



ERNST MORITZ ARNDT UNIVERSITÄT GREIFSWALD
INSTITUT FÜR PHYSIK

Thermalisierung des dissipativen quantenmechanischen harmonischen Oszillators

Masterarbeit im Fach Physik

am 16. Juni 2011
eingereicht von

Daniel Pagel

1. Gutachter: Prof. Dr. Holger Fehske
2. Gutachter: Prof. Dr. Klaus Fesser

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| Einleitung | 1 |
| 1. Konzepte der Quantendissipation | 5 |
| 1.1. Abgeschlossene Quantensysteme | 5 |
| 1.2. Offene Quantensysteme und der System-Bad-Formalismus | 7 |
| 1.3. Die dynamische Abbildung und die propagierende Funktion | 9 |
| 1.4. Dynamische Halbgruppen und der Lindblad-Formalismus | 13 |
| 2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus | 21 |
| 2.1. Die Ableitung der Mastergleichung | 21 |
| 2.2. Berechnung der Erwartungswerte | 23 |
| 2.3. Gauß-Zustände und ihre Eigenschaften | 26 |
| 2.3.1. Definition reiner Gauß-Zustände | 27 |
| 2.3.2. Definition gemischter Gauß-Zustände | 28 |
| 2.3.3. Rekonstruktion von Gauß-Zuständen aus Erwartungswerten | 30 |
| 2.4. Konstruktion der propagierenden Funktion | 31 |
| 2.5. Der getriebene Oszillator in Husimi-Darstellung | 33 |
| 2.5.1. Die Bewegungsgleichung der Husimi-Funktion | 35 |
| 2.5.2. Lösung der Bewegungsgleichung über Fourier-Transformation | 37 |
| 2.5.3. Konstruktion der Husimi-Funktion über Erwartungswerte | 41 |
| 2.5.4. Das Beispiel des periodisch getriebenen Oszillators | 43 |
| 3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus | 49 |
| 3.1. Das Modell | 49 |
| 3.2. Allgemeine Lösung des Modells | 50 |
| 3.2.1. Die Bewegungsgleichungen der System-Operatoren | 51 |
| 3.2.2. Berechnung der Erwartungswerte | 53 |
| 3.2.3. Konstruktion der propagierenden Funktion | 55 |
| 3.3. Die Lösung des Modells in wichtigen Spezialfällen | 56 |
| 3.3.1. Der Fall konstanter Koeffizienten | 56 |
| 3.3.2. Das thermische Bad | 59 |
| 3.4. Der Übergang zum kontinuierlichen Bad | 60 |
| 3.4.1. Berechnung der Erwartungswerte | 61 |
| 3.4.2. Der Fall Ohmscher Dämpfung | 62 |
| 3.5. Das Beispiel der linearen Kette | 63 |
| 3.5.1. Das Modell | 64 |

| | |
|---|-----------|
| 3.5.2. Lösung des Modells im System-Bad-Formalismus | 65 |
| 3.5.3. Ergebnisse | 70 |
| 4. Equilibrierung und Thermalisierung des dissipativen Oszillators | 73 |
| 4.1. Equilibrierung und das Langzeitverhalten der Erwartungswerte | 73 |
| 4.2. Die Bedingungen für Thermalisierung | 76 |
| 4.3. Das Beispiel der linearen Kette | 79 |
| Zusammenfassung und Ausblick | 81 |
| A. Integrale über Gauß-Funktionen mit komplexen Exponenten | 83 |
| B. Die kanonische Dichtematrix für bilineare Hamilton-Operatoren | 85 |
| C. Die Ableitung der Bewegungsgleichung für die Husimi-Funktion | 91 |
| D. Gauß-Funktionen | 93 |
| Literaturverzeichnis | 95 |

Einleitung

Ein zentrales Thema der statistischen Physik ist die Untersuchung von Systemen mit irreversibler Zeitentwicklung. Allgemein bezeichnet man eine Zeitentwicklung als irreversibel, wenn sie sich prinzipiell von der in umgekehrter Zeitrichtung laufenden Entwicklung unterscheidet. Eine Ursache für irreversibles Zeitverhalten ist Dissipation, also die Umwandlung von Bewegungsenergie eines dynamischen Systems in Wärmeenergie der Umgebung. In der klassischen Mechanik wird solch eine Situation durch die Einführung von Reibungskräften beschrieben. Diese führen dazu, dass die zugrundeliegenden Bewegungsgleichungen nicht mehr unter Zeitumkehr invariant sind, womit Irreversibilität überhaupt erst möglich wird.

In der Quantenmechanik sind wir mit der besonderen Situation konfrontiert, dass die durch die Schrödinger-Gleichung beschriebene Zeitentwicklung der Wellenfunktion unitär und damit reversibel ist. Irreversibles Verhalten kann nur auf zwei Weisen generiert werden: Entweder man geht von reinen Zuständen zu gemischten Zuständen über und postuliert eine allgemeine Bewegungsgleichung für Dichtematrizen, die dann auch irreversible Zeitentwicklung beschreiben kann. Diese Vorgehensweise führt auf den sogenannten Lindblad-Formalismus. Oder man betrachtet das interessierende System als kleines Teilsystem eines großen „Universums“, mit dem es Energie austauschen kann. Ein solches Teilsystem wird auch als offenes System bezeichnet. Dies führt auf den sogenannten System-Bad-Formalismus, der eine mikroskopische Beschreibung dissipativer quantenmechanischer Systeme gibt. Während die Zeitentwicklung des Universums weiterhin durch die Schrödinger-Gleichung gegeben ist und somit reversibel bleibt, kann die Zeitentwicklung des Systems jetzt auch irreversibel sein. Wir werden sehen, dass der System-Bad-Formalismus der natürlichere, aber auch schwieriger umzusetzende Zugang ist.

Eine interessante und grundlegende Fragestellung ist dann, ob sich im Langzeitverhalten eines dissipativen Systems ein Gleichgewichtszustand einstellt, der durch eine Gleichverteilung der Energie auf alle Freiheitsgrade des Systems charakterisiert ist. Ein solcher Zustand wird als thermisch bezeichnet. Ein Beispiel für ein klassisches System, welches asymptotisch einen thermischen Zustand erreicht, ist eine Anordnung von identischen Kugeln in einer Box. Die Kugeln sollen dabei elastisch miteinander stoßen. Die Energie des Gesamtsystems ist erhalten, und seine Zeitentwicklung ist nach den Newtonschen Gesetzen reversibel. Betrachten wir jedoch nur eine Kugel, so wird diese mit jedem Stoß Energie vom Stoßpartner aufnehmen bzw. an diesen abgeben. Das System aus einer einzelnen Kugel in dem Gesamtsystem der Box ist ein dissipatives System. Überlässt man die Kugeln in der Box hinreichend lange sich selbst, so wird sich die Geschwindigkeitsverteilung jeder der einzelnen Kugeln einer Maxwell-Verteilung annähern, welche durch den Parameter „Temperatur“

charakterisiert ist. Die Kugeln in der Box thermalisieren.

Dieses Beispiel ist deswegen interessant, weil sich ein thermischer Endzustand aus einem nicht-thermischen Anfangszustand des Gesamtsystems entwickelt. Die gleiche Frage lässt sich nun auch für quantenmechanische Systeme stellen: Unter welchen Bedingungen wird ein dissipatives Quantensystem thermalisieren, wenn das Gesamtsystem in einem nicht-thermischen Anfangszustand präpariert wird?

Dissipative Quantensysteme mit irreversiblen Zeitverhalten werden bereits seit vielen Jahren untersucht. Wir verweisen auf die Monographien und Bücher [1–4], die eine gute Zusammenfassung des Forschungsstands geben. Mit Blick auf die Frage nach Thermalisierung diskutieren wir hier nur einige wesentliche Arbeiten aus der Fülle der existierenden Beiträge detaillierter, so zum Beispiel die Arbeit von Haake und Reibold [5], die für einen dissipativen quantenmechanischen harmonischen Oszillator eine positive Antwort gibt: Im Allgemeinen wird der Oszillator einen stationären Endzustand erreichen, der durch die Temperatur der Umgebung bestimmt ist. Diese Aussage gilt auch für stärkere Kopplung oder tiefe Temperaturen, obgleich es in diesen Fällen zu quantenmechanischen Abweichungen vom klassischen Verhalten kommt. Nun setzen Haake und Reibold voraus, dass die Umgebung in einem thermischen Anfangszustand präpariert wurde. Ihre Aussage ist somit nur, dass ein offenes System asymptotisch die Temperatur der Umgebung annimmt und in diesem Sinn thermalisiert.

Trotz der umfangreichen Literatur ist die Frage nach der Thermalisierung offener Quantensysteme unbeantwortet wenn die Umgebung in nicht-thermischen Anfangszuständen präpariert wird, wie es im klassischen Beispiel der Kugeln in der Box der Fall ist. Das Ziel unserer Arbeit ist es, genau diese Frage am Beispiel des dissipativen harmonischen Oszillators zu beantworten.

Dazu werden wir im ersten Kapitel kurz existierende Konzepte zur theoretischen Beschreibung von Quantendissipation rekapitulieren. Ausgehend von der quantenmechanischen Zeitentwicklung abgeschlossener Systeme führen wir zunächst den System-Bad-Formalismus ein. Dieser beschreibt die Einflüsse der Umgebung auf die Dynamik des offenen Systems, indem er explizite Modelle für die Umgebung verwendet. Anschließend werden wir die Idee von dynamischen Halbgruppen im Lindblad-Formalismus verfolgen. In dieser phänomenologischen Theorie sind alle Effekte der Umgebung in einer speziellen Struktur der Generatoren von Halbgruppen enthalten. Die Lösung für die reduzierte Dynamik des offenen Systems kann in beiden Formalismen zum Beispiel in Form einer propagierenden Funktion angegeben werden.

Im zweiten Kapitel werden wir den Lindblad-Formalismus auf den harmonischen Oszillator anwenden. Dabei lösen wir Bewegungsgleichungen für die Erwartungswerte von Ort und Impuls, sowie für die Varianzen. Wir werden sehen, dass die Lösungen für diese Größen besondere Strukturen zeigen, auf die wir in nachfolgenden Rechnungen immer wieder stoßen werden. Die propagierende Funktion können wir dann aus eben diesen Erwartungswerten konstruieren. Dabei machen wir uns die Eigenschaft des harmonischen Oszillators zunutze, dass Gauß-Zustände in der Zeitentwicklung Gauß-förmig bleiben.

Das dritte Kapitel widmet sich anschließend der Beschreibung des harmonischen Oszillators im System-Bad-Modell. Als Bad wählen wir dabei ebenfalls harmonische Oszillatoren, welche wir linear an den zentralen Oszillator koppeln. Ausgehend von Operator-Bewegungsgleichungen des Gesamtsystems wird es uns gelingen Gleichungen für die Zeitentwicklung der Observablen Ort und Impuls des zentralen Oszillators abzuleiten und zu lösen. Das Bilden von Erwartungswerten wird uns in einfacher und vollkommen allgemeiner Weise wieder auf die propagierende Funktion führen. Im Unterschied zu Lösungen in der Literatur können wir auf Pfadintegrale oder die vollständige Diagonalisierung des Hamilton-Operators verzichten. Der große Vorteil dieser Vorgehensweise ist, dass sie es uns erlaubt beliebige, auch nicht-thermische Anfangszustände zu betrachten, was im Pfadintegral-Formalismus nicht ohne Schwierigkeiten möglich ist. Weiterhin können wir im Unterschied zur Diagonalisierung beliebige Zeitabhängigkeiten der Oszillatorparameter zulassen. Da uns auch die explizite Berechnung der propagierenden Funktion gelingt, die in der Literatur oft als besonderer Vorteil des Pfadintegral-Formalismus [6] angegeben wird, können wir zeigen, dass das Formulieren und Lösen von komplizierten Pfadintegralen zumindest für lineare Systeme nicht nötig ist. Den Abschluss dieses Kapitels wird die lineare Kette von Oszillatoren bilden, welche wir im Rahmen des vorgestellten Modells behandeln werden.

Im vierten Kapitel werden wir die Ergebnisse aus den beiden vorangegangenen Kapiteln wieder zusammenführen, indem wir sie im Hinblick auf die Thermalisierung des zentralen Oszillators diskutieren. Speziell am Beispiel der linearen Kette werden wir sehen, dass die in der Literatur behandelte Frage der Thermalisierung eine genauere Betrachtung erfordert, da dort der Unterschied zwischen Equilibrierung mit einer fiktiven Temperatur und Thermalisierung im eigentlichen Sinn übersehen worden ist. Kurz gesagt, wir werden zeigen, dass der Oszillator fast immer equilibriert jedoch fast nie thermalisiert. Neben der Ausarbeitung des neuen Lösungswegs für den dissipativen harmonischen Oszillator im System-Bad-Formalismus ist diese Aussage das Hauptergebnis unserer Arbeit.

1. Konzepte der Quantendissipation

Das erste Kapitel dieser Arbeit widmet sich der quantenmechanischen Behandlung irreversibler Phänomene und dissipativer Systeme. Grundlage der Behandlung sind offene Systeme, die mit einer Umgebung, dem sogenannten Bad, wechselwirken und somit Energie austauschen können. Ausgehend von der unitären Zeitentwicklung des Gesamtsystems, unter Einbeziehung des Bades, erhält man eine nicht-unitäre Zeitentwicklung für das offene System selbst. Dissipation und Irreversibilität sind in dieser Beschreibung also direkte Effekte der Kopplung des offenen Systems an seine Umgebung. Eine Alternative zu diesem System-Bad-Formalismus ist der Lindblad-Formalismus, der ohne explizite Betrachtung der Ankopplung an das Bad eine nicht-unitäre Zeitentwicklung konstruiert. Konzeptionelle Grundlage sind dabei dynamische Halbgruppen und ihre Generatoren, deren Struktur allgemein charakterisiert werden kann. Wir betrachten hier und in späteren Kapiteln beide Zugänge. Unsere Behandlung folgt dabei Ausführungen, die in vielen Arbeiten und Lehrbüchern zu dissipativen Quantensystemen zu finden sind. Besonders hervorzuheben sind die Bücher und Überblicksartikel [1–4], sowie die Arbeiten [7–12]. An einigen Stellen werden wir über die in der Literatur dokumentierten Resultate hinausgehen.

1.1. Abgeschlossene Quantensysteme

In der Quantentheorie ist der (reine) Zustand eines abgeschlossenen physikalischen Systems durch einen Vektor $|\psi\rangle$ in einem Hilbertraum \mathcal{H} festgelegt. Die Zeitentwicklung eines Zustands ist durch die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (1.1)$$

gegeben, wobei H der Hamilton-Operator des Systems ist. Der Einfachheit halber beschränken wir uns auf zeitunabhängige Hamilton-Operatoren. Eine Verallgemeinerung auf ein zeitabhängiges $H(t)$ kann leicht vorgenommen werden.

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung kann in der Form

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (1.2)$$

mit dem unitären Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ geschrieben werden, der als Lösung der Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0) \quad (1.3)$$

1. Konzepte der Quantendissipation

zur Anfangsbedingung $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ definiert ist. Im Folgenden werden wir $t_0 = 0$ und $\hbar = 1$ setzen. Die Lösung der Gleichung (1.3) kann in der Form

$$U(t) \equiv U(t, 0) = e^{-iHt} = \sum_n e^{-iE_n t} |n\rangle \langle n| \quad (1.4)$$

geschrieben werden, wobei $|n\rangle$ der Eigenvektor von H zur Energie E_n ist.

Die durch $U(t)$ beschriebene Zeitentwicklung ist reversibel, denn für den Zeitentwicklungsoperator mit negativem Argument gilt

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(-t) = -i \frac{\partial}{\partial t} U(t) = -H U(t). \quad (1.5)$$

Die inverse Zeitentwicklung wird also durch den Operator $-H$ generiert, der wiederum ein hermitescher Operator ist. Die Zeitentwicklung in negativer Zeitrichtung ist somit nicht prinzipiell von der in positiver Zeitrichtung unterschieden, was die Reversibilität zeigt. Weiterhin folgt die Eigenschaft $U^{-1}(t) = U(-t) = U^\dagger(t)$, sprich die Unitarität von $U(t)$, da die Differentialgleichung (1.5) der Gleichung für den konjugierten Zeitentwicklungsoperator entspricht und die Anfangsbedingungen $U(0) = U^\dagger(0) = \mathbb{1}$ identisch sind. Insbesondere haben die Eigenwerte von $U(t)$ den Betrag Eins, wie auch in Gleichung (1.4) gut zu sehen ist.

Haben wir über das System nur unvollständige Information, so spricht man von einem gemischten Zustand. Eine quantentheoretische Beschreibung von gemischten Zuständen gelingt über Dichteoperatoren

$$\gamma = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (1.6)$$

Dabei sind p_1, p_2, \dots die Wahrscheinlichkeiten, mit denen man das System in verschiedenen reinen Zuständen $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$ mit $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$ findet. Es gilt

$$0 \leq p_i \leq 1 \quad \text{und} \quad \sum_i p_i = 1. \quad (1.7)$$

Aus der Definition (1.6) von Dichteoperatoren folgen die Eigenschaften

- (1) $\gamma^\dagger = \gamma$,
- (2) $\text{Tr} \gamma = 1$,
- (3) $\gamma \geq 0$.

Die Bedingung (3) bedeutet, dass γ ein positiv semidefiniter Operator ist, also dass $\langle \psi | \gamma | \psi \rangle \geq 0$ für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt.

Die Zeitentwicklung des Dichteoperators ist durch die von-Neumann-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \gamma(t) = -i[H, \gamma(t)] \quad (1.8)$$

gegeben. Die Lösung der von-Neumann-Gleichung kann mit der Definition $\gamma_0 = \gamma(0)$ als Abbildung in der Form

$$\gamma(t) = \Lambda_t \gamma_0 = U(t) \gamma_0 U^\dagger(t) \quad (1.9)$$

durch den unitären Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ ausgedrückt werden. Die hierdurch definierte Abbildung $\Lambda_t : \gamma_0 \mapsto \gamma(t)$ mit $\Lambda_0 = \mathbb{1}$ bezeichnet man als dynamische Abbildung.

Allgemein beschreiben dynamische Abbildungen Λ_t die Zeitentwicklung eines – abgeschlossenen oder offenen – Systems auf der Ebene der Dichteoperatoren. Sie haben die Eigenschaften

- (1) (konvex) linear: $\Lambda_t(a\gamma_1 + b\gamma_2) = a\Lambda_t\gamma_1 + b\Lambda_t\gamma_2$ mit $a, b \geq 0$ und $a + b = 1$,
- (2) hermitezitätserhaltend: $(\Lambda_t\gamma_0)^\dagger = \Lambda_t\gamma_0$,
- (3) spurerhaltend: $\text{Tr } \Lambda_t\gamma_0 = 1$ und
- (4) positiv: $\Lambda_t\gamma_0 \geq 0$.

Eigenschaft (1) drückt die Linearität der quantenmechanischen Zeitentwicklung aus, Eigenschaften (2)-(4) dass Dichteoperatoren in Dichteoperatoren abgebildet werden.

Für ein abgeschlossenes System erfüllt Λ_t eine weitere Eigenschaft, die der Reversibilität der Zeitentwicklung entspricht. Ausgehend etwa von Gleichung (1.4) lässt sich schreiben

$$\Lambda_t\gamma = \sum_{mn} e^{i(E_n - E_m)t} |n\rangle \langle n|\gamma|m\rangle \langle m| \quad (1.10)$$

was zeigt, dass die Eigenwerte von Λ_t den Betrag Eins haben, genauer:

$$\text{(ABG)} \quad \Lambda_t \text{ ist unitär .} \quad (1.11)$$

Ähnlich wie für $U(t)$ ist somit auch $t \mapsto \Lambda_{-t}$ wieder eine dynamische Abbildung eines abgeschlossenen Systems, die durch $-H$ generiert wird. Die Zeitentwicklungen in negativer und positiver Zeitrichtung sind nicht unterschieden. Sowohl im System-Bad-Formalismus als auch im Lindblad-Formalismus werden wir dynamische Abbildungen erhalten, die diese Eigenschaft nicht mehr erfüllen.

Diese Eigenschaft lässt sich auch anders ausdrücken: Zu jeder dynamischen Abbildung Λ_t existiert eine inverse Abbildung Λ_{-t} , welche man aus der ursprünglichen Abbildung durch Negieren des Zeitarguments erhält. Nimmt man die Eigenschaft $\Lambda_{t+s} = \Lambda_t\Lambda_s$ und die Existenz des neutralen Elementes $\Lambda_0 = \mathbb{1}$ hinzu, so folgt, dass sich aus den dynamischen Abbildungen eine kontinuierliche einparametrische dynamische Gruppe $\Lambda : t \rightarrow \Lambda_t$ mit $t \in \mathbb{R}$ bilden lässt.

1.2. Offene Quantensysteme und der System-Bad-Formalismus

Die durch die dynamischen Abbildungen Λ_t gegebene Zeitentwicklung eines abgeschlossenen Quantensystems ist reversibel. Um die irreversible Zeitentwicklung dissipativer Systeme quantenmechanisch beschreiben zu können müssen wir daher über das Modell eines abgeschlossenen Systems hinausgehen.

