gesamtsystem, d.h. System + Reservoir abgeschlossen

$$(1) \quad \chi \text{ in } \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R \quad \dot{\chi} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \chi]$$

reduzierter Dichteoperator des Systems

$$\rho \text{ in } \mathcal{H}_S \quad \rho = \text{Tr}_R \{ \chi \}$$

Was ist Dynamik von ρ ? Zunächst ist es sinnvoll die freie Zeitentwicklung mit $\hat{H}_S$ bzw $\hat{H}_R$ abzuspalten da diese typischerweise die größten Energieskalen, d.h. die kürzesten Zeitskalen beschreiben

$$\tilde{\chi}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} (\hat{H}_S + \hat{H}_R) t} \chi(t) e^{-\frac{i}{\hbar} (\hat{H}_S + \hat{H}_R) t}$$

$$(2) \quad \dot{\tilde{\chi}}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_{SR}(t), \tilde{\chi}(t)]$$

$$\tilde{H}_{SR}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} (\hat{H}_S + \hat{H}_R) t} \hat{H}_{SR} e^{-\frac{i}{\hbar} (\hat{H}_S + \hat{H}_R) t}$$

Schwache Kopplung System $\leftrightarrow$ Reservoir $\Rightarrow$ Störungstheorie

formale Integration von (2)

$$\tilde{\chi}(t) = \tilde{\chi}(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau [\tilde{H}_{SR}(\tau), \tilde{\chi}(\tau)]$$

einsetzen in (2)

$$(3) \quad \begin{aligned} \tilde{\chi}(t) = & -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_{SR}(t), \tilde{\chi}(t_0)] \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t d\tau [\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(\tau), \tilde{\chi}(\tau)]] \end{aligned}$$

Jetzt nehmen wir an, daß t_0 so gewählt wurde
(z.B. $t_0 \rightarrow -\infty$), daß System & Reservoir unkorreliert sind

$$\tilde{\chi}(t_0) = \tilde{S}(t_0) \otimes \tilde{S}_R(t_0)$$

Da der 2. Term in Gl. (3) bereits 2. Ordnung in $\tilde{H}_{SR}$ ist, können wir im Sinne der Störungstheorie annehmen, daß im Doppelkommutator

$$\hat{\chi}(\tau) \rightarrow \tilde{S}(\tau) \otimes \tilde{S}_R(\tau)$$

Born'sche Näherung

Darüberhinaus soll das Bad in einem stationären Zustand sein, d.h. $[\tilde{S}_R(\tau), H_R] = 0$

$$\tilde{S}_R(\tau) = \tilde{S}_R(t_0) = \tilde{S}_R$$

Noch Spurbildung über das Reservoir folgt

$$\dot{\tilde{S}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \text{Tr}_R \left\{ \underbrace{[\tilde{H}_{SR}(t), \tilde{S}(t_0) \otimes \tilde{S}_R(t_0)]}_{\text{meist } \equiv 0} \right\}$$

(4) meist $\equiv 0$; wollen wir im Folgenden annehmen

$$-\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t d\tau \text{Tr}_R \left\{ [\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(\tau), \tilde{S}(\tau) \otimes \tilde{S}_R]] \right\}$$

Generische System-Reservoir WW

$$H_{SR} = \hbar \sum_j S_j R_j$$

S_j - Systemoperator hier $S_j = S_j^\dagger$

R_j - Reservoiroperator hier $R_j = R_j^\dagger$

(Vereinfachung einfügen)

Notation $\tilde{X}(t) \rightarrow X(t)$ zur Vereinfachung

$$\dot{S}(t) = -\sum_{jk} \int_{t_0}^t d\tau \text{Tr}_R \left\{ [S_j(t) R_j(t), [S_k(\tau) R_k(\tau), S(\tau) S_R]] \right\}$$

$$(5) = -\sum_{jk} \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \begin{aligned} &\langle R_j(t) R_k(\tau) \rangle_R (S_j(t) S_k(\tau) S(\tau) - S_j(t) S(\tau) S_k(\tau)) \\ &- \langle R_j(\tau) R_k(t) \rangle_R (S_k(\tau) S(\tau) S_j(t) - S(\tau) S_k(\tau) S_j(t)) \end{aligned} \right\}$$

wobei

$$(6) \quad \langle R_j(t) R_k(\tau) \rangle_R = \text{Tr}_R \{ S_R R_j(t) R_k(\tau) \}$$

Gl. (5) ist eine Integrodifferentialgleichung ☹

Bad ist stationär

$$\langle R_j(t) R_k(\tau) \rangle = R_{jk}(t-\tau)$$

typisch $R_{jk}(t-\tau) \xrightarrow{t-\tau \rightarrow \infty} 0$

Falls Zerfall der Reservoirkorrelationen auf Zeitskala passiert die viel kürzer ist als die charakteristische Zeit der Systemdynamik (gekoppelt an das Reservoir!)