Nun ist klar, dass jedes physikalische System äußeren Einflüssen unterliegt und daher niemals komplett isoliert ist. Diesem Umstand kann man Rechnung tragen, wenn man das System als Teilsystem eines größeren Systems betrachtet. Das Gesamtsystem wird als abgeschlossen betrachtet und unterliegt daher der eben diskutierten

1. Konzepte der Quantendissipation

Dynamik. Das Teilsystem selbst ist jedoch nicht mehr abgeschlossen. Es steht in Wechselwirkung mit einer Umgebung, die sehr viele oder sogar unendlich viele Freiheitsgrade besitzt. Es ist ein offenes System: Der Energieaustausch zwischen dem System und der Umgebung ist charakteristisch für Dissipation.

In der Literatur wird meist angenommen, dass sich die Umgebung im thermischen Gleichgewicht befindet. Sie wird daher oft auch als Reservoir oder Bad bezeichnet. Wir werden in unseren Rechnungen beliebige Zustände für die Umgebung zulassen. Trotzdem behalten wir die Bezeichnung als Bad bei.

Wir müssen einige Bezeichnungen einführen und Größen definieren: Wir bezeichnen das offene System mit S und das Bad mit B . Die entsprechenden Hilberträume seien \mathcal{H}_S und \mathcal{H}_B . Das Gesamtsystem ist dann die Vereinigung von System und Bad $S+B$ mit dem Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$. Der Hamilton-Operator H des Gesamtsystems setzt sich aus den Hamilton-Operatoren H_S des offenen Systems und H_B des Bades, sowie einer Wechselwirkung H_{SB} beider Systeme zusammen

$$H = H_S \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_S \otimes H_B + H_{SB}. \quad (1.12)$$

Die Dynamik des abgeschlossenen Gesamtsystems ist, wie in Gleichung (1.3) bzw. (1.4), durch den unitären Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ zu H gegeben. Ziel ist es, aus dieser Dynamik die Dynamik des offenen Teilsystems zu erhalten.

Zunächst ist klar, dass ein Zustand $|\Psi\rangle$ aus dem Hilbertraum \mathcal{H} des Gesamtsystems im Allgemeinen nicht als Produktzustand $|\Psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\Omega\rangle$ mit Zuständen $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_S$ und $|\Omega\rangle \in \mathcal{H}_B$ darstellbar ist. Damit wird das offene System nicht durch einen reinen Zustand beschrieben. Es existiert jedoch ein Dichteoperator $\rho \in \mathcal{H}_S$, der den Zustand des offenen Systems in dem Sinne richtig beschreibt, dass der Erwartungswert eines Operators A_S , der nur auf \mathcal{H}_S wirkt, auch nur im offenen System berechnet werden muss, also dass

$$\langle A_S \rangle = \text{Tr}_{S+B}(\gamma(A_S \otimes \mathbb{1}_B)) = \text{Tr}_S(\rho A_S). \quad (1.13)$$

Dabei bezeichnet γ einen Dichteoperator des Gesamtsystems und Tr_X die Spur über Zustände des Systems X .

Der Dichteoperator ρ wird reduzierter Dichteoperator genannt. Er ist eindeutig über die partielle Spur des Dichteoperators γ definiert, denn es gilt

$$\langle \phi | \rho | \psi \rangle = \langle \phi | \text{Tr}_B \gamma | \psi \rangle = \sum_{\nu} \langle \phi \otimes f_{\nu} | \gamma | \psi \otimes f_{\nu} \rangle, \quad (1.14)$$

mit den Zuständen $|\phi\rangle$ und $|\psi\rangle$ aus \mathcal{H}_S und einer beliebigen orthonormierten Basis $\{|f_{\nu}\rangle\}$ in \mathcal{H}_B . Die partielle Spur ist linear und es gilt $\text{Tr}_B \mathbb{1} = \mathbb{1}$, sowie $\text{Tr}_B(A_S \otimes A_B) = A_S \cdot \text{Tr}_B A_B$ mit Operatoren $A_{S/B}$, die auf $\mathcal{H}_{S/B}$ wirken. Ein allgemeiner Operator A , der im Gesamtsystem wirkt, kann durch die partielle Spur jedoch nicht in zwei Operatoren zerlegt werden, die jeweils nur in den Teilsystemen wirken, das heißt $A \neq \text{Tr}_S A \otimes \text{Tr}_B A$.

Insgesamt liefert die partielle Spur den Übergang von der Beschreibung des Gesamtsystems zur Beschreibung des offenen Systems. Ausgehend von γ_0 können wir

über den unitären Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ die Zeitentwicklung des abgeschlossenen Gesamtsystems charakterisiert durch $\gamma(t)$ berechnen und durch anschließendes Bilden der partiellen Spur auf die Dynamik des offenen Systems schließen. Dieses Vorgehen ist natürlich nur dann möglich, wenn wir die Rechnungen mit einem expliziten physikalischen Bild für das Bad hinterlegen. Man nennt diese Methode System-Bad-Formalismus.

Der Weg über die Dynamik des Gesamtsystems hat den Vorteil, dass er beliebige Anfangspräparationen für das Bad erlaubt und im Rahmen der oben gezeigten Vorschriften das exakte Resultat für das verwendete Bad liefert. Der Nachteil ist, dass man bei der Berechnung der Dynamik des Gesamtsystems mit einer sehr hohen Anzahl von Freiheitsgraden konfrontiert ist. Diese Methode wird also nur für speziell gewählte Bäder praktisch anwendbar sein.

In Kapitel 3 werden wir ein Bad aus harmonischen Oszillatoren verwenden, welches wir linear an einen zentralen System-Oszillator koppeln. Dieses Modell ist exakt lösbar und liefert somit die Zeitentwicklung des dissipativen harmonischen Oszillators im System-Bad-Formalismus. Es ist auch in der Literatur schon oft als Prototyp eines dissipativen Systems studiert worden. Hier sind insbesondere die Arbeiten [5, 13, 14] zu erwähnen, an denen sich auch unsere Rechnungen orientieren werden. Die anschließende Diskussion der linearen Kette von Oszillatoren am Ende von Kapitel 3 und die Beantwortung der Frage nach Equilibrierung und Thermalisierung des Oszillators in Kapitel 4 wird über die übliche Betrachtung in der Literatur hinausgehen.

1.3. Die dynamische Abbildung und die propagierende Funktion

Die dynamische Abbildung

Wir haben die dynamische Abbildung Λ_t in Gleichung (1.9) für ein abgeschlossenes System eingeführt. In ähnlicher Weise lässt sich die dynamische Abbildung eines offenen Quantensystems betrachten. Die wesentliche Neuerung wird sein, dass die Eigenschaft (ABG) aus Gleichung (1.11), die die reversible Zeitentwicklung charakterisiert, nicht mehr gilt.

Wir nehmen an, dass zu einem Anfangszeitpunkt $t_0 = 0$ das Gesamtsystem als unkorrelierter Produktzustand $\gamma_0 = \rho_0 \otimes \Omega_B$ präpariert wurde. Dabei bezeichnet $\rho_0 = \rho(0)$ den reduzierten Dichteoperator zum Anfangszeitpunkt und Ω_B den (nicht-thermischen) Anfangszustand des Bades. Dann lässt sich die Zeitentwicklung des offenen Systems über die partielle Spur als

$$\rho_0 \mapsto \Lambda_t \rho_0 = \text{Tr}_B [U(t)(\rho_0 \otimes \Omega_B)U^\dagger(t)] \quad (1.15)$$

schreiben. Diese Gleichung liefert die dynamische Abbildung Λ_t , die die Dichtematrix $\rho(t)$ des Teilsystems aus der Dichtematrix ρ_0 erhält (siehe Abbildung 1.1). Die Schwierigkeit bei der Berechnung von Λ_t ist, dass aufgrund der Wechselwirkung

1. Konzepte der Quantendissipation

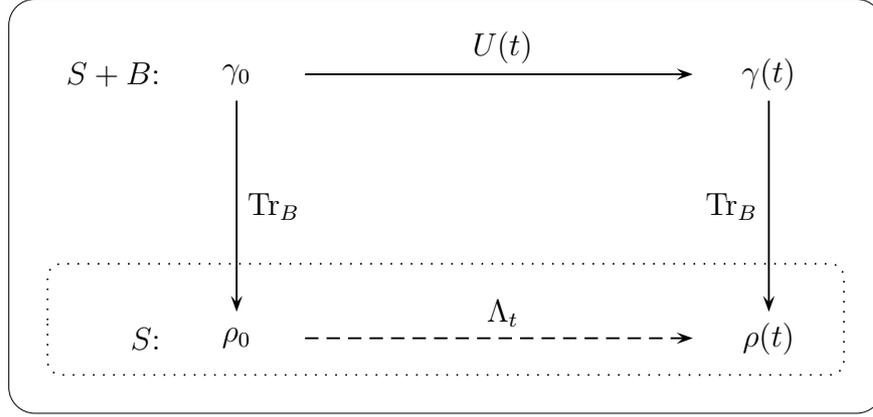


Abbildung 1.1.: Illustration der Definition der dynamischen Abbildung eines offenen Systems.

H_{SB} im Hamilton-Operator (1.12) der Operator unter der partiellen Spur in (1.15) nicht in Operatoren zerfällt, die nur in den Teilsystemen wirken. Die rechte Seite der Gleichung (1.15) lässt sich zunächst nicht weiter vereinfachen.

Um Aussagen über die Struktur der dynamischen Abbildung Λ_t treffen zu können, führen wir eine Basis $\{|\psi_k\rangle\}$ in \mathcal{H}_S ein. Unter Ausnutzung der Spektralzerlegung $\Omega_B = \sum_\nu \lambda_\nu |f_\nu\rangle \langle f_\nu|$ mit $0 \leq \lambda_\nu \leq 1$ und $\sum_\nu \lambda_\nu = 1$ können wir (1.15) umschreiben und erhalten

$$\begin{aligned}
 (\Lambda_t \rho_0)_{k,l} &= \langle \psi_k | \text{Tr}_B [U(t)(\rho_0 \otimes \Omega_B)U^\dagger(t)] | \psi_l \rangle \\
 &= \sum_\mu \langle \psi_k \otimes f_\mu | U(t)(\rho_0 \otimes \Omega_B)U^\dagger(t) | \psi_l \otimes f_\mu \rangle \\
 &= \sum_{\mu,\nu} \lambda_\nu \langle \psi_k \otimes f_\mu | U(t)(\rho_0 \otimes |f_\nu\rangle \langle f_\nu|)U^\dagger(t) | \psi_l \otimes f_\mu \rangle \\
 &= \sum_{\mu,\nu} \sum_{m,n} \lambda_\nu \langle \psi_k \otimes f_\mu | U(t) | \psi_m \otimes f_\nu \rangle \langle \psi_m | \rho_0 | \psi_n \rangle \langle \psi_n \otimes f_\nu | U^\dagger(t) | \psi_l \otimes f_\mu \rangle \\
 &= \sum_\alpha \sum_{m,n} (W_\alpha)_{k,m}(t) \rho_{m,n}(0) (W_\alpha^\dagger)_{n,l}(t),
 \end{aligned} \tag{1.16}$$

mit $\alpha = (\mu, \nu)$ und $(W_\alpha)_{k,m}(t) = \sqrt{\lambda_\nu} \langle \psi_k \otimes f_\mu | U(t) | \psi_m \otimes f_\nu \rangle$. Die dynamische Abbildung Λ_t hat also die Gestalt

$$\Lambda_t \rho_0 = \sum_\alpha W_\alpha(t) \rho_0 W_\alpha^\dagger(t). \tag{1.17}$$

Die dynamische Abbildung Λ_t ist linear, positiv und es gilt $\Lambda_t \mathbb{1} = \mathbb{1}$, da aus der Definition der W_α als Matrixelemente von Zeitentwicklungsoperatoren die Eigenschaft $\sum_\alpha W_\alpha^\dagger W_\alpha = \mathbb{1}$ folgt.

1.3. Die dynamische Abbildung und die propagierende Funktion

Die in Gleichung (1.17) definierte Abbildung ist sogar vollständig positiv. Man bezeichnet dabei eine dynamische Abbildung Λ_t als vollständig positiv, wenn die durch eine identische Abbildung $\mathbb{1}_n$ erweiterte Tensorprodukt-Abbildung $\Lambda_t \otimes \mathbb{1}_n$ für alle positiven Ganzzahlen n positiv ist. Die Tensorprodukt-Abbildung wirkt dabei entsprechend auf Dichteoperatoren γ aus einem Hilbertraum $\mathcal{H}_S \otimes \mathbb{C}^n$. Dass Λ_t diese Eigenschaft erfüllt, zeigt das Bilden von Erwartungswerten mit Zuständen $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_S \otimes \mathbb{C}^n$. Wir finden

$$\begin{aligned} \langle \Psi | (\Lambda_t \otimes \mathbb{1}_n) \gamma | \Psi \rangle &= \langle \Psi | \sum_{\alpha} (W_{\alpha}(t) \otimes \mathbb{1}_n) \gamma (W_{\alpha}^{\dagger}(t) \otimes \mathbb{1}_n) | \Psi \rangle \\ &= \sum_{\alpha} \langle (W_{\alpha}^{\dagger}(t) \otimes \mathbb{1}_n) \Psi | \gamma | (W_{\alpha}^{\dagger}(t) \otimes \mathbb{1}_n) \Psi \rangle \geq 0. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Die Anwendung des Operators $W_{\alpha}^{\dagger}(t) \otimes \mathbb{1}_n$ auf einen Zustand $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_S \otimes \mathbb{C}^n$ ergibt wieder einen Zustand aus dem Hilbertraum $\mathcal{H}_S \otimes \mathbb{C}^n$. Damit folgt aus der Positivität des Dichteoperators γ , also der Eigenschaft $\langle \Psi | \gamma | \Psi \rangle \geq 0$ für alle $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_S \otimes \mathbb{C}^n$, dass jeder Summand der Summe über α positiv ist und somit die letzte Ungleichung in (1.18) gilt.

Im Ergebnis haben wir die allgemeine Struktur der dynamischen Abbildung eines offenen Systems im Schrödinger-Bild bestimmt. Im Heisenberg-Bild gibt es entsprechend eine Abbildung, die auf Operatoren statt auf Zustände wirkt. Diese bezeichnen wir als Λ_t^{\dagger} . Sie ist durch die Dualitätsbedingung

$$\langle A(t) \rangle = \text{Tr}((\Lambda_t \rho_0) A_0) = \text{Tr}(\rho_0 (\Lambda_t^{\dagger} A_0)) \quad (1.19)$$

für einen Operator $A(t)$ mit $A_0 = A(0)$ definiert, der auf \mathcal{H}_S wirkt. Mit (1.17) und der zyklischen Vertauschbarkeit von Operatoren unter der Spur finden wir

$$\Lambda_t^{\dagger} A_0 = \sum_{\alpha} W_{\alpha}^{\dagger}(t) A_0 W_{\alpha}(t). \quad (1.20)$$

Die Abbildung Λ_t^{\dagger} ist ebenso wie Λ_t linear und (vollständig) positiv und es gilt $\Lambda_t^{\dagger} \mathbb{1} = \mathbb{1}$.

Die propagierende Funktion

Für viele Zwecke ist es sinnvoll, die dynamische Abbildung Λ_t aus Gleichung (1.15) bezüglich einer konkreten Basis zu schreiben. Insbesondere in Ortsdarstellung erhält man dann die sogenannte propagierende Funktion, die wir hier einführen wollen.

In der Quantenmechanik bezeichnet man die Wahrscheinlichkeit eines Teilchens von einem Punkt x' zur Zeit $t' = 0$ zu einem anderen Punkt x in einer bestimmten Zeit $t - t' = t$ zu kommen als Propagator $K(x, x', t)$. Der Propagator ist eine Greensche Funktion für die Schrödingergleichung, das heißt

$$\left[H(x) - i \frac{\partial}{\partial t} \right] K(x, x', t) = -i \delta(x - x') \delta(t), \quad (1.21)$$

1. Konzepte der Quantendissipation

oder äquivalent dazu

$$K(x, x', t) = \langle x | U(t) | x' \rangle , \quad (1.22)$$

wobei $U(t)$ der unitäre Zeitentwicklungsoperator des durch den Hamilton-Operator $H(x)$ in Ortsdarstellung repräsentierten Systems ist.

Der Propagator bestimmt den reinen Zustand $\psi(x, t)$ eines Systems für einen gegebenen Anfangszustand $\psi(x', 0) = \psi_0(x')$ und eine gegebene Zeit t durch die Gleichung

$$\psi(x, t) = \int K(x, x', t) \psi_0(x') dx' \quad \text{bzw.} \quad \psi^*(x, t) = \int K^*(x, x', t) \psi_0^*(x') dx' . \quad (1.23)$$

Für die Dichtematrix eines reinen Zustandes folgt

$$\rho(x, x', t) = \psi(x, t) \psi^*(x', t) = \iint J(x, x', y, y', t) \rho_0(y, y') dy dy' , \quad (1.24)$$

wobei wir die propagierende Funktion $J(x, x', y, y', t)$ eingeführt haben, die hier durch $J(x, x', y, y', t) = K(x, y, t) K^*(x', y', t)$ gegeben ist.

Erweitern wir unser System um ein Bad, so ist die Zeitentwicklung der reduzierten Dichtematrix nach (1.15) durch die dynamische Abbildung Λ_t gegeben, so dass

$$\rho(x, x', t) = \langle x | \Lambda_t \rho_0 | x' \rangle = \langle x | \text{Tr}_B [U(t) (\rho_0 \otimes \Omega_B) U^\dagger(t)] | x' \rangle . \quad (1.25)$$

Benutzen wir die allgemeine Struktur (1.17) der dynamischen Abbildung, so folgt

$$\begin{aligned} \rho(x, x', t) &= \langle x | \sum_{\alpha} W_{\alpha}(t) \rho_0 W_{\alpha}^{\dagger}(t) | x' \rangle \\ &= \iint \sum_{\alpha} \langle x | W_{\alpha}(t) | y \rangle \langle y | \rho_0 | y' \rangle \langle y' | W_{\alpha}^{\dagger}(t) | x' \rangle dy dy' . \end{aligned} \quad (1.26)$$

Wir identifizieren die propagierende Funktion durch

$$J(x, x', y, y', t) = \sum_{\alpha} \langle x | W_{\alpha}(t) | y \rangle \langle y' | W_{\alpha}^{\dagger}(t) | x' \rangle , \quad (1.27)$$

und erhalten für die reduzierte Dichtematrix

$$\rho(x, x', t) = \iint J(x, x', y, y', t) \rho_0(y, y') dy dy' . \quad (1.28)$$

Verwenden wir die Annahmen, die wir bei der Ableitung der allgemeinen Struktur (1.17) der dynamischen Abbildung gemacht haben, so stellen wir fest, dass eine propagierende Funktion für die reduzierte Dichtematrix nur dann existieren kann, wenn die Zustände des offenen Systems und des Bades zur Zeit $t_0 = 0$ unkorreliert sind.

Leider kann die Gleichung (1.27) nicht als mathematische Definition der propagierenden Funktion angesehen werden. Dies sehen wir, wenn wir die Spektralzerlegung $\rho_0 = \iint \rho_0(y, y') |y\rangle \langle y'| dy dy'$ in die Gleichung (1.25) einsetzen. Wir finden

$$\rho(x, x', t) = \langle x | \Lambda_t \rho_0 | x' \rangle = \iint \langle x | \Lambda_t (|y\rangle \langle y'|) | x' \rangle \rho_0(y, y') dy dy'. \quad (1.29)$$

Unter den Integralen treten offenbar auch Terme mit $y' = y$ auf. Dann wirkt die dynamische Abbildung Λ_t auf δ -Funktionen, was mathematisch nicht korrekt definiert ist. Auf diese mathematische Fragestellung werden wir hier jedoch nicht weiter eingehen. Vielmehr werden wir im Folgenden davon ausgehen, dass eine propagierende Funktion $J(x, x', y, y', t)$ derart existiert, dass die Gleichung (1.28) erfüllt ist.

In der Literatur wird die propagierende Funktion über Pfadintegrale berechnet [1, 6]. Wir werden im Abschnitt 2.4 zeigen, dass sich die propagierende Funktion zumindest für lineare Systeme auch ohne die Verwendung von Pfadintegralen berechnen lässt. Für solche Systeme ist bekannt, dass Gauß-Zustände, die wir im Abschnitt 2.3 definieren werden, in der Zeitentwicklung Gauß-förmig bleiben. Weiterhin lassen sich Gauß-Zustände eindeutig durch die Erwartungswerte von Ort und Impuls, sowie deren Varianzen ausdrücken. Das bietet uns die Möglichkeit die propagierende Funktion $J(x, x', y, y', t)$ für den im Kapitel 2 betrachteten harmonischen Oszillator allein aus der Kenntnis der Zeitentwicklung dieser Größen zu konstruieren.

1.4. Dynamische Halbgruppen und der Lindblad-Formalismus

Im System-Bad-Formalismus muss für die eigentlich interessierende Dichtematrix $\rho(t)$ des Teilsystems zunächst die Dynamik des Gesamtsystems berechnet werden. Nur im Anfangszustand zur Zeit $t = 0$ können wir die partielle Spur schon auf γ_0 anwenden und erhalten, nach Voraussetzung, ρ_0 . Es stellt sich die Frage, ob sich die Berechnung der Dynamik des Gesamtsystems vermeiden lässt. Dieses Vorgehen würde bedeuten, dass wir in der Abbildung 1.1 direkt dem unteren Weg folgen. Dazu müsste sich die rechte Seite der Gleichung (1.15) mittels eines Operators schreiben lassen, der nur auf den Dichteoperator des offenen Systems wirkt. Wir suchen also eine geschlossene Gleichung für den reduzierten Dichteoperator in der Form

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = L \rho(t). \quad (1.30)$$

Solch eine Gleichung wird auch Master-Gleichung genannt. Die dynamische Abbildung Λ_t , weiterhin mit $\rho(t) = \Lambda_t \rho_0$, wäre dann durch

$$\Lambda_t = e^{Lt} \quad (1.31)$$

gegeben. Umgekehrt lässt sich aus der Kenntnis von Λ_t die lineare Abbildung L in (1.30) – der Generator der dynamischen Abbildung Λ_t – durch

$$L = \frac{1}{\rho_0} \frac{d}{dt} \rho(t) \Big|_{t=0} = \frac{1}{\rho_0} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\rho(t) - \rho_0}{t} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\Lambda_t - \mathbb{1}}{t} = \frac{d}{dt} \Lambda_t \Big|_{t=0} \quad (1.32)$$

1. Konzepte der Quantendissipation

definieren.

Im Allgemeinen wird eine Gleichung der Form (1.30) nicht existieren. Wie Gleichung (1.31) zeigt, kann dies nur der Fall sein, wenn

$$\begin{aligned} (1) \quad \Lambda_t \Lambda_s &= \Lambda_{t+s} \text{ für } t, s \geq 0, \\ (2) \quad \Lambda_0 &= \mathbb{1} \end{aligned} \tag{1.33}$$

gilt. Diese Bedingungen bedeuten, dass die Abbildungen Λ_t eine dynamische Halbgruppe bilden, was für allgemeine offene Systeme nicht der Fall ist (vgl. unsere Resultate für den dissipativen Oszillator in Kap. 3 und die Diskussion in Referenz [15]). Die grundlegende und vereinfachende Annahme in Gleichung (1.30) ist ja, dass zu jedem Zeitpunkt die Dynamik des Teilsystems vollständig durch die reduzierte Dichtematrix $\rho(t)$ bestimmt ist. Diese Annahme entspricht einer Halbgruppen bzw. Markov-Dynamik, wie in Referenz [2] ausführlich diskutiert.

Die Eigenschaften (1.33) sind sehr ähnlich zu den in Kapitel 1.1 diskutierten Gruppeneigenschaften für abgeschlossene Systeme. Der wesentliche Unterschied ist, dass die Abbildung Λ_{-t} im Allgemeinen nicht mehr existiert: Halbgruppen beschreiben irreversible Zeitentwicklung. Während dynamische Halbgruppen also keine vollständige Beschreibung offener Systeme geben können, erlauben sie immerhin eine konsistente Beschreibung dissipativer Systeme. Eine umfassende Darstellung über das Konzept dynamischer Halbgruppen ist in Referenz [3] zu finden. In diesem Zusammenhang sind auch die Arbeiten [7, 9, 11, 12, 15] interessant.

Lindblad-Struktur der Generatoren

Auch wenn die Annahmen die zu Gleichung (1.30) führen sehr weitgehend sind, ist es mitunter sinnvoll zu postulieren, dass ein dissipatives System wenigstens approximativ durch eine Halbgruppen-Dynamik beschrieben wird.

Unter dieser Annahme lässt sich die Struktur des Generators L in den Gleichungen (1.30) und (1.31) vollständig charakterisieren. Diese Charakterisierung geht auf G. Lindblad [8], und unabhängig davon auf V. Gorini, A. Kossakowski und E. C. G. Sudarshan [9] zurück. Das Lindblad-Theorem besagt, dass für die Erhaltung der Eigenschaften von Dichtematrizen unter der Zeitentwicklung mit der dynamischen Halbgruppe die Gleichung

$$\begin{aligned} L\rho &= -i[H_S, \rho] + \frac{1}{2} \sum_j ([V_j \rho, V_j^\dagger] + [V_j, \rho V_j^\dagger]) \\ &= -i[H_S, \rho] + \frac{1}{2} \sum_j (2V_j \rho V_j^\dagger - V_j^\dagger V_j \rho - \rho V_j^\dagger V_j) \end{aligned} \tag{1.34}$$

eine notwendige und hinreichende Bedingung für die Struktur des Generators ist. Dabei bezeichnen V_j Operatoren auf \mathcal{H}_S und H_S den effektiven Hamilton-Operator des offenen Systems. Der Operator L wird auch als Lindblad-Operator bezeichnet. Wir werden uns im Folgenden von der Richtigkeit des Theorems überzeugen.

Die Struktur (1.34) ist hinreichend, wenn sie die Eigenschaften von Dichtematrizen erhält. Setzt man die Hermitizität ($\rho_0 = \rho_0^\dagger$) der Dichtematrix zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ voraus, so folgt für die Zeitentwicklung der hermitesch konjugierten Dichtematrix

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\rho}{dt}\right)^\dagger &= (L\rho)^\dagger = i[\rho^\dagger, H_S^\dagger] + \frac{1}{2} \sum_j ([V_j, \rho^\dagger V_j^\dagger] + [V_j \rho^\dagger, V_j^\dagger]) \\ &= -i[H_S, \rho] + \frac{1}{2} \sum_j ([V_j \rho, V_j^\dagger] + [V_j, \rho V_j^\dagger]) = L\rho = \frac{d\rho}{dt}, \end{aligned} \quad (1.35)$$

wobei die Hermitizität des Hamilton-Operators ausgenutzt wurde. Die Dichtematrix bleibt unter der Zeitentwicklung mit L hermitesch, da $d\rho/dt$ hermitesch ist.

Auch die Eigenschaft $\text{Tr}(\rho) = 1$ bleibt erhalten, denn unter Ausnutzung der zyklischen Vertauschbarkeit von Operatoren unter der Spurbildung ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \text{Tr}(\rho) &= \text{Tr} \left(\frac{d\rho}{dt} \right) = -i \text{Tr}([H_S, \rho]) + \frac{1}{2} \sum_j \text{Tr}([V_j \rho, V_j^\dagger] + [V_j, \rho V_j^\dagger]) \\ &= \frac{1}{2} \sum_j (2 \text{Tr}(V_j \rho V_j^\dagger) - \text{Tr}(V_j^\dagger V_j \rho) - \text{Tr}(\rho V_j^\dagger V_j)) = 0. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Um zu zeigen, dass jede Dichtematrix unter der Zeitentwicklung mit L auch positiv semidefinit bleibt, bietet es sich an, die im Lindblad-Operator auftretenden Terme einzeln zu untersuchen.

Der erste Term

$$L_1 \rho = -i[H_S, \rho] \quad (1.37)$$

liefert für sich genommen das bekannte Ergebnis

$$e^{L_1 t} \rho_0 = e^{-iH_S t} \rho_0 e^{iH_S t}. \quad (1.38)$$

Damit bleibt ρ für alle Zeiten $t \geq 0$ positiv semidefinit, denn es gilt

$$\langle \psi | e^{L_1 t} \rho_0 | \psi \rangle = \langle e^{iH_S t} \psi | \rho_0 | e^{iH_S t} \psi \rangle = \langle \psi' | \rho_0 | \psi' \rangle \geq 0, \quad (1.39)$$

wenn die Positivität von ρ_0 vorausgesetzt wird.

Der zweite Term

$$L_2 \rho = -\frac{1}{2} V^\dagger V \rho - \frac{1}{2} \rho V^\dagger V \quad (1.40)$$

führt auf

$$e^{L_2 t} \rho_0 = e^{-V^\dagger V t/2} \rho_0 e^{-V^\dagger V t/2} \quad (1.41)$$

und erhält damit ebenfalls die Positivität der Dichtematrix.

Der letzte Term

$$L_3 \rho = V \rho V^\dagger \quad (1.42)$$

erzeugt eine Lösung, die sich als

$$e^{L_3 t} \rho_0 = \rho_0 + t V \rho_0 V^\dagger + \frac{t^2}{2} V V \rho_0 V^\dagger V^\dagger + \dots \quad (1.43)$$

1. Konzepte der Quantendissipation

schreiben lässt. Mit ρ_0 sind offenbar auch alle Operatoren $V\rho_0 V^\dagger, VV\rho_0 V^\dagger V^\dagger, \dots$ positiv und damit ist $e^{L_3 t} \rho_0$ als Summe solcher Operatoren selbst positiv, denn

$$\begin{aligned} \langle \psi | e^{L_3 t} \rho_0 | \psi \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \langle \psi | V^n \rho_0 (V^\dagger)^n | \psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \langle (V^\dagger)^n \psi | \rho_0 | (V^\dagger)^n \psi \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \langle \psi'_n | \rho_0 | \psi'_n \rangle \geq 0. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Insgesamt bleibt die Positivität für jeden der drei verschiedenen Beiträge zum Lindblad-Operator aus Gleichung (1.34) erhalten. Um die Zeitentwicklung mit dem gesamten L zu bestimmen, nutzen wir die Trotter-Formel. Diese besagt, dass

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{A/n} e^{B/n} \right)^n. \quad (1.45)$$

Somit folgt

$$e^{Lt} \rho_0 = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{L_1 t/n} e^{L_2 t/n} e^{L_3 t/n} \right)^n \rho_0. \quad (1.46)$$

Die Zeitentwicklung mit dem gesamten Lindblad-Operator ergibt sich aus der sukzessiven Anwendung von infinitesimalen dynamischen Abbildungen mit den Generatoren L_1 , L_2 und L_3 . Jede einzelne dieser Abbildungen erhält die Positivität des Dichteoperators. Wir schlussfolgern, dass die Zeitentwicklung mit dem gesamten Lindblad-Operator die Positivität von Dichteoperatoren erhält.

Wir haben damit gezeigt, dass die Struktur (1.34) des Generators hinreichend ist. Erstaunlicherweise wird diese Eigenschaft in der Literatur nicht gezeigt. Dort beschränkt man sich auf die Notwendigkeit der Struktur (1.34). Um diese zu zeigen, müssen wir die Struktur (1.34) aus der Definition (1.32) des Generators mit der dynamischen Abbildung (1.15) ableiten. Dazu differenzieren wir zunächst die allgemeine Struktur einer dynamischen Abbildung (1.15) gemäß (1.32) nach der Zeit. Anschließend werden wir durch Ausnutzung der Erhaltung der Eigenschaften von Dichtematrizen die Struktur (1.34) des Lindblad-Generators wiederfinden. Wir orientieren uns dabei an der Arbeit von R. Alicki und K. Lendi [3].

Bei der Differentiation der Gleichung (1.17) nach der Zeit ist es sinnvoll, die in den Operatoren $W_\alpha(t)$ stehende Zeitabhängigkeit auf Koeffizienten zu übertragen. Das erreichen wir, wenn wir einen Hilbertraum \mathcal{H}_S mit $\dim \mathcal{H}_S = N$ wählen und mit F_k , $k = 0, 1, \dots, N^2 - 1$ und $F_0 = \mathbb{1}$ eine Basis von Operatoren auf \mathcal{H}_S bezeichnen. Dann können wir die dynamische Abbildung (1.17) als

$$\rho(t) = \Lambda_t \rho_0 = \sum_{k,l=0}^{N^2-1} c_{kl}(t) F_k \rho_0 F_l^\dagger \quad (1.47)$$

mit den zeitabhängigen Koeffizienten $c_{kl}(t)$ schreiben. Die Anfangsbedingungen sind $c_{00}(0) = 1$ und $c_{kl}(0) = 0$ für alle anderen Koeffizienten.

Da Dichtematrizen auf Dichtematrizen abgebildet werden sollen, müssen die Koeffizienten $c_{kl}(t)$ eine Reihe von Eigenschaften erfüllen. Aus der Erhaltung der Hermitizität von ρ folgt die Bedingung $c_{kl}(t) = c_{lk}^*(t)$, denn

$$\rho^\dagger(t) = \sum_{k,l=0}^{N^2-1} c_{kl}^*(t) F_l \rho_0 F_k^\dagger = \sum_{k,l=0}^{N^2-1} c_{lk}^*(t) F_k \rho_0 F_l^\dagger. \quad (1.48)$$

Die Erhaltung der Positivität des Dichteoperators führt dazu, dass die Matrix, die aus den Koeffizienten $c_{kl}(t)$ gebildet wird, positiv definit sein muss. Diese Eigenschaft wird ersichtlich, wenn wir die Positivität von Erwartungswerten $\langle \psi | \rho | \psi \rangle$ mit Zuständen $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_S$ prüfen. Wir erhalten

$$\langle \psi | \rho(t) | \psi \rangle = \sum_{k,l=0}^{N^2-1} c_{kl}(t) \langle F_k^\dagger \psi | \rho_0 | F_l^\dagger \psi \rangle, \quad (1.49)$$

und durch Einsetzen der Spektralzerlegung $\rho_0 = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ von Dichteoperatoren

$$\langle \psi | \rho(t) | \psi \rangle = \sum_i p_i \sum_{k,l=0}^{N^2-1} c_{kl}(t) \langle F_k^\dagger \psi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | F_l^\dagger \psi \rangle. \quad (1.50)$$

Durch eine anschließende Definition der Zahlen $\psi_{il} = \langle \psi_i | F_l^\dagger \psi \rangle$ folgt

$$\langle \psi | \rho(t) | \psi \rangle = \sum_i p_i \sum_{k,l=0}^{N^2-1} \psi_{il} c_{lk}^*(t) \psi_{ki}. \quad (1.51)$$

Die Summe über k und l ist eine quadratische Form, die genau dann eine positive Zahl ergibt, wenn die Matrix aus den Koeffizienten $c_{lk}^*(t) = c_{kl}(t)$ positiv definit ist.

Wir differenzieren den Ausdruck (1.47) nach der Zeit, separieren die Terme mit $k = 0$ oder $l = 0$ und erhalten

$$\begin{aligned} L\rho &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{c_{00}(\epsilon) - 1}{\epsilon} \rho_0 + \sum_{k=1}^{N^2-1} \frac{c_{k0}(\epsilon)}{\epsilon} F_k \rho_0 + \rho_0 \sum_{k=1}^{N^2-1} \frac{c_{k0}^*(\epsilon)}{\epsilon} F_k^\dagger + \sum_{k,l=1}^{N^2-1} \frac{c_{kl}(\epsilon)}{\epsilon} F_k \rho_0 F_l^\dagger \right) \\ &= G\rho_0 + \rho_0 G^\dagger + \sum_{k,l=1}^{N^2-1} a_{kl} F_k \rho_0 F_l^\dagger \end{aligned} \quad (1.52)$$

mit entsprechenden Operatoren G und G^\dagger und der positiv definiten Matrix, die aus den Koeffizienten a_{kl} gebildet wird.

Wir wissen bereits, dass die Eigenschaft der Spurerhaltung $\text{Tr}(L\rho) = 0$ für Generatoren vom Lindblad-Typ immer erfüllt ist. Wenden wir sie auf die Gleichung (1.52) an, so finden wir

$$G + G^\dagger = - \sum_{k,l=1}^{N^2-1} a_{kl} F_l^\dagger F_k. \quad (1.53)$$

1. Konzepte der Quantendissipation

Diese Gleichung können wir in (1.52) einsetzen und erhalten

$$L\rho = \frac{1}{2}[(G - G^\dagger), \rho] + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{N^2-1} a_{kl} (2F_k \rho F_l^\dagger - \rho F_l^\dagger F_k - F_l^\dagger F_k \rho). \quad (1.54)$$

Identifizieren wir den effektiven Hamilton-Operator des offenen Systems durch $H_S = i(G - G^\dagger)/2 = H_S^\dagger$ und gehen von den $\{F_k\}$ nach der Vorschrift $F_k = \sum_j b_{kj} V_j$ zu Linearkombinationen $\{V_j\}$ über, so resultiert

$$L\rho = -i[H_S, \rho] + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{N^2-1} \sum_{j,m=1}^{N^2-1} a_{kl} b_{kj} b_{lm}^* (2V_j \rho V_m^\dagger - \rho V_m^\dagger V_j - V_m^\dagger V_j \rho). \quad (1.55)$$

Durch Wahl der Koeffizienten b_{kj} so, dass $\sum_{kl} a_{kl} b_{kj} b_{lm}^* = \delta_{jm}$ ergibt, folgt letztendlich die diagonale Form (1.34) des Lindblad-Operators.

Im Heisenberg-Bild ergibt sich analog eine lineare Abbildung L^\dagger mit

$$\frac{d}{dt} A(t) = L^\dagger A(t), \quad A(t) = \Lambda_t^\dagger A_0, \quad (1.56)$$

wobei

$$L^\dagger A = i[H_S, A] + \frac{1}{2} \sum_j (V_j^\dagger [A, V_j] + [V_j^\dagger, A] V_j). \quad (1.57)$$

Zusammenfassend konnten wir mit (1.34) bzw. (1.57) Aussagen über die Struktur der Abbildung treffen, die die Dynamik eines offenen Systems durch dynamische Halbgruppen beschreibt. Im Folgenden werden wir uns kurz mit zwei wesentlichen Konsequenzen aus dieser Struktur beschäftigen.

Zum Einen stellen wir fest, dass die über den Lindblad-Generator definierte Zeitentwicklung irreversibel ist, denn es gilt offenbar

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho(-t) &= -\frac{d}{dt} \rho(t) = -L\rho(t) \\ &\neq -i[-H, \rho(t)] + \frac{1}{2} \sum_j \left([-V_j \rho, -V_j^\dagger] + [-V_j, \rho - V_j^\dagger] \right). \end{aligned} \quad (1.58)$$

Wir können das Minuszeichen von der linken Seite nicht in die neuen Terme hineinziehen. Der Operator, der uns den Zustand rückwärts in der Zeit entwickelt, ist ein anderer als der, der die Vorwärtsentwicklung beschreibt.

Eine weniger formale, aber technisch wichtige Konsequenz ist, dass die im Heisenberg-Bild richtige Produktregel

$$\frac{d(AB)}{dt} = \frac{dA}{dt} B + A \frac{dB}{dt} \quad (1.59)$$

aufgrund der Zusatzterme in (1.34) ihre Gültigkeit verliert.

In der bisherigen Betrachtung blieb unbeantwortet, wie wir die Operatoren V_j für ein spezielles System zu wählen haben. Mit dieser Frage werden wir uns im Folgenden näher auseinandersetzen.

Beispiel für den Lindblad-Formalismus

Der Vorteil des Lindblad-Formalismus ist seine relative Einfachheit im Vergleich zu vollständigen Rechnungen im System-Bad-Formalismus. Um zu sehen, wie ein Lindblad-Generator irreversible Zeitentwicklung beschreibt, betrachten wir das Beispiel eines Zwei-Niveau-Systems charakterisiert durch den diagonalen Hamilton-Operator

$$H_S = \begin{pmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & -\Delta \end{pmatrix}, \quad (1.60)$$

mit dem Energieabstand $2\Delta > 0$. Als Operator V wählen wir

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ v & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.61)$$

mit $v \in \mathbb{R}$. Die Dichtematrix lässt sich nun ebenfalls in Matrixstruktur schreiben. Wir definieren

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) \end{pmatrix}. \quad (1.62)$$

Eingesetzt in die Mastergleichung (1.30), (1.34) folgen die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{11}(t) &= -v^2 \rho_{11}(t), & \dot{\rho}_{12}(t) &= -\left(\frac{v^2}{2} + 2i\Delta\right) \rho_{12}(t), \\ \dot{\rho}_{21}(t) &= -\left(\frac{v^2}{2} - 2i\Delta\right) \rho_{21}(t), & \dot{\rho}_{22}(t) &= v^2 \rho_{11}(t). \end{aligned} \quad (1.63)$$

Diese lassen sich integrieren und wir finden mit der Definition $\rho_{ij}^0 = \rho_{ij}(0)$

$$\begin{aligned} \rho_{11}(t) &= \rho_{11}^0 e^{-v^2 t}, & \rho_{12}(t) &= \rho_{12}^0 e^{-(v^2/2 + 2i\Delta)t}, \\ \rho_{21}(t) &= \rho_{21}^0 e^{-(v^2/2 - 2i\Delta)t}, & \rho_{22}(t) &= \rho_{11}^0 (1 - e^{-v^2 t}) + \rho_{22}^0. \end{aligned} \quad (1.64)$$

Die Diagonalelemente von ρ entsprechen den Besetzungszahlen der beiden Niveaus, deren Zeitentwicklung offenbar unabhängig von der Energielücke zwischen den Niveaus ist. In der Abbildung 1.2 ist die Zeitentwicklung der Besetzungszahlen für die spezielle Wahl $v = 1$ zu den Anfangswerten $\rho_{11}^0 = 1$ und $\rho_{22}^0 = 0$ gezeigt. Diese Präparation entspricht der Besetzung des energetisch höheren Zustands. Wir sehen, dass die Kopplung an das Bad zur Abnahme der Besetzung des energetisch höheren Zustands und gleichzeitigen Zunahme der Besetzung des energetisch tieferen Zustands führt.

Das Beispiel zeigt auch, dass die Dynamik irreversibel ist. In der zeitumgekehrten Entwicklung würde zum Beispiel $\rho_{11}(t)$ exponentiell wachsen, so dass ab einem gewissen Zeitpunkt t_c die Besetzungszahl $\rho_{11}(t_c) > 1$ werden würde, was den Eigenschaften von Dichteoperatoren widerspricht.