$\Rightarrow$ Markov Näherung (keine Gedächtniseffekte)

$$(7) \quad \begin{aligned} \langle R_j(t) R_k(\tau) \rangle S_k(\tau) &\simeq \underbrace{(\Gamma_{jk} + i \Delta_{jk})}_{=\gamma_{jk}} S_k(t) \delta(t-\tau) \\ \langle R_j(\tau) R_k(t) \rangle S_j(\tau) &\simeq (\Gamma_{jk} - i \Delta_{jk}) S_j(t) \delta(t-\tau) \end{aligned}$$

$$(8) \quad \Gamma_{jk} = \Gamma_{kj} \quad \Delta_{jn} = \Delta_{nj}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \dot{S} = & -\frac{1}{2} \sum_{jk} \gamma_{jk} \{ S_j S_k S - S_j S S_k \} \\ & -\frac{1}{2} \sum_{jn} \gamma_{jn}^* \{ S_k S S_j - S S_k S_j \} \end{aligned}$$

$$\dot{S} = -\frac{i}{2} \sum_{jk} \Delta_{jk} [S_j S_k, S] \leftarrow \text{Korrektur zum Hamiltonian}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{jn} \Gamma_{jk} \{ 2 S_j S S_k - S_k S_j S - S S_k S_j \}$$

Die Korrektur zum Hamiltonian betrachten wir hier nicht weiter. Da $\Gamma_{jk} = \Gamma_{kj}$ kann die Matrix diagonalisiert werden. Man kann zeigen, daß für die Eigenwerte gilt

$$(9) \quad \Gamma_{\mu} \geq 0$$

Verallgemeinerung zu nicht-hermiteschen System und Badoperatoren führt schließlich zu

$$(10) \quad \dot{\rho}|_{\text{diss}} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \Gamma_{\mu} \{ 2 L_{\mu} \rho L_{\mu}^{\dagger} - L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \rho - \rho L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \}$$

Lindblad - (Master)gleichung

L_{μ} - Lindbladoperatoren

Oft werden die Koeffizienten (Raten) Γ_{μ} in die Lindblad-Operatoren aufgenommen

$$L_{\mu} \rightarrow \sqrt{\Gamma_{\mu}} L_{\mu}$$

Bem.:

(i) Man sieht leicht, daß (10) die Spur erhält

$$\frac{d}{dt} \text{Tr} \{ \rho \} = 0 \quad \text{aber} \quad \frac{d}{dt} \text{Tr} \{ \rho^2 \} \neq 0 !$$

(ii) Man kann zeigen, daß (10) die Positivität und die vollständige Positivität von ρ erhält

$\Rightarrow$ vollständig positive, spurerhaltende Dynamik

$\dot{S}|_{\text{diss}}$ wird oft Dissipator $D(S)$ genannt

$$\dot{S}|_{\text{diss}} = D(S) = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \Gamma_{\mu} \{ 2 L_{\mu} S L_{\mu}^{\dagger} - L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} S - S L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \}$$

Der Dissipator ist invariant unter folgenden Transformationen

(i) unitäre Transformation

$$(11) \quad \sqrt{\Gamma_{\mu}} L_{\mu} \rightarrow \sqrt{\Gamma'_{\mu}} L'_{\mu} = \sum_{\nu} U_{\mu\nu} \sqrt{\Gamma_{\nu}} L_{\nu}$$

Diese Eigenschaft wurde bereits benutzt um die Diagonalform der Lindbladgleichung (10) abzuleiten

(ii) inhomogene Transformation c_{μ} - komplex
b - reell

$$(12) \quad L_{\mu} \rightarrow L'_{\mu} = L_{\mu} + c_{\mu}$$

$$H \rightarrow H' = H + \frac{1}{2i} \sum_{\mu} \Gamma_{\mu} (c_{\mu}^* L_{\mu} - c_{\mu} L_{\mu}^{\dagger}) + b$$

(ii) erlaubt es stets spurlose Lindbladgeneratoren zu wählen

(c) Die adjoint-equation

Off ist man nicht an der Zeitentwicklung des Zustandes sondern nur an einer bestimmten Observablen $\hat{A}$ interessiert

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle \Big|_{\text{diss}} &= \text{Tr} \left\{ \hat{A} \frac{d}{dt} \rho(t) \Big|_{\text{diss}} \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ \hat{A} \sum_{\mu} \left(L_{\mu} \rho L_{\mu}^{\dagger} - \frac{1}{2} L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \rho - \frac{1}{2} \rho L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \right) \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ \rho \sum_{\mu} \left(L_{\mu}^{\dagger} \hat{A} L_{\mu} - \frac{1}{2} \hat{A} L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} - \frac{1}{2} L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \hat{A} \right) \right\}\end{aligned}$$

D.h. zur Berechnung von Erwartungswerten $\langle \hat{A}(t) \rangle$ ist es ausreichend die sog. adjoint equation zu lösen

(13)

$$\dot{\hat{A}} = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{A}] + \frac{1}{2} \sum_{\mu} L_{\mu}^{\dagger} \left(2 L_{\mu} \hat{A} L_{\mu} - L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \hat{A} - \hat{A} L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \right)$$

↑
man beachte die umgekehrte Reihenfolge im Vergleich zu (10)

I.2 Wichtige Beispiele

(A) harmonischer Oszillator gekoppelt an ein Bad harmonischer Oszillatoren bei $T \neq 0$

$$(14) \quad H_S = \hbar \omega \left(a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right) \quad H_B = \sum_k \hbar \omega_k \left(b_k^{\dagger} b_k + \frac{1}{2} \right)$$

$$H_{SB} = \hbar \sum_k g_k (a b_k^{\dagger} + a^{\dagger} b_k)$$