Es ist wichtig zu verstehen, dass der Lindblad-Formalismus eine phänomenologische Beschreibung dissipativer Systeme liefert. Für ein konkretes Beispiel muss geprüft werden, ob die berechneten Ergebnisse sinnvoll sind. Im aktuellen Beispiel

1. Konzepte der Quantendissipation

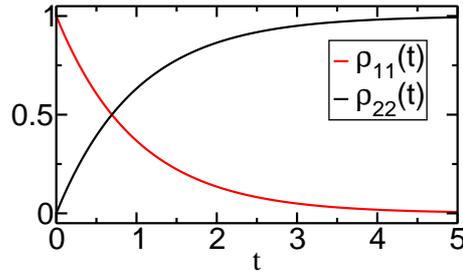


Abbildung 1.2.: Zeitentwicklung der Besetzungszahlen für $v = 1$ zu den Anfangswerten $\rho_{11}^0 = 1$ und $\rho_{22}^0 = 0$.

sehen wir das daran, dass wir auch den umgekehrten Prozess, also die asymptotische Besetzung des energetisch höheren Zustands, erzwingen können. Das erreichen wir zum Beispiel indem wir die Vorzeichen der Einträge im Hamilton-Operator vertauschen. Dann ist ρ_{11} die Besetzung des energetisch tieferen Zustands. Die Lösung $\rho_{11}(t)$ ändert sich jedoch nicht, da sie unabhängig von der Energielücke 2Δ ist. Das gleiche Verhalten erhalten wir, wenn wir statt V den Operator

$$\tilde{V} = \begin{pmatrix} 0 & v \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.65)$$

gewählt hätten. Auch dann würde sich das System asymptotisch im energetisch höheren Zustand befinden.

Wir können aus diesem einfachen Beispiel also schon wesentliche Schlussfolgerungen ziehen. Wir sehen zunächst, dass die Beschreibung eines offenen Systems über eine Mastergleichung mit Lindblad-Struktur phänomenologisch ist. Je nach Wahl der Operatoren V_j erhalten wir unterschiedliche Ergebnisse. Die Konstruktion eines physikalisch sinnvollen Lindblad-Operators ist ein wesentliches Problem dieses Zugangs (vgl. Ref. [3]).

Diese Feststellung führt uns zu einem weiteren Resultat. Es lassen sich verschiedene irreversible Prozesse, wie Übergänge oder Anregungen, durch verschiedene Operatoren V_j beschreiben. Haben wir also über ein System schon phänomenologische Informationen über solche Prozesse, so können wir diese einzelnen Operatoren V_j zuordnen. Auf diese Weise lassen sich für das betrachtete System relevante Operatoren V_j „erraten“.

Im Ergebnis haben wir eine Mastergleichung, also eine geschlossene Gleichung für den reduzierten Dichteoperator, ableiten können. Die darin enthaltenen Größen können wir über phänomenologische Informationen über das betrachtete System konstruieren. Die Lösung der Mastergleichung liefert uns den in Abbildung 1.1 gestrichelt gezeichneten Schritt von ρ_0 zu $\rho(t)$. In Kapitel 2 werden wir dieses Konzept auf das Beispiel des harmonischen Oszillators anwenden.

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

Die einfachsten Systeme, an denen man Dissipation quantitativ studieren kann, sind lineare Systeme. Von besonderer Bedeutung insbesondere in der Quantenoptik und der Festkörperphysik ist der dissipative harmonische Oszillator. Nach den Ergebnissen des vorigen Kapitels ist eine phänomenologische Beschreibung möglich, wenn wir einen entsprechenden Lindblad-Generator wählen.

2.1. Die Ableitung der Mastergleichung

In den nachstehenden Rechnungen folgen wir zunächst der Arbeit von A. Isar, A. Sandulescu, H. Scutaru, E. Stefanescu und W. Scheid [7]. Unser Ausgangspunkt ist der Lindblad-Generator (1.34). Die darin auftretenden Größen H_S , V_j und V_j^\dagger müssen spezifiziert werden.

Als Hamilton-Operator H_S wählen wir den eines harmonischen Oszillators mit zeitabhängiger Frequenz $\omega(t)$

$$H_S = H_0 + \frac{\mu}{2}(px + xp) \quad \text{mit} \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2(t)}{2}x^2. \quad (2.1)$$

Den μ -Term haben wir aufgrund des phänomenologischen Charakters der Beschreibung hinzugefügt. Bei der Ableitung der Struktur der Lindblad-Generatoren kann es tatsächlich zu Zusatztermen im Hamilton-Operator kommen. Wir können dabei einen solchen Term immer durch eine lineare Transformation von Ort und Impuls auf neue Variablen erzeugen. Bei einer solchen Transformation bleibt μ jedoch beschränkt. Insbesondere gilt $\mu^2 < \omega^2$. Wählen wir trotzdem $\mu^2 > \omega^2$ bedeutet das, dass der ursprüngliche Oszillator ein harmonisches Potential $\propto -x^2$ besitzt.

Die Operatoren V_j wählen wir linear in den Variablen x und p , damit die resultierenden Bewegungsgleichungen ebenfalls linear sind. Wir können daher zwei linear unabhängige Operatoren

$$V_j = a_j p + b_j x \quad (2.2)$$

mit $a_j, b_j \in \mathbb{C}$ und $j = 1, 2$ definieren.

Mit diesen Definitionen können wir zunächst den ersten Term der Mastergleichung (1.34) berechnen und erhalten

$$\begin{aligned} [H_S, \rho] &= [H_0, \rho] + \frac{\mu}{2}(p[x, \rho] + [p, \rho]x + x[p, \rho] + [x, \rho]p) \\ &= [H_0, \rho] + \frac{\mu}{2}([x, p\rho + \rho p] + [p, x\rho + \rho x]). \end{aligned} \quad (2.3)$$

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

Die Kommutatoren mit den Lindblad-Operatoren aus (2.2) ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^2 ([V_j \rho, V_j^\dagger] + [V_j, \rho V_j^\dagger]) &= \sum_{j=1}^2 \{ |a_j|^2 ([p\rho, p] + [p, \rho p]) + |b_j|^2 ([x\rho, x] + [x, \rho x]) \\ &\quad + a_j^* b_j ([x\rho, p] + [x, \rho p]) + a_j b_j^* ([p\rho, x] + [p, \rho x]) \}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Die verbleibenden Kommutatoren können umgeschrieben werden, denn es gelten die Gleichungen

$$\begin{aligned} [p\rho, p] + [p, \rho p] &= p[\rho, p] + [p, \rho]p = -[p, [p, \rho]], \\ [x\rho, p] + [x, \rho p] &= \frac{1}{2}([x, \rho p] - [x, p\rho] + [p, \rho x] - [p, x\rho]) \\ &\quad + \frac{1}{2}([x, \rho p] + [x, p\rho] - [p, \rho x] - [p, x\rho]), \end{aligned} \quad (2.5)$$

sowie analoge Ausdrücke mit vertauschten Variablen $x \leftrightarrow p$. Um die resultierende Mastergleichung abzukürzen, führen wir die Größen

$$\begin{aligned} \lambda &= -\sum_{j=1}^2 \text{Im}(a_j^* b_j), \quad D_{xx} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 |a_j|^2, \quad D_{pp} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 |b_j|^2, \\ D_{xp} &= D_{px} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \text{Re}(a_j^* b_j) \end{aligned} \quad (2.6)$$

ein. Diese erfüllen die Eigenschaften

$$\begin{aligned} (1) \quad D_{xx} &> 0, & (2) \quad D_{pp} &> 0, \\ (3) \quad D_{xx} D_{pp} - D_{xp}^2 &\geq \frac{\lambda^2}{4}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

(1) und (2) sind offensichtlich; (3) folgt aus der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung

$$\left| \sum_{j=1}^2 a_j^* b_j \right|^2 \leq \sum_{j=1}^2 |a_j|^2 \sum_{k=1}^2 |b_k|^2 \quad (2.8)$$

für komplexe Zahlen a_j, b_j mit $j = 1, 2$. Damit erhalten wir für die Mastergleichung

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= -i[H_0, \rho] - \frac{i}{2}(\lambda + \mu)[x, p\rho + \rho p] + \frac{i}{2}(\lambda - \mu)[p, x\rho + \rho x] \\ &\quad - D_{xx}[p, [p, \rho]] - D_{pp}[x, [x, \rho]] + D_{xp}([x, [p, \rho]] + [p, [x, \rho]]). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Wir werden sehen, dass λ einer Dämpfung entspricht und die D_{ij} , $i, j = x, p$ die Bedeutung von Diffusionskonstanten haben.

Die Mastergleichung (2.9) ist eine lineare Operatorgleichung, deren direkte Lösung schwierig ist. Wir beschränken uns daher auf die Berechnung der Zeitentwicklung von den ersten und zweiten Momenten von Ort und Impuls.

2.2. Berechnung der Erwartungswerte

Im Heisenberg-Bild hat die Mastergleichung (1.57) mit den Definitionen (2.1), (2.2) und (2.6) die Form

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} = & i[H_0, A] - \frac{i}{2}(\lambda + \mu)([A, x]p + p[A, x]) + \frac{i}{2}(\lambda - \mu)([A, p]x + x[A, p]) \\ & - D_{xx}[p, [p, A]] - D_{pp}[x, [x, A]] + D_{xp}([x, [p, A]] + [p, [x, A]]) \end{aligned} \quad (2.10)$$

Setzen wir die Operatoren x und p in die Bewegungsgleichung (2.10) ein, so verschwinden alle Terme mit doppelten Kommutatoren. Die restlichen Terme liefern dann lineare Bewegungsgleichungen. Die anschließende Bildung von Erwartungswerten führt mit der Bezeichnung $\mathbf{x}(t) = (\langle x(t) \rangle, \langle p(t) \rangle)^T$ zu den Gleichungen

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) = -\mathbf{R}(t)\mathbf{x}(t), \quad (2.11)$$

wobei die Matrix $\mathbf{R}(t)$ durch

$$\mathbf{R}(t) = \begin{pmatrix} \lambda - \mu & -\frac{1}{m} \\ m\omega^2(t) & \lambda + \mu \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

gegeben ist.

Für $\mu = \lambda$ sind die Bewegungsgleichungen die eines klassischen gedämpften harmonischen Oszillators. Wir sehen, dass wir den μ -Term im Hamilton-Operator zur Reproduktion des klassischen Falls benötigen. Der Parameter μ taucht dann zusammen mit λ an der Stelle einer Dämpfung in den Bewegungsgleichungen auf.

Wählen wir $\omega^2(t) = \omega_0^2$ unabhängig von der Zeit, so lautet die Lösung der Gleichungen (2.11)

$$\mathbf{x}(t) = e^{-\mathbf{R}t} \mathbf{x}_0. \quad (2.13)$$

Das qualitative Verhalten der Lösungen wird durch die Eigenwerte

$$\lambda \pm \sqrt{\mu^2 - \omega_0^2} \quad (2.14)$$

der Matrix \mathbf{R} bestimmt. Ist $\mu < \omega_0$, so ist die Wurzel rein imaginär und Ort und Impuls des Oszillators beschreiben eine gedämpfte Schwingung der Frequenz $\sqrt{\omega_0^2 - \mu^2}$. Diesen Bereich kann man mit dem klassischen Fall schwacher Dämpfung identifizieren.

Für $\mu > \omega_0$ werden beide Eigenwerte (2.14) reell. Das entspricht dem Umklappen des harmonischen Potentials und wir müssen die Dämpfung λ groß genug wählen ($\lambda \geq \sqrt{\mu^2 - \omega_0^2}$), um ein exponentielles Wachstum der Lösungen zu unterdrücken. Dann kann dieser Bereich mit dem klassisch überdämpften Fall identifiziert werden.

Die Wahl $\mu = \omega_0$ führt zu einem exponentiellen Abfall der Lösungen. Er entspricht daher dem klassischen aperiodischen Grenzfall.

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

Für zeitabhängiges $\omega^2(t)$ ist die Lösung von (2.11) nicht allgemein möglich. Interessant ist der Fall des parametrischen Oszillators mit

$$\omega^2(t) = \omega_0^2 + 2\epsilon \cos(\Omega t). \quad (2.15)$$

Aus der klassischen Mechanik ist bekannt, dass in Abhängigkeit von der Wahl der Parameter stabile und instabile Lösungen existieren (Abbildung 2.1). Dieses Verhalten überträgt sich in der quantenmechanischen Beschreibung offenbar auf die Erwartungswerte von Ort und Impuls.

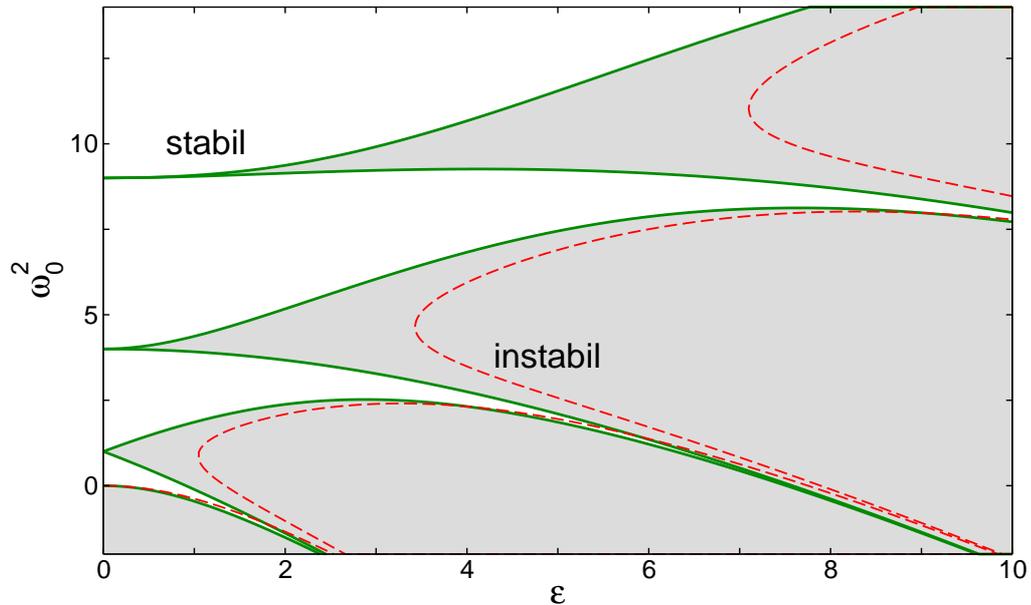


Abbildung 2.1.: Stabilitätsdiagramm eines klassischen parametrischen Oszillators der Frequenz (2.15) mit $\Omega = 2$. Weiße Gebiete entsprechen stabilen und graue instabilen Lösungen. Grün gezeichnet sind die Grenzen zwischen beiden Lösungstypen ohne Dämpfung ($\lambda = 0$), die sich bei Einschalten einer Dämpfung ($\lambda \neq 0$) zu den roten Linien verschieben.

Präparieren wir zum Beispiel den Oszillator in der Gleichgewichtslage mit $\mathbf{x}_0 = 0$, so bleibt das klassische System in diesem Punkt. Selbst in den instabilen Bereichen erfordert es eine – zwar beliebig kleine, aber nicht verschwindende – äußere Störung, damit der klassische Oszillator den Punkt $\mathbf{x}_0 = 0$ verlässt. Da die Erwartungswerte von Ort und Impuls der Gleichung (2.11) folgen, bleibt diese Aussage auch quantenmechanisch gültig. Aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation ist es jedoch nicht möglich, den quantenmechanischen Oszillator genau in diesem Punkt zu präparieren. Wie wir nun zeigen, werden deshalb die Varianzen divergieren.

Dazu berechnen wir die Bewegungsgleichungen der Varianzen σ_{xx} , σ_{pp} und σ_{xp} bezüglich des Ortes, des Impulses und des gemischten Terms mit

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2} \langle ij + ji \rangle - \langle i \rangle \langle j \rangle, \quad i, j = x, p. \quad (2.16)$$

Diese schreiben wir in eine symmetrische Matrix

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xp} \\ \sigma_{xp} & \sigma_{pp} \end{pmatrix}, \quad \text{mit} \quad \Sigma(0) = \Sigma_0. \quad (2.17)$$

Um die Bewegungsgleichung von Σ zu bestimmen, müssen wir die Operatoren x^2 , p^2 und $(xp + px)/2$ in die Gleichung (2.10) einsetzen. Die doppelten Kommutatoren liefern dann Zahlen, so dass die Diffusionskonstanten die Inhomogenität in der Bewegungsgleichung von Σ bilden werden. Eine explizite Berechnung der verbleibenden Terme zeigt, dass sich Σ gemäß

$$\frac{d}{dt}\Sigma(t) = -\mathbf{R}(t)\Sigma(t) - \Sigma(t)\mathbf{R}^T(t) + 2\mathbf{D} \quad \text{mit} \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xp} \\ D_{xp} & D_{pp} \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

in der Zeit entwickelt.

In den homogenen Bewegungsgleichungen tritt nur die Matrix $\mathbf{R}(t)$ auf, die wir schon aus (2.11) kennen. Es folgt, dass die Lösung der homogenen Gleichungen durch denselben Zeitentwicklungsoperator gegeben ist, der auch die linearen Erwartungswerte von Ort und Impuls propagiert. Nehmen wir an, dass wir die Lösung der Gleichung (2.11) in der Form

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{U}(t, 0)\mathbf{x}_0 \quad \text{mit} \quad \frac{d}{dt}\mathbf{U}(t, t') = -\mathbf{R}(t)\mathbf{U}(t, t') \quad \text{und} \quad \mathbf{U}(t, t) = \mathbb{1} \quad (2.19)$$

gegeben haben (zum Beispiel aus der Kenntnis der klassischen Lösung), so gilt für die allgemeine Lösung von (2.18)

$$\Sigma(t) = \mathbf{U}(t, 0)\Sigma_0\mathbf{U}^T(t, 0) + 2 \int_0^t \mathbf{U}(t, t')\mathbf{D}\mathbf{U}^T(t, t') dt'. \quad (2.20)$$

Bemerkenswert ist, dass die Rekonstruktion der Lösung der Bewegungsgleichung für die Varianzen aus der Lösung für die Erwartungswerte von Ort und Impuls in der Form (2.20) gelingt. Für das reine Heisenberg-Bild ist diese Analogie sofort ersichtlich. Sie folgt insbesondere aus der Gültigkeit der Produktregel (1.59). Wir hatten jedoch bereits gesehen, dass (1.59) im Lindblad-Formalismus im Allgemeinen nicht gilt, da aus den zusätzlichen Termen im Generator auch Zusatzterme in der Produktregel resultieren. Die explizite Berechnung dieser Terme für das Beispiel des gedämpften harmonischen Oszillators liefert

$$\begin{aligned} \frac{d(AB)}{dt} &= \frac{dA}{dt}B + A\frac{dB}{dt} \\ &- i\lambda([x, A][p, B] - [p, A][x, B]) - 2D_{pp}[x, A][x, B] \\ &- 2D_{xx}[p, A][p, B] + 2D_{xp}([x, A][p, B] + [p, A][x, B]). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Einsetzen der Operatoren x^2 , p^2 bzw. $(xp + px)/2$ zeigt, dass die Zusatzterme lediglich die Inhomogenität $2\mathbf{D}$ in der Bewegungsgleichung (2.18) erzeugen. Die homogene

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

Gleichung wird daher ausschließlich durch die im Heisenberg-Bild gültige Produktregel (1.59) bestimmt. Da die Inhomogenität in der Bewegungsgleichung (2.18) zusätzlich zeitunabhängig ist, ist die Zeitentwicklung der Varianzen vollständig durch die von $\mathbf{x}(t)$ festgelegt.

Für klassisch instabile Parameterbereiche sind somit auch die Varianzen instabil und divergieren für $t \rightarrow \infty$. Ist die klassische Lösung stabil, also gilt $\mathbf{U}(t, 0) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$, so verschwindet im Grenzfall auch der homogene Anteil von (2.20) und das Integral über die Inhomogenität liefert einen Beitrag, der für $\omega(t) = \omega_0 = \text{konst.}$ zeitunabhängig und nur durch die Diffusionskonstanten bestimmt ist.

Damit lässt sich das quantenmechanische Verhalten eines mit verschwindenden Erwartungswerten von Ort und Impuls präparierten Oszillators klassifizieren. Die Erwartungswerte von Ort und Impuls bleiben bei dieser Anfangspräparation für alle Zeiten Null. Im ungedämpften Fall werden die Varianzen des quantenmechanischen Oszillators divergieren, da die Gleichgewichtslage $\mathbf{x}_0 = 0$ klassisch instabil ist. Ist der Oszillator gedämpft, so werden die Varianzen stationäre Werte erreichen, die nur von den Diffusionskonstanten abhängen. Dieses Verhalten ist in der Abbildung 2.2 veranschaulicht.

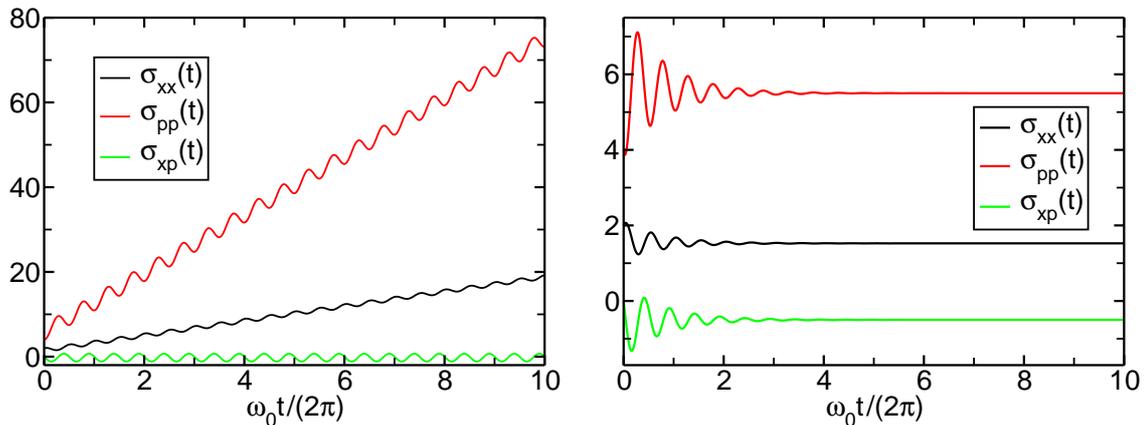


Abbildung 2.2.: Zeitentwicklung der Varianzen für den ungedämpften ($\lambda = \mu = 0$; links), sowie gedämpften ($\lambda = \mu = 0,2$; rechts) harmonischen Oszillator mit $\omega^2(t) = \omega_0^2 = 4$.

2.3. Gauß-Zustände und ihre Eigenschaften

Wir haben bisher die Bewegungsgleichungen für die Erwartungswerte von Ort und Impuls und die Varianzen gelöst. Der logische nächste Schritt ist es, die allgemeine propagierende Funktion für dieses System zu berechnen. Für den harmonischen Oszillator, der ein lineares Problem verkörpert, bleiben Gauß-Zustände in der Zeitentwicklung Gauß-förmig. Das bedeutet insbesondere, dass auch die propagierende Funktion Gauß-förmig sein muss. Zur Konstruktion der propagierenden Funk-

tion müssen wir uns daher zunächst die Definition und Eigenschaften von Gauß-Zuständen [16–18] ansehen.

2.3.1. Definition reiner Gauß-Zustände

Ein reiner Gauß-Zustand wird definiert als Grundzustand eines bilinearen Hamilton-Operators

$$H = ax^2 + bp^2 + c(xp + px) + dx + ep, \quad (2.22)$$

mit $a, \dots, e \in \mathbb{R}$. Die Positivitätsbedingung fordert

$$a > 0 \quad \text{und} \quad ab - c^2 > 0 \quad \Rightarrow \quad b > 0. \quad (2.23)$$

In Ortsdarstellung muss ein Gauß-Zustand die Form

$$\psi(x) = \langle x|\psi \rangle = \frac{1}{N} e^{-\alpha x^2 + \beta x + \gamma}, \quad (2.24)$$

mit der Normierung N und $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{C}$, sowie $\text{Re } \alpha > 0$ haben. Integrationen über solche Gauß-Funktionen mit komplexen Parametern können mit den im Anhang A abgeleiteten Formeln ausgeführt werden.

Die Normierung des Zustands ergibt

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi|x \rangle \langle x|\psi \rangle dx = \frac{1}{N^2} \sqrt{\frac{\pi}{2 \text{Re } \alpha}} \exp \left[\frac{\text{Re}^2 \beta}{2 \text{Re } \alpha} + 2 \text{Re } \gamma \right], \quad (2.25)$$

so dass der normierte Zustand durch

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{2 \text{Re } \alpha}{\pi}} \exp \left[-\alpha x^2 + \beta x - \frac{\text{Re}^2 \beta}{4 \text{Re } \alpha} + i \text{Im } \gamma \right] \quad (2.26)$$

gegeben ist.

Die Erwartungswerte von Ort und Impuls in einem solchen Gauß-Zustand ergeben sich zu

$$\langle x \rangle = \frac{\text{Re } \beta}{2 \text{Re } \alpha}, \quad \langle p \rangle = \text{Im } \beta - \frac{\text{Re } \beta \text{Im } \alpha}{\text{Re } \alpha}, \quad (2.27)$$

und die Varianzen zu

$$\sigma_{xx} = \frac{1}{4 \text{Re } \alpha}, \quad \sigma_{pp} = \frac{|\alpha|^2}{\text{Re } \alpha}, \quad \sigma_{xp} = -\frac{\text{Im } \alpha}{2 \text{Re } \alpha}. \quad (2.28)$$

Damit lässt sich die Heisenbergsche Unschärferelation schreiben als

$$\sqrt{\sigma_{xx} \sigma_{pp}} = \sqrt{\frac{1}{4} \left(1 + \frac{\text{Im}^2 \alpha}{\text{Re}^2 \alpha} \right)} \geq \frac{1}{2}. \quad (2.29)$$

Gleichheit in der Heisenbergschen Unschärferelation gilt für $\text{Im } \alpha = 0$.

Der Zustand (2.26) hat – bis auf eine Phase – vier freie und unabhängige Parameter. Der Hamilton-Operator (2.22) beinhaltet jedoch fünf freie Parameter. Wir

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

müssen uns also fragen, wie sich die fünf Parameter des Hamilton-Operators in die vier des allgemeinen Gauß-Zustands in Ortsdarstellung übersetzen. Dazu berechnen wir die Wirkung des Hamilton-Operators (2.22) auf den Gauß-Zustand (2.26):

$$H\psi(x) = [ax^2 - b\{(\beta - 2\alpha x)^2 - 2\alpha\} - ic\{2x(\beta - 2\alpha x) + 1\} + dx - ie(\beta - 2\alpha x)]\psi(x). \quad (2.30)$$

Für den Grundzustand des Hamilton-Operators muss der Ausdruck in der eckigen Klammer die von x unabhängige Energie ergeben, so dass die Koeffizienten vor x^2 - und x -Termen verschwinden müssen. Die explizite Rechnung liefert

$$\operatorname{Im} \alpha = \frac{c}{2b}, \quad \operatorname{Re} \alpha = \frac{1}{2b}\sqrt{ab - c^2} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{a}{b} - \frac{c^2}{b^2}} > 0, \quad (2.31)$$

sowie

$$\operatorname{Im} \beta = -\frac{e}{2b}, \quad \operatorname{Re} \beta = \frac{1}{4\operatorname{Re} \alpha} \left(-\frac{d}{b} + 2\frac{e}{b}\operatorname{Im} \alpha \right). \quad (2.32)$$

Die Energie des Zustands ergibt sich dann zu

$$E = \sqrt{ab - c^2} - \frac{d^2}{4a} - \frac{(ea - cd)^2}{4a(ab - c^2)} \in \mathbb{R}. \quad (2.33)$$

Im Gauß-förmigen Grundzustand des Hamilton-Operators (2.22) tauchen also nur die vier Parameter a/b , c/b , d/b und e/b auf.

2.3.2. Definition gemischter Gauß-Zustände

Ein gemischter Gauß-Zustand wird als Matrixelement einer kanonischen Dichtematrix $e^{-\beta H}/Z$ mit dem bilinearen Hamilton-Operator (2.22) über Orts-Eigenzustände definiert

$$\rho(x, x') = \langle x | \rho | x' \rangle = \langle x | \frac{1}{Z} e^{-\beta H} | x' \rangle. \quad (2.34)$$

Dabei bezeichnen wir mit $Z = \operatorname{Tr} e^{-\beta H}$ die Zustandssumme und mit $\beta = 1/T$ die inverse Temperatur.

Für den Hamilton-Operator H_0 eines einfachen harmonischen Oszillators

$$H_0 = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \frac{p^2}{2m} \quad (2.35)$$

ergibt sich mit der charakteristischen Länge $l = 1/\sqrt{2m\omega}$ die Zustandssumme

$$Z_0 = \operatorname{Tr} e^{-\beta H_0} = \frac{e^{-\beta\omega/2}}{1 - e^{-\beta\omega}} = \frac{e^{\beta\omega/2}}{e^{\beta\omega} - 1}. \quad (2.36)$$

Die Gauß-förmige Dichtematrix in Ortsdarstellung lautet (siehe Anhang B)

$$\rho(x, x') = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{e^{\beta\omega} - 1}{e^{\beta\omega} + 1}} \exp \left[-\frac{x^2(e^{2\beta\omega} + 1) - 4xx'e^{\beta\omega} + x'^2(e^{2\beta\omega} + 1)}{4l^2(e^{\beta\omega} + 1)(e^{\beta\omega} - 1)} \right]. \quad (2.37)$$

Offenbar ist der Gauß-Zustand für den harmonischen Oszillator durch die zwei reellen Größen

$$k_1 = -\frac{e^{2\beta\omega} + 1}{4l^2(e^{\beta\omega} + 1)(e^{\beta\omega} - 1)} \quad \text{und} \quad k_2 = \frac{4e^{\beta\omega}}{4l^2(e^{\beta\omega} + 1)(e^{\beta\omega} - 1)} \quad (2.38)$$

vollständig bestimmt. Auf der anderen Seite können wir die zwei Parameter m und ω im Hamilton-Operator und zusätzlich die Temperatur T der kanonischen Dichtematrix frei wählen. Die Zahl der Parameter wird um einen reduziert. Die resultierenden Parameter können neben k_1 und k_2 zum Beispiel auch die Größen $m\omega$ und mT sein.

Für allgemeinere bilineare Hamilton-Operatoren kann die Gauß-förmige Dichtematrix leider nicht einfach berechnet werden (siehe Anhang B). Statt also das Matrixelement (2.34) explizit zu berechnen, werden wir hier aus allgemeinen Überlegungen die grundlegende Form eines gemischten Gauß-Zustands in Ortsdarstellung konstruieren.

Grundsätzlich muss jede dieser Funktionen die Gestalt

$$\rho(x, x') = \frac{1}{N} e^{-\alpha x^2 - \delta x'^2 - \beta x x' + \gamma x + \epsilon x'} \quad (2.39)$$

mit $\alpha, \beta, \dots, \epsilon \in \mathbb{C}$ und der Normierungskonstanten N haben. Definieren wir einen Vektor $\mathbf{q} = (x, x')^T$, so können wir statt (2.39) auch

$$\rho(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \exp \left[-\mathbf{q} \cdot \mathbf{A} \mathbf{q} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{q} \right] \quad (2.40)$$

mit der symmetrischen Matrix \mathbf{A} schreiben. Die Korrespondenz von (2.39) und (2.40) wird durch

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta/2 \\ \beta/2 & \delta \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \gamma \\ \epsilon \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

hergestellt. Aus der Definition (2.34) der Gauß-förmigen Dichtematrix folgt, dass das Vertauschen der Argumente eine komplexe Konjugation nach sich zieht, also dass gilt

$$\rho(x, x') = \langle x | \rho | x' \rangle = \langle x' | \rho | x \rangle^* = \rho^*(x, x'). \quad (2.42)$$

Explizit ergeben sich daraus die Bedingungen

$$N = N^*, \quad \delta = \alpha^*, \quad \beta = \beta^* \quad \text{und} \quad \epsilon = \gamma^*, \quad (2.43)$$

so dass eine allgemeine Gauß-förmige Dichtematrix in Ortsdarstellung die Form

$$\rho(x, x') = \frac{1}{N} \exp \left[-\alpha x^2 - \alpha^* x'^2 - \beta x x' + \gamma x + \gamma^* x' \right] \quad (2.44)$$

hat, wobei $\alpha, \gamma \in \mathbb{C}$ und $\beta \in \mathbb{R}$.

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

Zusätzlich muss die Funktion $\rho(x, x')$ für $x' = x$ normierbar sein

$$1 = \int \rho(x, x) dx = \frac{1}{N} \int \exp \left[- (2 \operatorname{Re} \alpha + \beta) \left(x - \frac{\operatorname{Re} \gamma}{2 \operatorname{Re} \alpha + \beta} \right)^2 + \frac{\operatorname{Re}^2 \gamma}{2 \operatorname{Re} \alpha + \beta} \right], \quad (2.45)$$

so dass $2 \operatorname{Re} \alpha + \beta > 0$ vorausgesetzt werden muss. Dann ergibt sich die Normierungskonstante zu

$$N = \sqrt{\frac{\pi}{2 \operatorname{Re} \alpha + \beta}} \exp \left[\frac{\operatorname{Re}^2 \gamma}{2 \operatorname{Re} \alpha + \beta} \right]. \quad (2.46)$$

Anhand von (2.44) sehen wir, dass ein allgemeiner gemischter Gauß-Zustand fünf freie Parameter aufweist. Diese lassen sich eindeutig durch die fünf ersten und zweiten Momente des Gauß-Zustands ausdrücken.

2.3.3. Rekonstruktion von Gauß-Zuständen aus Erwartungswerten

Die Erwartungswerte von Ort und Impuls berechnen sich zu

$$\langle x \rangle = \frac{\operatorname{Re} \gamma}{2 \operatorname{Re} \alpha + \beta} \quad \text{und} \quad \langle p \rangle = \operatorname{Im} \gamma - \frac{2 \operatorname{Im} \alpha \operatorname{Re} \gamma}{2 \operatorname{Re} \alpha + \beta}. \quad (2.47)$$

Die Varianzen

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xp} \\ \sigma_{xp} & \sigma_{pp} \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

sind durch

$$\sigma_{xx} = \frac{1}{2(2 \operatorname{Re} \alpha + \beta)}, \quad \sigma_{pp} = \frac{4|\alpha|^2 - \beta^2}{2(2 \operatorname{Re} \alpha + \beta)}, \quad \sigma_{xp} = -\frac{\operatorname{Im} \alpha}{2 \operatorname{Re} \alpha + \beta} \quad (2.49)$$

gegeben. Wir können nun die fünf Parameter des Zustands durch die Größen \mathbf{x} und Σ ausdrücken:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \alpha &= \frac{1 + 4 \det(\Sigma)}{8 \sigma_{xx}}, & \operatorname{Im} \alpha &= -\frac{\sigma_{xp}}{2 \sigma_{xx}}, & \beta &= \frac{1 - 4 \det(\Sigma)}{4 \sigma_{xx}}, \\ \operatorname{Re} \gamma &= \frac{\langle x \rangle}{2 \sigma_{xx}}, & \operatorname{Im} \gamma &= \langle p \rangle - \langle x \rangle \frac{\sigma_{xp}}{\sigma_{xx}}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Dieses Ergebnis zeigt, dass aus der Berechnung von zeitabhängigen Erwartungswerten für ein beliebiges System auch auf die Zeitentwicklung von allgemeinen Gauß-Zuständen geschlossen werden kann. Da sich beliebige Zustände als Überlagerung von Gauß-Zuständen schreiben lassen, verkörpert das Lösen von Differentialgleichungen für Erwartungswerte ein allgemeines Konzept zur Berechnung der Dynamik eines linearen Systems.

2.4. Konstruktion der propagierenden Funktion

Allgemeiner als die Berechnung der Dynamik von Gauß-Zuständen ist die Konstruktion der propagierenden Funktion. Wir zeigen, dass diese für den dissipativen harmonischen Oszillator ebenfalls aus Erwartungswerten gewonnen werden kann.

Das schematische Bild hinter diesem Konzept ist in Abbildung 2.3 gezeigt. Wir machen uns die Eigenschaft des harmonischen Oszillators als lineares System zunutze, dass Gauß-Zustände unter der Zeitentwicklung Gauß-förmig bleiben. Mit der definierenden Gleichung (1.28) folgt daraus, dass die propagierende Funktion ebenfalls Gauß-förmig sein muss.

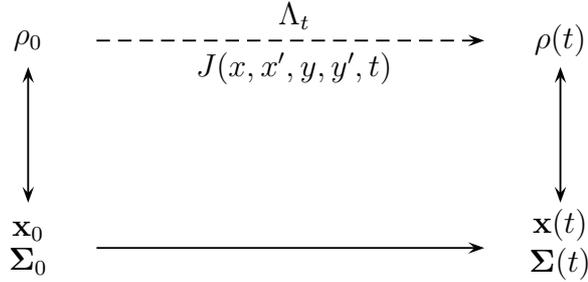


Abbildung 2.3.: Illustration des Konzepts bei der Konstruktion der propagierenden Funktion aus den Erwartungswerten von Ort und Impuls, sowie deren Varianzen.

Als Ansatz für die propagierende Funktion wählen wir daher eine allgemeine Gauß-Funktion, die wir mit den Definitionen $\mathbf{q} = (x, x')^T$, $\mathbf{y} = (y, y')^T$ und $\tilde{\mathbf{q}} = (\mathbf{q}, \mathbf{y})^T = (x, x', y, y')^T$ in der Form

$$J(\tilde{\mathbf{q}}, t) = \frac{1}{N} \exp [\tilde{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{V} \tilde{\mathbf{q}} + \mathbf{w} \cdot \tilde{\mathbf{q}}] \quad (2.51)$$

schreiben. Dabei sind die Normierung $N \in \mathbb{C}$, der Vektor $\mathbf{w} \in \mathbb{C}^4$ und die symmetrische Matrix $\mathbf{V} \in \mathbb{C}^{4,4}$ zeitabhängig.

Wir definieren Matrizen $\mathbf{V}_{ij} \in \mathbb{C}^{2,2}$ und Vektoren $\mathbf{w}_i \in \mathbb{C}^2$ mit $i, j = q, y$ durch

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathbf{V}_{qq} & \mathbf{V}_{qy} \\ \mathbf{V}_{yq} & \mathbf{V}_{yy} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}_q \\ \mathbf{w}_y \end{pmatrix}. \quad (2.52)$$

Für diese folgen die Eigenschaften $\mathbf{V}_{ij} = \mathbf{V}_{ji}^T$. Die propagierende Funktion (2.51) lässt sich dann schreiben als

$$J(\mathbf{q}, \mathbf{y}, t) = \frac{1}{N} e^{\mathbf{q} \cdot \mathbf{V}_{qq} \mathbf{q} + \mathbf{q} \cdot \mathbf{V}_{qy} \mathbf{y} + \mathbf{y} \cdot \mathbf{V}_{yq} \mathbf{q} + \mathbf{y} \cdot \mathbf{V}_{yy} \mathbf{y} + \mathbf{w}_q \cdot \mathbf{q} + \mathbf{w}_y \cdot \mathbf{y}}. \quad (2.53)$$

Die Dichtematrix $\rho(x, x', t)$ erfüllt die Eigenschaft (2.42). Angewandt auf die definierende Gleichung (1.28) der propagierenden Funktion ergibt sich

$$\begin{aligned} \rho^*(x', x, t) &= \iint J^*(x', x, y, y', t) \rho_0(y', y) dy dy' \\ &= \iint J^*(x', x, y', y, t) \rho_0(y, y') dy dy'. \end{aligned} \quad (2.54)$$

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

Dabei haben wir die Integrationsvariablen y und y' vertauscht. Wir lesen die grundlegende Symmetrieeigenschaft der propagierenden Funktion ab:

$$J(x, x', y, y', t) = J^*(x', x, y', y, t). \quad (2.55)$$

Benutzen wir diese für den Ansatz (2.51) bzw. (2.53) der Gauß-förmigen propagierenden Funktion, so folgt zunächst, dass die Normierungskonstante N reell sein muss. Durch Vergleich der Exponenten ergibt sich weiterhin

$$\begin{aligned} (1) \quad & \text{mit } \mathbf{V}_{qq} = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix} \text{ folgt } a = c^* \text{ und } b = b^*, \\ (2) \quad & \text{mit } \mathbf{V}_{yy} = \begin{pmatrix} d & e \\ e & f \end{pmatrix} \text{ folgt } d = f^* \text{ und } e = e^*, \\ (3) \quad & \text{mit } \mathbf{V}_{qy} = \begin{pmatrix} g & h \\ i & j \end{pmatrix} \text{ folgt } g = j^* \text{ und } h = i^*, \\ (4) \quad & \text{mit } \mathbf{w}_q = \begin{pmatrix} k \\ l \end{pmatrix} \text{ folgt } k = l^*, \\ (5) \quad & \text{mit } \mathbf{w}_y = \begin{pmatrix} m \\ n \end{pmatrix} \text{ folgt } m = n^*. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Diese Eigenschaften reduzieren die Anzahl der freien Parameter in der propagierenden Funktion (2.51). Eine weitere Reduktion kann durch die Normierungsbedingung

$$1 = \int \rho(x, x, t) dx = \iiint J(x, x, y, y', t) \rho_0(y, y') dy dy' dx, \quad (2.57)$$

aber auch durch andere Systemeigenschaften erreicht werden. Wir haben es beim harmonischen Oszillator zum Beispiel mit einem linearen System zu tun. Die zeitabhängigen Erwartungswerte $\mathbf{x}(t)$ und die Varianzen $\mathbf{\Sigma}(t)$ müssen sich daher durch deren Anfangswerte ausdrücken lassen. Es gilt

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{K}(t)\mathbf{x}_0 + \mathbf{k}(t), \quad (2.58)$$

$$\mathbf{\Sigma}(t) = \mathbf{K}(t)\mathbf{\Sigma}_0\mathbf{K}^T(t) + \mathbf{C}(t), \quad (2.59)$$

mit reellen, zeitabhängigen Koeffizienten $\mathbf{K}(t)$, $\mathbf{C}(t) = \mathbf{C}^T(t)$ und $\mathbf{k}(t)$.

Die Struktur (2.58) bzw. (2.59) der Erwartungswerte haben wir schon bei der Behandlung des harmonischen Oszillators im Lindblad-Formalismus kennengelernt. Wir haben hier jedoch im Hinblick auf die Rechnungen zum System-Bad-Formalismus in Kapitel 3 die Gleichungen für die Erwartungswerte von Ort und Impuls um Inhomogenitäten erweitert, die in der Lindblad-Beschreibung nicht vorhanden waren.

Offenbar definieren die Gleichungen (2.58) und (2.59) neun Parameter, die als Koeffizienten in die Größen $\mathbf{K}(t)$, $\mathbf{C}(t)$ und $\mathbf{k}(t)$ geschrieben wurden. Ohne die Rech-

nungen hier explizit vorzuführen, erfüllt die propagierende Funktion

$$\begin{aligned}
 J(x, x', y, y', t) = \frac{a_7 - a_6}{2\pi} \exp[& (a_1 + ia_4)x^2 + (a_1 - ia_4)x'^2 - 2a_1xx' \\
 & + (a_2 + ia_5)y^2 + (a_2 - ia_5)y'^2 - 2a_2yy' \\
 & + (a_3 + ia_6)xy + (-a_3 + ia_7)xy' \\
 & + (-a_3 - ia_7)x'y + (a_3 - ia_6)x'y' \\
 & + ia_8(x - x') + ia_9(y - y')] ,
 \end{aligned} \tag{2.60}$$

mit den neun reellen, zeitabhängigen Größen a_1, \dots, a_9 alle geforderten Eigenschaften (2.56) bis (2.59). Explizit finden wir den Zusammenhang

$$\begin{aligned}
 a_1 &= C_{12} \frac{K_{22}}{K_{12}} - C_{11} \frac{K_{22}^2}{2K_{12}^2} - \frac{C_{22}}{2}, & a_2 &= -\frac{C_{11}}{2K_{12}^2}, & a_3 &= \frac{C_{11}K_{22} - C_{12}K_{12}}{K_{12}^2}, \\
 a_4 &= \frac{K_{22}}{2K_{12}}, & a_5 &= \frac{K_{11}}{2K_{12}}, & a_6 &= -\frac{1 + \det(\mathbf{K})}{2K_{12}}, \\
 a_7 &= \frac{1 - \det(\mathbf{K})}{2K_{12}}, & a_8 &= k_2 - k_1 \frac{K_{22}}{K_{12}}, & a_9 &= \frac{k_1}{K_{12}}.
 \end{aligned} \tag{2.61}$$

Im Ergebnis haben wir die allgemeine propagierende Funktion für ein lineares System bestimmt. Die Parameter $a_1(t), \dots, a_9(t)$ sind über die Gleichungen (2.58) bzw. (2.59) und (2.61) durch die Erwartungswerte von Ort und Impuls und die Varianzen des betrachteten Systems bestimmt.

Für den harmonischen Oszillator im Lindblad-Formalismus finden wir durch Vergleich mit den Gleichungen (2.19) und (2.20)

$$\mathbf{K}(t) = \mathbf{U}(t, 0), \quad \mathbf{k}(t) = 0, \quad \mathbf{C}(t) = 2 \int_0^t \mathbf{U}(t, t') \mathbf{D} \mathbf{U}^T(t, t') dt'. \tag{2.62}$$

Diese Gleichungen können mit Hilfe der Übersetzungsvorschrift (2.61) in die Koeffizienten $a_1(t), \dots, a_7(t)$ und $a_8(t) = a_9(t) = 0$ der propagierenden Funktion (2.60) umgerechnet werden. Das liefert die allgemeine propagierende Funktion und damit die vollständige Lösung für den dissipativen Oszillator im Lindblad-Formalismus.

2.5. Der getriebene Oszillator in Husimi-Darstellung

Die graphische Darstellung der propagierenden Funktion $J(x, x', y, y', t)$ in Abhängigkeit von vier Variablen ist schwierig. Um wenigstens einen Teil der Ergebnisse visualisieren zu können, machen wir einen kleinen Exkurs über die Husimi-Funktion $Q(\alpha)$ [19, 20], welche eine geeignete Darstellung allgemeiner Zustände durch kohärente Zustände ermöglicht. Dieses Beispiel ist auch für sich genommen interessant, weil es eine Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Husimi-Funktion liefert.

Die Husimi-Funktion wird als Diagonalelement einer Dichtematrix über kohärente Zustände $|\alpha\rangle$ mit $\alpha \in \mathbb{C}$ definiert:

$$Q(\alpha) = \frac{1}{\pi} \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle. \tag{2.63}$$

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators sind Eigenzustände des Vernichtungsoperators a , mit $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$. Zu Eigenschaften kohärenter Zustände siehe zum Beispiel [18, 21].

Den Zusammenhang zwischen Husimi-Funktion und propagierender Funktion finden wir durch Einsetzen der Spektralzerlegung $\rho(t) = \iint \rho(x, y, t) |x\rangle \langle y| dx dy$ des Dichteoperators

$$\begin{aligned} Q(\alpha, t) &= \frac{1}{\pi} \iint \langle \alpha|x\rangle \rho(x, y, t) \langle y|\alpha\rangle dx dy \\ &= \frac{1}{\pi} \iiint \langle \alpha|x\rangle J(x, x', y, y', t) \rho_0(x', y') \langle y|\alpha\rangle dx dy dx' dy'. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Da in Ortsdarstellung der kohärente Zustand des harmonischen Oszillators eine Gauß-Funktion ist, ergibt sich die Husimi-Funktion aus der Faltung der propagierenden Funktion mit Gauß-Funktionen und der Dichtematrix ρ_0 .

Setzen wir $t \equiv 0$, so ist $J(x, x', y, y', 0) \equiv \delta(x - x') \delta(y - y')$ und die Husimi-Funktion ist die Faltung von $\rho_0(x, y)$ mit zwei Gauß-Funktionen. Um also von der Husimi-Funktion zur Zeit $t = 0$ auf die Dichtematrix $\rho_0(x, y)$ zu schließen, müssten wir die Faltung mit Gauß-Funktionen umkehren, was im Allgemeinen nicht einfach ist. Deshalb wird häufig die Wigner-Funktion [20, 22] benutzt. Wir verwenden hier trotzdem die Husimi-Funktion, weil die resultierende Struktur der Bewegungsgleichung interessant ist und wir Gleichungen der Form (2.58) bzw. (2.59) für die ersten und zweiten Momente wiederfinden.

Bevor wir die Bewegungsgleichung für die Husimi-Funktion ableiten, werden wir einige wesentliche Eigenschaften von Q zusammenstellen.

Aus der Hermitezität und der Positivität von Dichteoperatoren ρ folgt

$$Q(\alpha) \in \mathbb{R} \quad \text{und} \quad Q(\alpha) \geq 0. \quad (2.65)$$

Bei der Berechnung von Erwartungswerten eines beliebigen Operators A gilt die Spurformel

$$\text{Tr}(A) = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \langle \alpha| A |\alpha\rangle d^2\alpha. \quad (2.66)$$

Angewandt auf den Dichteoperator ρ mit $\text{Tr}\rho = 1$ folgt, dass die Husimi-Funktion in der komplexen Ebene normiert ist:

$$\int_{\mathbb{C}} Q(\alpha) d^2\alpha = 1. \quad (2.67)$$

Für den Orts- und Impulsoperator ergibt sich mit der Umschreibung auf Leiteroperatoren (B.18)

$$\langle x \rangle = l \langle \hat{a} + \hat{a}^\dagger \rangle = l \int (\alpha + \alpha^*) Q(\alpha) d^2\alpha = 2l \langle \text{Re } \alpha \rangle, \quad (2.68)$$

$$\langle p \rangle = \frac{i}{2l} \langle \hat{a}^\dagger - \hat{a} \rangle = \frac{i}{2l} \int (\alpha^* - \alpha) Q(\alpha) d^2\alpha = \frac{1}{l} \langle \text{Im } \alpha \rangle, \quad (2.69)$$

wenn wir mit den Symbolen $\langle \dots \rangle$ für skalare Funktionen eine Integration über $Q(\alpha)$ abkürzen. Für die zweiten Momente folgt

$$\langle x^2 \rangle = l^2 \langle \hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + 2\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1 \rangle = 4l^2 \left(\langle \text{Re}^2 \alpha \rangle - \frac{1}{4} \right), \quad (2.70)$$

$$\langle p^2 \rangle = -\frac{1}{4l^2} \langle \hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 - 2\hat{a}\hat{a}^\dagger + 1 \rangle = \frac{1}{l^2} \left(\langle \text{Im}^2 \alpha \rangle - \frac{1}{4} \right), \quad (2.71)$$

$$\langle \{x, p\} \rangle = i \langle (\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}^2 \rangle = 4 \langle \text{Re} \alpha \text{Im} \alpha \rangle. \quad (2.72)$$

Damit lässt sich ein Zusammenhang mit dem klassischen Phasenraum herstellen. Wegen der Eigenschaft (2.67) kann die Husimi-Funktion als Wahrscheinlichkeitsverteilung in der komplexen Ebene aufgefasst werden. Die komplexe Ebene kann mittels der Gleichungen $x = 2l \text{Re}(\alpha)$, $p = \text{Im}(\alpha)/l$ mit dem klassischen Phasenraum identifiziert werden. Die Husimi-Funktion liefert also nach der Vorschrift (2.64) eine Darstellung der propagierenden Funktion im klassischen Phasenraum.

2.5.1. Die Bewegungsgleichung der Husimi-Funktion

Ausgangspunkt ist der Hamilton-Operator eines mit $F(t)$ getriebenen Oszillators der Masse $m = 1$ und der zeitabhängigen Frequenz $\omega(t)$

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{\omega^2(t)}{2} x^2 - F(t)x. \quad (2.73)$$

Wir ersetzen den Ort und den Impuls durch Leiteroperatoren (B.18) und setzen die charakteristische Länge $l = 1/\sqrt{2\omega_0}$. Die Frequenz ω_0 ist den kohärenten Zuständen in (2.63) und damit der Basis zugeordnet. Wir erhalten

$$H = -\frac{\omega_0}{4} (a^\dagger - a)^2 + \frac{\omega^2(t)}{4\omega_0} (a^\dagger + a)^2 - F(t)l(a^\dagger + a). \quad (2.74)$$

Ausgehend von der von-Neumann-Gleichung für die Zeitentwicklung von Dichtematrizen (1.8) gilt für die Husimi-Funktion

$$i\dot{Q}(\alpha, t) = \frac{1}{\pi} \langle \alpha | [H(t), \rho(t)] | \alpha \rangle. \quad (2.75)$$

Um eine geschlossene Bewegungsgleichung für die Husimi-Funktion zu finden, müssen wir die Dichtematrix zugunsten der Q -Funktion des Systems eliminieren. Dazu sind Terme $\langle \alpha | [(a^\dagger \pm a)^n, A] | \alpha \rangle$ mit einem beliebigen Operator A auszuwerten. Die Rechnungen hierzu sind im Anhang C durchgeführt. Mit der Abkürzung $\alpha = u + iv$ lautet die resultierende Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} Q(\alpha, t) = \left\{ \frac{\omega^2(t)}{\omega_0} u \frac{\partial}{\partial v} - \omega_0 v \frac{\partial}{\partial u} + \frac{1}{4} \left(\frac{\omega^2(t)}{\omega_0} - \omega_0 \right) \frac{\partial^2}{\partial u \partial v} - F(t)l \frac{\partial}{\partial v} \right\} Q(\alpha, t). \quad (2.76)$$

Diese lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung beschreibt, wie sich beliebige Zustände – ausgedrückt durch die Husimi-Funktion – in der Zeit entwickeln, wenn der zugrundeliegende Hamilton-Operator der des quantenmechanischen Oszillators mit zeitabhängiger Frequenz $\omega(t)$ und äußerer Kraft (2.74) ist.

Spezialfälle

Die Lösung der Bewegungsgleichung (2.76) ist im Allgemeinen sehr schwierig. Wir werden daher zunächst einige Spezialfälle untersuchen.

Bei der Ableitung der Bewegungsgleichung (2.76) haben wir den allgemeinen Fall unterschiedlicher Frequenzen für die Schwingungen des Oszillators $\omega(t)$ und der kohärenten Zustände ω_0 der Basis angenommen. Wählen wir $\omega(t) \equiv \omega_0$, so lautet die Bewegungsgleichung (2.76)

$$\frac{d}{dt}Q(\alpha, t) = \left(\omega_0 u \frac{\partial}{\partial v} - \omega_0 v \frac{\partial}{\partial u} - F(t) l \frac{\partial}{\partial v} \right) Q(\alpha, t). \quad (2.77)$$

Dies ist eine lineare partielle Differentialgleichung erster Ordnung. Die Lösung $Q(\alpha, t)$ können wir konstruieren indem wir das komplexe Argument α entlang der durch $\alpha(t)$ beschriebenen Trajektorie rückwärts in der Zeit laufen lassen:

$$\begin{aligned} Q(\alpha, t) &= \frac{1}{\pi} \langle \alpha | \rho(t) | \alpha \rangle = \frac{1}{\pi} \langle \alpha | U(t) \rho(0) U^\dagger(t) | \alpha \rangle \\ &= \frac{1}{\pi} \langle \alpha(-t) | \rho(0) | \alpha(-t) \rangle = Q(\alpha(-t), 0), \end{aligned} \quad (2.78)$$

denn durch Differenzieren nach der Zeit erhalten wir

$$\frac{d}{dt}Q(\alpha(-t), 0) = -\frac{\partial Q}{\partial u} \frac{du}{dt} - \frac{\partial Q}{\partial v} \frac{dv}{dt} = -\left(\frac{du}{dt} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{dv}{dt} \frac{\partial}{\partial v} \right) Q(\alpha(-t), 0). \quad (2.79)$$

Offenbar werden für $\omega(t) \equiv \omega_0$ kohärente Zustände auf kohärente Zustände abgebildet. Vergleichen wir die Gleichung (2.79) mit der vereinfachten Bewegungsgleichung (2.77), so finden wir Differentialgleichungen für die Größen u und v . Diese skalieren wir über die Vorschriften (2.68) und (2.69) in die Größen x und p um und erhalten die klassischen Bewegungsgleichungen

$$\dot{x} = p, \quad (2.80)$$

$$\dot{p} = -\omega_0^2 x + F(t). \quad (2.81)$$

Für den Fall $\omega(t) = \omega_0$ ist die quantenmechanische Lösung des Problems also vollständig durch die klassische Lösung bestimmt.

Ein weiterer Spezialfall, in welchem die Bewegungsgleichung (2.76) zweiter Ordnung ebenfalls in eine erster Ordnung reduziert wird, ist der klassische Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$. Hierzu rechnen wir die Bewegungsgleichung (2.76) auf Orts- und Impulskordinaten um und gehen zu Einheiten mit $\hbar \neq 1$ über. Im Ergebnis erhalten wir

$$\frac{d}{dt}Q(x, p) = \left\{ \omega^2(t) x \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\hbar}{2} \left(\frac{\omega^2(t)}{\omega_0} - \omega_0 \right) \frac{\partial^2}{\partial x \partial p} - F(t) \frac{\partial}{\partial p} \right\} Q(x, p). \quad (2.82)$$

Im Limes $\hbar \rightarrow 0$ verschwindet der Term mit den doppelten Ableitungen und wir erhalten eine partielle Differentialgleichung erster Ordnung. Diese kann entlang klassischer Trajektorien gelöst werden, denn es gilt

$$\frac{d}{dt}Q(x(-t), p(-t)) = -\frac{\partial Q}{\partial x} \frac{dx}{dt} - \frac{\partial Q}{\partial p} \frac{dp}{dt}. \quad (2.83)$$

Durch Koeffizientenvergleich finden wir wieder die klassischen Bewegungsgleichungen (2.80) und (2.81), die in unserem Fall die Zeitentwicklung eines jeden Punktes im Phasenraum beschreiben.

Die Struktur der Bewegungsgleichung

Sehen wir uns die Bewegungsgleichung (2.76) genauer an, so stellen wir fest, dass sie von der Form

$$\frac{d}{dt}f(\mathbf{q}) = \left\{ \sum_{l,m=1}^n E_{lm} \frac{\partial}{\partial q_l} q_m + \sum_{l,m=1}^n D_{lm} \frac{\partial}{\partial q_l} \frac{\partial}{\partial q_m} + \sum_{m=1}^n c_m \frac{\partial}{\partial q_m} \right\} f(\mathbf{q}) \quad (2.84)$$

ist. Dabei bezeichnet n die Zahl der Dimensionen, die in unserem Fall $n = 2$ beträgt.

Aufgrund der Vertauschbarkeit der zweiten Ableitungen kann die Matrix $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n,n}$ symmetrisch gewählt werden, was wir im Folgenden annehmen. Die ursprüngliche Differentialgleichung erhalten wir aus (2.84) durch die Wahl der Koeffizienten E_{lm} , D_{lm} und c_m gemäß

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_0 \\ \frac{\omega^2(t)}{\omega_0} & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c} = \begin{pmatrix} 0 \\ -lF(t) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\omega^2(t)}{\omega_0} - \omega_0 \\ \frac{\omega^2(t)}{\omega_0} - \omega_0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.85)$$

2.5.2. Lösung der Bewegungsgleichung über Fourier-Transformation

Wir werden nun zuerst die Fourier-Transformation auf die Bewegungsgleichung (2.84) anwenden. Dabei gehen die Terme mit den doppelten Ableitungen in Produktterme über, so dass eine partielle Differentialgleichung erster Ordnung entsteht. Anschließend werden wir die Fourier-Transformierte einer allgemeinen Gauß-Funktion in die transformierte Bewegungsgleichung einsetzen. Dieses Vorgehen wird uns auf Bewegungsgleichungen für die Parameter des Gauß-Zustands führen, die mit den Erwartungswerten von Ort und Impuls, sowie den Varianzen zusammenhängen.

Die transformierte Bewegungsgleichung

Wir definieren zunächst eine Fourier-Transformation in n Dimensionen durch

$$\mathcal{F}(f(\mathbf{q})) \equiv F(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}} f(\mathbf{q}) d\mathbf{q} \quad \text{mit} \quad d\mathbf{q} \equiv \prod_{m=1}^n dq_m. \quad (2.86)$$

Anschließend wenden wir diese auf die Bewegungsgleichung (2.84) an. Dabei gehen Multiplikationen im Ortsraum in Ableitungen im Fourier-Raum über, denn

$$\mathcal{F}(q_m f(\mathbf{q})) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}} q_m f(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = \int_{\mathbb{R}^n} \left(-i \frac{\partial}{\partial k_m} \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}} f(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = -i \frac{\partial}{\partial k_m} \mathcal{F}(f(\mathbf{q})). \quad (2.87)$$

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

Analog gehen Ableitungen im Ortsraum in Multiplikationen im Fourier-Raum über, denn die partielle Integration bzgl. der Koordinaten q_m liefert

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\left(\frac{\partial}{\partial q_m}f(\mathbf{q})\right) &= \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}} \frac{\partial}{\partial q_m} f(\mathbf{q}) \, d\mathbf{q} \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}} f(\mathbf{q}) \Big|_{q_m=-\infty}^{q_m=\infty} \right) \frac{d\mathbf{q}}{dq_m} - \int_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{\partial}{\partial q_m} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}} \right) f(\mathbf{q}) \, d\mathbf{q} \\ &= -ik_m \mathcal{F}(f(\mathbf{q})).\end{aligned}\tag{2.88}$$

Durch Einsetzen von (2.87) und (2.88) in die Bewegungsgleichung (2.84) erhalten wir die transformierte Differentialgleichung

$$\mathcal{F}\left(\frac{df(\mathbf{q})}{dt}\right) \equiv \frac{dF(\mathbf{k})}{dt} = - \left\{ \sum_{l,m=1}^n E_{lm} k_l \frac{\partial}{\partial k_m} + \sum_{l,m=1}^n D_{lm} k_l k_m + i \sum_{m=1}^n c_m k_m \right\} F(\mathbf{k}).\tag{2.89}$$

Diese ist eine lineare partielle Differentialgleichung erster Ordnung.

Gauß-Funktionen im Fourier-Raum

Um die Lösung der Bewegungsgleichung für Gauß-Funktionen berechnen zu können, definieren wir eine allgemeine Gauß-Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ in n Dimensionen durch

$$f(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} e^{-(\mathbf{q}-\mathbf{b})\cdot\mathbf{A}(\mathbf{q}-\mathbf{b})} \quad \text{mit} \quad \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n,\tag{2.90}$$

wobei die Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$ symmetrisch und positiv definit sein muss. Die Funktion soll normiert sein, so dass

$$N = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-(\mathbf{q}-\mathbf{b})\cdot\mathbf{A}(\mathbf{q}-\mathbf{b})} \, d\mathbf{q}.\tag{2.91}$$

Die Fourier-Transformation (2.86) der Gauß-Funktion (2.90) ergibt

$$\mathcal{F}(f(\mathbf{q})) \equiv F(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}} \, d\mathbf{q} = \frac{1}{N} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-(\mathbf{q}-\mathbf{b})\cdot\mathbf{A}(\mathbf{q}-\mathbf{b})} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}} \, d\mathbf{q}.\tag{2.92}$$

Mit der Substitution $\mathbf{q}' = \mathbf{q} - \mathbf{b}$ folgt

$$\begin{aligned}F(\mathbf{k}) &= \frac{1}{N} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\mathbf{q}'\cdot\mathbf{A}\mathbf{q}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}} \, d\mathbf{q}' = \frac{1}{N} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\mathbf{q}'\cdot\mathbf{A}\mathbf{q}' + \frac{i}{2}\mathbf{q}'\cdot\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{k} + \frac{i}{2}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}\mathbf{q}'} \, d\mathbf{q}' \\ &= \frac{1}{N} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-(\mathbf{q}' - \frac{i}{2}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{A}(\mathbf{q}' - \frac{i}{2}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{k}) - \frac{1}{4}\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}^{-1}\mathbf{k}} \, d\mathbf{q}'.\end{aligned}\tag{2.93}$$

Bei der Ausführung des Integrals macht die Verschiebung des Ursprungs im Imaginärteil keinen Unterschied (siehe Anhang A). Wir erhalten im Fourier-Raum wieder eine Gauß-Funktion

$$F(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}} e^{-\frac{1}{4}\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}^{-1}\mathbf{k}}. \quad (2.94)$$

Im Gegensatz zur Gauß-Funktion im Ortsraum tritt hier kein Normierungsfaktor auf und anstelle der Matrix \mathbf{A} steht die inverse Matrix \mathbf{A}^{-1} . Im Folgenden werden wir \mathbf{A}^{-1} auch Varianzmatrix nennen, da sie direkt mit den Varianzen der Koordinaten zusammenhängt (siehe Anhang D). Die Varianzmatrix \mathbf{A}^{-1} und die Verschiebung des Ursprungs \mathbf{b} treten in der Fourier-Darstellung getrennt voneinander auf.

Bewegungsgleichungen für Erwartungswerte

Setzen wir die Gauß-Funktion im Fourier-Raum (2.94) in die transformierte Bewegungsgleichung (2.89) ein, so finden wir

$$\begin{aligned} i\mathbf{k} \cdot \frac{d\mathbf{b}}{dt} - \frac{1}{4}\mathbf{k} \cdot \frac{d\mathbf{A}^{-1}}{dt}\mathbf{k} = & - \sum_{l,m=1}^n E_{lm}k_l \left\{ ib_m - \frac{1}{4} \sum_{j=1}^n (A_{mj}^{-1} + A_{jm}^{-1})k_j \right\} \\ & - \sum_{l,m=1}^n D_{lm}k_l k_m - i \sum_{m=1}^n c_m k_m. \end{aligned} \quad (2.95)$$

Diese Gleichung muss für alle Werte von \mathbf{k} erfüllt sein. Durch Vergleich beider Seiten erhalten wir für lineare Terme

$$i\mathbf{k} \cdot \frac{d\mathbf{b}}{dt} = -i \sum_{l,m=1}^n k_l E_{lm} b_m - i \sum_{m=1}^n c_m k_m = -i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}\mathbf{b} - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{c}, \quad (2.96)$$

und damit

$$\frac{d\mathbf{b}}{dt} = -\mathbf{E}\mathbf{b} - \mathbf{c}. \quad (2.97)$$

Wir werden also auf eine inhomogene gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung geführt, deren Lösung die Mittelpunktswegung der Gauß-Verteilung im durch $\text{Re } \alpha$ und $\text{Im } \alpha$ aufgespannten Phasenraum beschreibt. Die Größen $\text{Re } \alpha$ und $\text{Im } \alpha$ können über die Gleichungen (2.68) und (2.69) in die Erwartungswerte von Ort und Impuls umgerechnet werden, so dass (2.97) im Wesentlichen eine Gleichung für die Erwartungswerte von Ort und Impuls darstellt.

Einsetzen von $\mathbf{b} = (\langle u \rangle, \langle v \rangle)^T$ und den Definitionen (2.85) der Matrix \mathbf{E} und des Vektors \mathbf{c} liefert

$$\frac{d}{dt} \langle u \rangle = \omega_0 \langle v \rangle, \quad (2.98)$$

$$\frac{d}{dt} \langle v \rangle = -\frac{\omega^2(t)}{\omega_0} \langle u \rangle + lF(t). \quad (2.99)$$

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

Durch Ableiten von (2.98) nach der Zeit, Einsetzen von (2.99) und Umskalieren nach (2.68) bzw. (2.69) auf Ort und Impuls ergibt sich gerade die klassische Bewegungsgleichung eines parametrischen Oszillators mit äußerer Kraft

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\omega^2(t) \langle x \rangle + \frac{1}{m} F(t). \quad (2.100)$$

Aus den Termen quadratisch in \mathbf{k} erhalten wir Informationen über die zeitliche Entwicklung der Varianzen:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{4} \mathbf{k} \cdot \frac{d\mathbf{A}^{-1}}{dt} \mathbf{k} &= \frac{1}{4} \sum_{l,m=1}^n \sum_{j=1}^n k_l E_{lm} (A_{mj}^{-1} + A_{jm}^{-1}) k_j - \sum_{l,m=1}^n k_l D_{lm} k_m \\ &= \frac{1}{4} \mathbf{k} \cdot \mathbf{E} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{k} + \frac{1}{4} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{E}^T \mathbf{k} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{D} \mathbf{k}. \end{aligned} \quad (2.101)$$

Es folgt die inhomogene gewöhnliche Differentialgleichung

$$\frac{d\mathbf{A}^{-1}}{dt} = -\mathbf{E} \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{E}^T + 4\mathbf{D}. \quad (2.102)$$

Diese Gleichung ist wieder von der Struktur (2.18), die wir schon in der Behandlung des harmonischen Oszillators im Lindblad-Formalismus kennengelernt haben.

Bemerkenswert ist, dass die äußere Kraft - die in die Koeffizienten c_m eingeht - nur in der Gleichung für den Mittelpunkt der Gauß-Verteilung auftaucht. Sie hat somit keinerlei Einfluss auf die Breite und Form der Gauß-Verteilung.

Die allgemeine Lösung der Bewegungsgleichungen

Wie bei der Lindblad-Beschreibung werden die homogenen Lösungen der Gleichungen (2.97) und (2.102) durch denselben Zeitentwicklungsoperator generiert. Dieser ist im Allgemeinen nicht unitär.

Für die homogene Lösung der Differentialgleichung für die Mittelpunktswegung (2.97) formulieren wir den Ansatz

$$\mathbf{b}_{hom}(t) = \mathbf{U}(t, 0) \mathbf{b}_0 \quad (2.103)$$

mit $\mathbf{b}_0 = \mathbf{b}(0)$. Das Einsetzen dieses Ansatzes in die homogene Gleichung führt uns auf die Differentialgleichung für den Zeitentwicklungsoperator

$$\frac{d}{dt} \mathbf{U}(t, t') = -\mathbf{E}(t) \mathbf{U}(t, t') \quad (2.104)$$

mit der Anfangsbedingung $\mathbf{U}(t, t) = \mathbb{1}$.

Für die allgemeine Lösung von (2.97) ist zusätzlich eine partikuläre Lösung $\mathbf{b}_p(t)$ der inhomogenen Gleichung nötig. Diese kann als Integral über die Inhomogenität $\mathbf{c}(t)$ geschrieben werden. Die allgemeine Lösung der Differentialgleichung für die Mittelpunktswegung (2.97) ergibt sich somit zu

$$\mathbf{b}(t) = \mathbf{b}_{hom}(t) + \mathbf{b}_p(t) = \mathbf{U}(t, 0) \mathbf{b}_0 - \int_0^t \mathbf{U}(t, t') \mathbf{c}(t') dt'. \quad (2.105)$$

In völliger Analogie können wir die Lösung der Differentialgleichung für die Varianzmatrix der Gauß-Verteilung (2.102) konstruieren. Mit $\mathbf{A}_0^{-1} = \mathbf{A}^{-1}(0)$ folgt für die Lösung der homogenen Gleichung

$$\mathbf{A}_{hom}^{-1}(t) = \mathbf{U}(t, 0)\mathbf{A}_0^{-1}\mathbf{U}^T(t, 0), \quad (2.106)$$

so dass wir für die allgemeine Lösung der Differentialgleichung für die Varianzmatrix

$$\mathbf{A}^{-1}(t) = \mathbf{U}(t, 0)\mathbf{A}_0^{-1}\mathbf{U}^T(t, 0) + 4 \int_0^t \mathbf{U}(t, t')\mathbf{D}(t')\mathbf{U}^T(t, t') dt', \quad (2.107)$$

finden. Diese Gleichung genügt der allgemeinen Struktur (2.59) der Varianzen.

Insgesamt konnten wir zeigen, dass aus der Kenntnis der klassischen Lösung für die Bewegungsgleichung eines Massenpunkts mit der Oszillatorfrequenz ω und einer externen Kraft $F(t)$ die vollständige quantenmechanische Lösung in Husimi-Darstellung folgt.

2.5.3. Konstruktion der Husimi-Funktion über Erwartungswerte

Eine andere Methode zur Lösung der Bewegungsgleichung (2.84) benutzt die klassische Lösung des Problems. Kennen wir diese, lassen sich Gleichungen für die Erwartungswerte von Ort und Impuls und für die Varianzen ableiten. Wir werden die Identität dieser mit den Gleichungen (2.105) und (2.107) nachweisen.

Wir nehmen an, dass die klassische Lösung für einen harmonischen Oszillator mit externer Kraft $F(t)$ bekannt ist, und in die Lösung des homogenen Problems mit $F(t) = 0$ und die partikuläre Lösung zerlegt werden kann. Den homogenen Teil der Lösung drücken wir durch eine Zeitentwicklungsmatrix $\mathbf{U}'(t, t')$ aus, die auf den Ort und den Impuls des Teilchens zu einem früheren Zeitpunkt wirkt. Die partikuläre Lösung bezeichnen wir mit $\mathbf{e}(t) = (e_x(t), e_p(t))^T$. Wir erhalten

$$\begin{pmatrix} x(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \mathbf{U}'(t, 0) \begin{pmatrix} x_0 \\ p_0 \end{pmatrix} + \mathbf{e}(t). \quad (2.108)$$

Durch die Ersetzung der klassischen Größen Ort und Impuls durch die ihnen korrespondierenden quantenmechanischen Observablen erhalten wir Ausdrücke für die zeitabhängigen Operatoren Ort und Impuls. Die anschließende Bildung von Erwartungswerten liefert $\mathbf{x}(t) = (\langle x(t) \rangle, \langle p(t) \rangle)^T$. Wir finden

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{U}'(t, 0)\mathbf{x}_0 + \mathbf{e}(t). \quad (2.109)$$

Die Varianzen schreiben wir wieder in die Matrix Σ . Die Zeitentwicklung der Varianzen kann durch Quadrieren der Gleichungen für die zeitabhängigen Observablen Ort und Impuls bestimmt werden. Es folgt

$$\Sigma(t) = \mathbf{U}'(t, 0)\Sigma_0\mathbf{U}'^T(t, 0). \quad (2.110)$$

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

Diese Ergebnisse müssen noch auf die Größen $\mathbf{b}(t)$ und $\mathbf{A}^{-1}(t)$ umgerechnet werden, damit wir sie mit den Gleichungen (2.105) und (2.107) aus dem letzten Abschnitt vergleichen können. Die entsprechenden Umrechnungsvorschriften sind in den Gleichungen (2.68) bis (2.72) gegeben. Der Zusammenhang zwischen der Matrix \mathbf{A}^{-1} und den ersten und zweiten Momenten der Größen $u = \text{Re } \alpha$ und $v = \text{Im } \alpha$ ist Anhang D zu entnehmen. Wir erhalten

$$\mathbf{b} = \mathbf{T}\mathbf{x} \quad \text{und} \quad \mathbf{A}^{-1} = 2\mathbf{T}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{T} + \frac{1}{2}\mathbb{1}, \quad (2.111)$$

mit der symmetrischen Transformationsmatrix

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2l} & 0 \\ 0 & l \end{pmatrix}. \quad (2.112)$$

Wir sehen, dass Zustände in Husimi-Darstellung verbreitert werden. Eingesetzt ergibt sich

$$\mathbf{b}(t) = \mathbf{T}\mathbf{U}'(t, 0)\mathbf{T}^{-1}\mathbf{b}_0 + \mathbf{T}\mathbf{e}(t) \quad (2.113)$$

$$\mathbf{A}^{-1}(t) = \mathbf{T}\mathbf{U}'(t, 0)\mathbf{T}^{-1}\mathbf{A}_0^{-1}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{U}'^T(t, 0)\mathbf{T} + \frac{1}{2}(\mathbb{1} - \mathbf{T}\mathbf{U}'(t, 0)\mathbf{T}^{-2}\mathbf{U}'^T(t, 0)\mathbf{T}) \quad (2.114)$$

Identifizieren wir $\mathbf{T}\mathbf{U}'(t, 0)\mathbf{T}^{-1}$ mit dem Zeitentwicklungsoperator $\mathbf{U}(t, 0)$ aus dem letzten Abschnitt, so resultiert

$$\mathbf{b}(t) = \mathbf{U}(t, 0)\mathbf{b}_0 + \mathbf{T}\mathbf{e}(t) \quad (2.115)$$

$$\mathbf{A}^{-1}(t) = \mathbf{U}(t, 0)\mathbf{A}_0^{-1}\mathbf{U}^T(t, 0) + \frac{1}{2}(\mathbb{1} - \mathbf{U}(t, 0)\mathbf{U}^T(t, 0)) \quad (2.116)$$

Diese Gleichungen sind von der Struktur der Lösungen, die wir im letzten Abschnitt erhalten haben.

Die partikuläre Lösung $\mathbf{T}\mathbf{e}(t)$ von $\mathbf{b}(t)$ geht aus der klassischen Lösung hervor. Sie ist also als Integral über die äußere Kraft $F(t)$ gegeben. Für den Mittelpunkt der Gauß-Verteilung erhalten wir somit konstruktionsbedingt das Ergebnis (2.105) aus dem letzten Abschnitt.

Das hier abgeleitete Ergebnis für die Varianzen unterscheidet sich in der genauen Form der partikulären Lösung von der im letzten Abschnitt berechneten (2.107). Die im Abschnitt 2.5.2 auftretende Integration über die Inhomogenität der Differentialgleichung (2.102) fällt bei dieser Beschreibung weg.

Um zu zeigen, dass die Lösungen (2.115) und (2.107) übereinstimmen, müssen wir die Gleichheit der partikulären Lösungen

$$\mathbf{A}_{p,FT}^{-1}(t) = 4 \int_0^t \mathbf{U}(t, t')\mathbf{D}(t')\mathbf{U}^T(t, t') dt' \quad (2.117)$$

und

$$\mathbf{A}_{p,Erw}^{-1}(t) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - \mathbf{U}(t, 0)\mathbf{U}^T(t, 0)) \quad (2.118)$$

nachweisen.

Zunächst stellen wir fest, dass beide Funktionen für den Zeitpunkt $t = 0$ verschwinden, denn es gilt

$$\mathbf{A}_{p,Erw}^{-1}(0) = \frac{1}{2} \left(\mathbb{1} - \mathbf{U}(0,0)\mathbf{U}^T(0,0) \right) = 0 = 4 \int_0^0 \mathbf{U}(0,t')\mathbf{D}(t')\mathbf{U}^T(0,t') dt'. \quad (2.119)$$

Die Anfangsbedingungen für beide Lösungen sind identisch.

Differenzieren wir die partikuläre Lösung (2.118) nach der Zeit und beachten die Differentialgleichung (2.104) für den Zeitentwicklungsoperator, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{A}_{p,Erw}^{-1}(t) &= \frac{1}{2} \left(\mathbf{E}(t)\mathbf{U}(t,0)\mathbf{U}^T(t,0) + \mathbf{U}(t,0)\mathbf{U}^T(t,0)\mathbf{E}^T(t) \right) \\ &= \mathbf{E}(t) \left(\frac{1}{2} \mathbb{1} - \mathbf{A}_{p,Erw}^{-1}(t) \right) + \left(\frac{1}{2} \mathbb{1} - \mathbf{A}_{p,Erw}^{-1}(t) \right) \mathbf{E}^T(t) \\ &= -\mathbf{E}(t)\mathbf{A}_{p,Erw}^{-1}(t) - \mathbf{A}_{p,Erw}^{-1}(t)\mathbf{E}^T(t) + \frac{1}{2} \left(\mathbf{E}(t) + \mathbf{E}^T(t) \right). \end{aligned} \quad (2.120)$$

Für die partikuläre Lösung aus der Fourier-Transformation erhalten wir durch Bilden der zeitlichen Ableitung von (2.117):

$$\frac{d}{dt} \mathbf{A}_{p,FT}^{-1}(t) = -\mathbf{E}(t)\mathbf{A}_{p,FT}^{-1}(t) - \mathbf{A}_{p,FT}^{-1}(t)\mathbf{E}^T(t) + 4\mathbf{D}(t). \quad (2.121)$$

Beide Verfahren liefern somit dasselbe Ergebnis, wenn die Inhomogenitäten in den Differentialgleichungen (2.120) und (2.121) übereinstimmen.

Rufen wir uns die explizite Form (2.85) der Matrizen \mathbf{E} und \mathbf{D} in Erinnerung, so wird die Übereinstimmung der Inhomogenitäten offensichtlich, denn

$$4\mathbf{D}(t) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{E}(t) + \mathbf{E}^T(t) \right). \quad (2.122)$$

Diese Identität ist eine Eigenschaft der Bewegungsgleichung an sich, ist also nicht an die Verwendung von Gauß-Funktionen gebunden.

Im Ergebnis haben wir gezeigt, dass die Lösung der Bewegungsgleichung für die Husimi-Funktion über Fourier-Transformation identisch mit der Konstruktion von $Q(\alpha, t)$ über Erwartungswerte ist. In beiden Fällen sind wir auf Gleichungen für Erwartungswerte geführt worden, die der Struktur (2.58) bzw. (2.59) entsprechen. Damit ist auch die propagierende Funktion für den getriebenen Oszillator festgelegt. Die Husimi-Funktion liefert also eine anschauliche Darstellung der propagierenden Funktion im klassischen Phasenraum.

2.5.4. Das Beispiel des periodisch getriebenen Oszillators

Zur Veranschaulichung der propagierenden Funktion werden wir im Folgenden die Zeitentwicklung der Husimi-Funktion eines einfach periodisch getriebenen Oszillators explizit berechnen.

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

Die auf den Oszillator wirkende äußere Kraft sei

$$F(t) = \begin{cases} A \cos(\Omega t) & \text{für } t > 0 \\ 0 & \text{für } t < 0 \end{cases}, \quad (2.123)$$

mit der Amplitude A und der Frequenz Ω .

Der Mittelpunkt der Husimi-Verteilung bewegt sich auf den klassischen Trajektorien, die durch die Gleichung (2.97) festgelegt sind. Die Grundlösung der Gleichung ist durch das Exponential der Matrix \mathbf{E} aus Gleichung (2.85) gegeben. Wir erhalten

$$\mathbf{U}(t, t') = e^{-\mathbf{E}(t-t')} = \begin{pmatrix} \cos(\omega(t-t')) & \frac{\omega_0}{\omega} \sin(\omega(t-t')) \\ -\frac{\omega}{\omega_0} \sin(\omega(t-t')) & \cos(\omega(t-t')) \end{pmatrix}. \quad (2.124)$$

Für die allgemeine Lösung müssen wir noch über die Kraft integrieren und finden

$$\mathbf{b}(t) = \begin{pmatrix} \cos \omega t & \frac{\omega_0}{\omega} \sin \omega t \\ -\frac{\omega}{\omega_0} \sin \omega t & \cos \omega t \end{pmatrix} \mathbf{b}_0 + \frac{lA}{\Omega^2 - \omega^2} \begin{pmatrix} \omega_0 \cos \omega t - \omega_0 \cos \Omega t \\ \Omega \sin \Omega t - \omega \sin \omega t \end{pmatrix}. \quad (2.125)$$

Da der Oszillator ungedämpft ist, bleiben Schwingungen mit den Frequenzen ω und Ω erhalten. Im Resonanz-Fall $\Omega = \omega$ geht die Lösung (2.125) über in

$$\mathbf{b}(t) = \begin{pmatrix} \cos \omega t & \frac{\omega_0}{\omega} \sin \omega t \\ -\frac{\omega}{\omega_0} \sin \omega t & \cos \omega t \end{pmatrix} \mathbf{b}_0 + \frac{lA}{2\omega} \begin{pmatrix} \omega_0 t \sin \omega t \\ \sin \omega t + \omega t \cos \omega t \end{pmatrix}. \quad (2.126)$$

Die Amplitude der Schwingung wächst also linear mit der Zeit.

Für die homogene Lösung der Differentialgleichung für die Varianzmatrix erhalten wir nach (2.106)

$$\mathbf{A}_{hom}^{-1}(t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \frac{\omega_0}{\omega} \sin(\omega t) \\ -\frac{\omega}{\omega_0} \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix} \mathbf{A}_0^{-1} \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & -\frac{\omega}{\omega_0} \sin(\omega t) \\ \frac{\omega_0}{\omega} \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix}. \quad (2.127)$$

Sie beschreibt die Rotation der Gauß-Verteilung um den Mittelpunkt mit der Frequenz ω .

Die partikuläre Lösung können wir mit Hilfe von (2.107) berechnen. Dazu integrieren wir über die Inhomogenität \mathbf{D} und erhalten

$$\mathbf{A}_p^{-1}(t) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \left(1 - \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2\right) (1 - \cos(2\omega t)) & \left(\frac{\omega}{\omega_0} - \frac{\omega_0}{\omega}\right) \sin(2\omega t) \\ \left(\frac{\omega}{\omega_0} - \frac{\omega_0}{\omega}\right) \sin(2\omega t) & \left(1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2\right) (1 - \cos(2\omega t)) \end{pmatrix}. \quad (2.128)$$

Offenbar ist die Lösung für die Varianzen periodisch mit der Periodendauer $T = \pi/\omega$. Da die Kraft keinerlei Einfluss auf die Varianzen hat, treten hier keine Resonanzen auf.

Um nun die propagierende Funktion für den getriebenen Oszillator bestimmen zu können, müssen wir die Größen $\mathbf{b}(t)$ und $\mathbf{A}^{-1}(t)$ mit Hilfe der Gleichung (2.111) in

die Erwartungswerte von Ort und Impuls, sowie die Varianzen umrechnen. Es folgen die Gleichungen (2.109) und (2.110) mit

$$\mathbf{U}'(t, 0) = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{U}(t, 0)\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \cos \omega t & \frac{1}{\omega} \sin \omega t \\ -\omega \sin \omega t & \cos \omega t \end{pmatrix} \quad (2.129)$$

und

$$\mathbf{e}(t) = \frac{A}{\Omega^2 - \omega^2} \begin{pmatrix} \cos \omega t - \cos \Omega t \\ \Omega \sin \Omega t - \omega \sin \omega t \end{pmatrix}. \quad (2.130)$$

Durch Vergleich mit (2.58) finden wir die Größen

$$\mathbf{K}(t) = \mathbf{U}'(t, 0), \quad \mathbf{k}(t) = \mathbf{e}(t) \quad \text{und} \quad \mathbf{C}(t) = 0. \quad (2.131)$$

Diese rechnen wir nach (2.61) in die Koeffizienten $a_1(t), \dots, a_9(t)$ der propagierenden Funktion (2.60) um und erhalten

$$\begin{aligned} a_1(t) = a_2(t) = a_3(t) = a_7(t) = 0, \quad a_4(t) = a_5(t) &= \frac{\omega \cos \omega t}{2 \sin \omega t}, \quad a_6 = \frac{-\omega}{\sin \omega t}, \\ a_8(t) &= \frac{A}{\Omega^2 - \omega^2} \left(\Omega \sin \Omega t + \omega \frac{\cos \omega t}{\sin \omega t} \cos \Omega t - \frac{\omega}{\sin \omega t} \right), \\ a_9(t) &= \frac{A\omega}{\Omega^2 - \omega^2} \frac{\cos \omega t - \cos \Omega t}{\sin \omega t}. \end{aligned} \quad (2.132)$$

Durch Einsetzen dieser Größen in (2.60) erhalten wir das Ergebnis für die propagierende Funktion des ungedämpften periodisch getriebenen harmonischen Oszillators. Diese können wir durch die Husimi-Funktion im klassischen Phasenraum visualisieren.

Als konkretes Beispiel betrachten wir einen kohärenten Zustand. Dieser entspricht in Husimi-Darstellung einer rotationssymmetrischen Gauß-Verteilung im durch $u \equiv \text{Re } \alpha$ und $v \equiv \text{Im } \alpha$ aufgespannten Phasenraum. Mittels der Vorschrift $x = 2lu$ bzw. $p = v/l$ können wir die Größen u und v auf Orts- und Impulskoordinaten umrechnen. Dann liefert die Husimi-Funktion eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf dem klassischen Phasenraum.

Der Mittelpunkt der Verteilung bewegt sich auf klassischen Trajektorien, die durch die Gleichung (2.109) mit der Matrix $\mathbf{U}'(t, 0)$ aus (2.129) und der partikulären Lösung $\mathbf{e}(t)$ aus (2.130) festgelegt sind. In der Abbildung 2.4 ist die klassische Lösung für die Wahl $\omega/\Omega = 2/3$, also außerhalb der Resonanz, gezeigt. Wir sehen, dass sich die Lösung aus der Überlagerung von Schwingungen mit der Oszillatorfrequenz ω und der Frequenz Ω der äußeren Anregung zusammensetzt. Nach zwei Perioden mit der Oszillatorfrequenz ω erreicht der Mittelpunkt der Verteilung wieder die Werte \mathbf{b}_0 .

Die Zeitentwicklung der gesamten Verteilung erhalten wir, indem wir einen jeden Punkt entlang der klassischen Trajektorien propagieren. Damit ist klar, dass die Husimi-Funktion des kohärenten Zustandes nicht rotationssymmetrisch bleiben wird. Der kohärente Zustand bleibt also nicht kohärent. Er wird im Zeitverhalten

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

in verschiedene Richtungen „gequetscht“. Dieses Verhalten ist in Abbildung 2.5 zu sehen, wobei die Darstellung auf den Mittelpunkt der Verteilung zentriert wurde.

Explizit ist die Zeitentwicklung der Varianzen und damit der Form der Verteilung um den Mittelpunkt nach den Gleichungen (2.127) und (2.128) durch eine Überlagerung einer Rotation der gesamten Gauß-Verteilung mit der Oszillatorfrequenz ω und einer komplizierteren periodischen Bewegung gegeben, die anschaulich einer „Pulsierung“ oder „Atmung“ entspricht (siehe Abbildung 2.5). Die Varianzen erreichen bereits nach $t = \pi/\omega$ wieder ihre Anfangspräparation, da deren Zeitentwicklung nicht von der äußeren Kraft $F(t)$ abhängt. Im ungedämpften Fall überlebt die Anfangspräparation für alle Zeiten. Das System ist deterministisch.

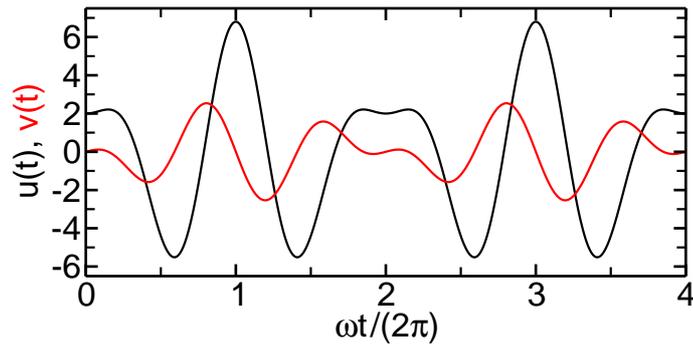


Abbildung 2.4.: Zeitentwicklung des Mittelpunkts eines kohärenten Zustands im durch u und v aufgespannten Phasenraum mit $u(0) = 2$ und $v(0) = 0$; $\omega = 1$ und $\omega_0 = 3$, sowie $\Omega = 1.5$ und $A = 1$.

2.5. Der getriebene Oszillator in Husimi-Darstellung

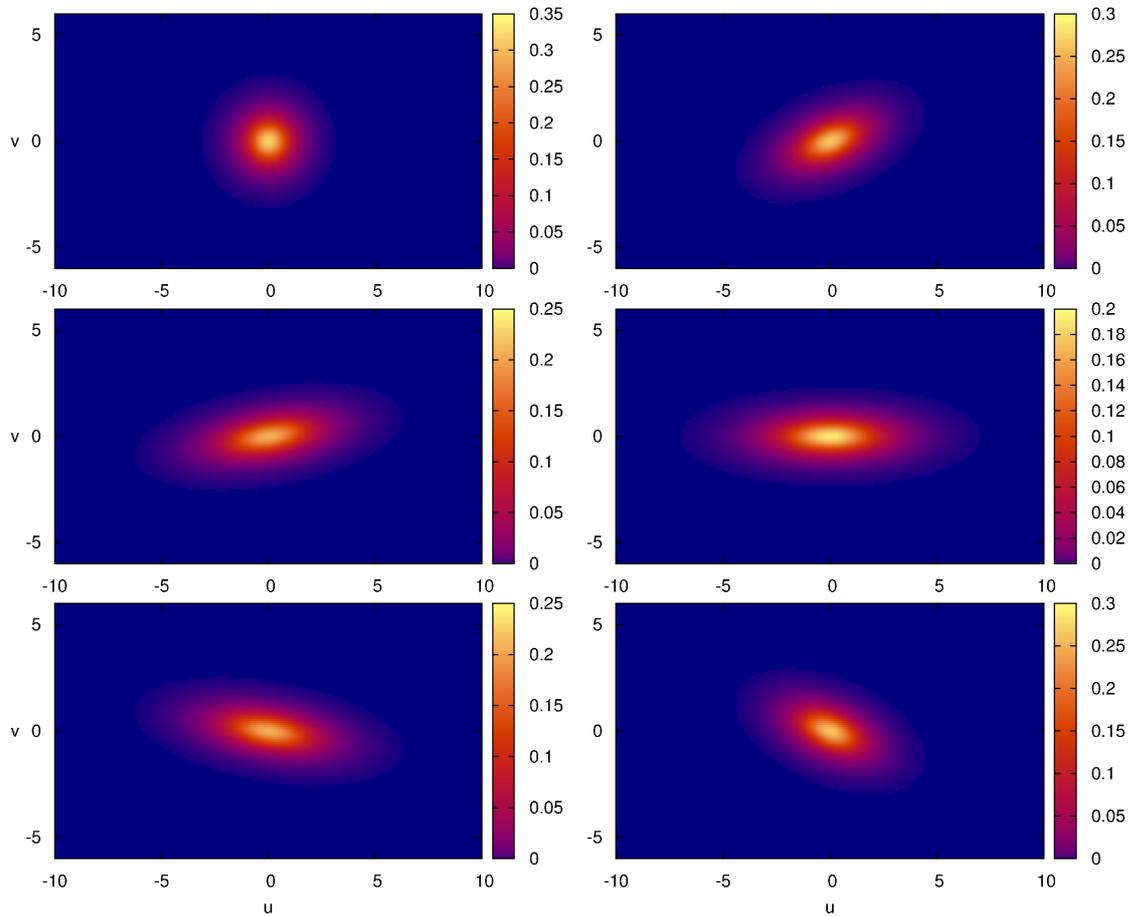


Abbildung 2.5.: Zeitentwicklung der Form eines kohärenten Zustandes mit $\omega = 1$ und $\omega_0 = 3$, sowie $A = 1$ und $\Omega = 1.5$ zu den Zeiten $t = 0$ (links-oben), $t = \pi/(6\omega)$ (rechts-oben), $t = \pi/(3\omega)$ (links-mitte), $t = \pi/(2\omega)$ (rechts-mitte), $t = 2\pi/(3\omega)$ (links-unten) und $t = 5\pi/(6\omega)$ (rechts-unten). Nach $t = \pi/\omega$ wird die Form des ursprünglichen kohärenten Zustandes erreicht.

2. Der dissipative harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus

3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus

Im vorigen Kapitel haben wir die Lindblad-Beschreibung des harmonischen Oszillators ausgearbeitet. Unter der einschränkenden Annahme einer Halbgruppe sind wir damit direkt dem unteren Weg in Abbildung 1.1 gefolgt. Diskutiert wurde dabei auch die Idee der Konstruktion der propagierenden Funktion aus Erwartungswerten, welche in der Abbildung 2.3 veranschaulicht ist.

In diesem Kapitel werden wir dem vollständigen Weg in der Abbildung 1.1 folgen, indem wir ein explizites Modell für das Bad einführen. Ausgehend von der Dynamik des abgeschlossenen Gesamtsystems berechnen wir dann die Zeitentwicklung des zentralen System-Oszillators. Wir orientieren uns dabei an den Arbeiten [5, 13, 14]. Anschließend werden wir das Beispiel der lineare Kette von Oszillatoren diskutieren. Diese ist klassisch von Robertson und Huerta [23] und quantenmechanisch von Agarwal [24] behandelt worden. Unsere Beschreibung wird deren Ergebnisse verallgemeinern.

3.1. Das Modell

Wir betrachten ein abgeschlossenes System aus einem zentralen Oszillator der linear an ein Bad von N harmonischen Oszillatoren gekoppelt wird (Abbildung 3.1). Wir bezeichnen den Orts- bzw. den kanonisch konjugierten Impulsoperator des zentralen Oszillators durch x bzw. p und die entsprechenden Operatoren der Bad-Oszillatoren durch x_ν bzw. p_ν mit $\nu = 1, 2, \dots, N$. Der Hamilton-Operator H des Gesamtsystems

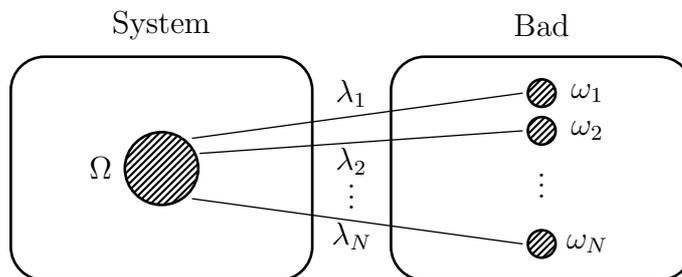


Abbildung 3.1.: Das Modell für einen dissipativen Oszillator im System-Bad-Formalismus: Der zentrale Oszillator der Frequenz Ω (System) wird linear an ein Bad von N Oszillatoren mit Frequenzen ω_ν gekoppelt.

3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus

setzt sich aus den Hamilton-Operatoren des zentralen Oszillators,

$$H_S = \frac{1}{2}(p^2 + \Omega^2 x^2), \quad (3.1)$$

des Bades,

$$H_B = \frac{1}{2} \sum_{\nu} (p_{\nu}^2 + \omega_{\nu}^2 x_{\nu}^2), \quad (3.2)$$

und der Wechselwirkung beider Systeme,

$$H_{SB} = x \sum_{\nu} \lambda_{\nu} x_{\nu}, \quad (3.3)$$

zusammen, so dass

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + \Omega^2 x^2) + x \sum_{\nu} \lambda_{\nu} x_{\nu} + \frac{1}{2} \sum_{\nu} (p_{\nu}^2 + \omega_{\nu}^2 x_{\nu}^2). \quad (3.4)$$

Wir erlauben eine Zeitabhängigkeit der Frequenz Ω des zentralen Oszillators. Die Frequenzen ω_{ν} der Bad-Oszillatoren und die Kopplungskonstanten λ_{ν} sollen konstant sein.

Der Hamilton-Operator in der Form (3.4) ist nicht für alle Kombinationen von Parametern Ω , λ_{ν} und ω_{ν} positiv definit. Wir müssen daher eine Bedingung ableiten, die diese Eigenschaft sicherstellt, da andernfalls unphysikalische Lösungen auftreten können. Dazu schreiben wir H um und erhalten

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}\left(\Omega^2 - \sum_{\nu} \frac{\lambda_{\nu}^2}{\omega_{\nu}^2}\right)x^2 + \frac{1}{2} \sum_{\nu} \left\{ p_{\nu}^2 + \omega_{\nu}^2 \left(x_{\nu} + \frac{\lambda_{\nu}}{\omega_{\nu}^2} x\right)^2 \right\}. \quad (3.5)$$

Die Kopplungskonstanten λ_{ν} und die ungestörten Eigenfrequenzen Ω und ω_{ν} müssen also die Positivitätsbedingung

$$\Omega^2 - \sum_{\nu} \frac{\lambda_{\nu}^2}{\omega_{\nu}^2} \geq 0 \quad (3.6)$$

erfüllen.

3.2. Allgemeine Lösung des Modells

Das Modell des zentralen Oszillators, der linear an ein Bad von Oszillatoren koppelt, kann exakt gelöst werden. Zur Berechnung der allgemeinen Lösung existieren verschiedene Methoden [5, 10, 13–15]. Häufig wird in der Literatur eine Pfadintegralformulierung verwendet. Wir werden die Lösung über Bewegungsgleichungen im Heisenberg-Bild konstruieren. Diese Ableitung ist sehr elementar und allgemein, und vermeidet den für dieses Beispiel unnötigen Formalismus der Pfadintegrale.

3.2.1. Die Bewegungsgleichungen der System-Operatoren

Wir starten mit der Heisenberg-Bewegungsgleichung $\dot{A} = i[H, A]$ und finden

$$\dot{x} = p, \quad (3.7)$$

$$\dot{p} = -\Omega^2 x - \sum_{\nu} \lambda_{\nu} x_{\nu}, \quad (3.8)$$

bzw.

$$\dot{x}_{\nu} = p_{\nu}, \quad (3.9)$$

$$\dot{p}_{\nu} = -\omega_{\nu}^2 x_{\nu} - \lambda_{\nu} x. \quad (3.10)$$

Aufgrund der quadratischen Form des Hamilton-Operators sind die Bewegungsgleichungen für die Operatoren x und p linear.

Die formale Lösung der Gleichungen (3.9) hängt von den Anfangswerten der Bad- und System-Operatoren ab. Wir erhalten

$$x_{\nu}(t) = \cos \omega_{\nu} t x_{\nu}^0 + \frac{1}{\omega_{\nu}} \sin \omega_{\nu} t p_{\nu}^0 - \lambda_{\nu} \int_0^t \frac{1}{\omega_{\nu}} \sin \omega_{\nu}(t - \tau) x(\tau) d\tau, \quad (3.11)$$

$$p_{\nu}(t) = -\omega_{\nu} \sin \omega_{\nu} t x_{\nu}^0 + \cos \omega_{\nu} t p_{\nu}^0 - \lambda_{\nu} \int_0^t \cos \omega_{\nu}(t - \tau) x(\tau) d\tau, \quad (3.12)$$

wobei $x_{\nu}^0 = x_{\nu}(0)$ und $p_{\nu}^0 = p_{\nu}(0)$.

Wir setzen dieses Resultat in die Gleichungen (3.7) ein und erhalten die exakte Operator-Bewegungsgleichung für x und $p = \dot{x}$, welche die zentrale Gleichung unserer weiteren Betrachtung sein wird:

$$\ddot{x}(t) = -\Omega^2 x(t) + \int_0^t K(t - \tau) x(\tau) d\tau - N(t). \quad (3.13)$$

Dabei haben wir den Dämpfungskern

$$K(t) = \sum_{\nu} \frac{\lambda_{\nu}^2}{\omega_{\nu}} \sin \omega_{\nu} t \quad (3.14)$$

und den Rauschkern

$$N(t) = \sum_{\nu} \lambda_{\nu} \left(\cos \omega_{\nu} t x_{\nu}^0 + \frac{1}{\omega_{\nu}} \sin \omega_{\nu} t p_{\nu}^0 \right) \quad (3.15)$$

eingeführt.

Gleichung (3.13) ist eine inhomogene lineare Integro-Differentialgleichung für Operatoren. Der erste Term auf der rechten Seite beschreibt einen ungestörten harmonischen Oszillator der Frequenz Ω . Der zweite Term führt Dissipation als einen Effekt der Kopplung an das Bad ein. Dissipation tritt also in Form einer Integration über den Dämpfungskern (3.14) in der Bewegungsgleichung auf und hängt natürlich

3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus

von der Lösung selbst ab. Der letzte Term beinhaltet Rauschen als zweiten Effekt der Kopplung an das Bad. Das Rauschen ist unabhängig von der Lösung der Bewegungsgleichung. Die Bewegungsgleichung (3.13) geht damit über die Lindblad-Beschreibung hinaus, in der keine Rausch-Terme auftraten.

Wir können (3.13) mit Hilfe einer Greenschen Funktion lösen. Dazu betrachten wir die homogene Gleichung

$$\ddot{q}(t, t') = -\Omega^2 q(t, t') + \int_{t'}^t K(t - \tau) q(\tau, t') d\tau, \quad (3.16)$$

die jetzt eine Gleichung für die Funktion $q(t) \in \mathbb{R}$ darstellt. Die allgemeinen Lösungen dieser Gleichung bezeichnen wir mit $q_1(t, t')$ und $q_2(t, t')$. Es gilt:

- (1) Die Funktionen $t \mapsto q_{1,2}(t, t')$ lösen (3.16) für $t \geq t'$.
- (2) Für $t < t'$ gilt $q_{1,2}(t, t') = 0$.
- (3) Die Anfangsbedingungen $q_1(t, t) = 1$, $\dot{q}_1(t, t) = 0$ und $q_2(t, t) = 0$, $\dot{q}_2(t, t) = 1$ werden erfüllt.

Damit ist die Lösung von (3.13) durch

$$x(t) = q_1(t, 0)x^0 + q_2(t, 0)p^0 - \int_0^t q_2(t, \tau)N(\tau) d\tau \quad (3.17)$$

und $p(t) = \dot{x}(t)$ gegeben, denn für die Anfangswerte gilt

$$x(0) = q_1(0, 0)x^0 + q_2(0, 0)p^0 - \int_0^0 q_2(0, \tau)N(\tau) d\tau = x^0, \quad (3.18)$$

$$p(0) = \dot{q}_1(0, 0)x^0 + \dot{q}_2(0, 0)p^0 - q_2(0, 0)N(0) - \int_0^0 \dot{q}_2(0, \tau)N(\tau) d\tau = p^0 \quad (3.19)$$

und die resultierende Bewegungsgleichung ist

$$\begin{aligned} \ddot{x}(t) &= \dot{p}(t) = \dot{q}_1(t, 0)x^0 + \dot{q}_2(t, 0)p^0 - \dot{q}_2(t, t)N(t) - \int_0^t \ddot{q}_2(t, \tau)N(\tau) d\tau \\ &= -\Omega^2 \left(q_1(t, 0)x^0 + q_2(t, 0)p^0 - \int_0^t q_2(t, \tau)N(\tau) d\tau \right) - N(t) \\ &\quad + \int_0^t K(t - \tau) \left(q_1(\tau, 0)x^0 + q_2(\tau, 0)p^0 - \int_0^\tau q_2(\tau, \tau')N(\tau') d\tau' \right) d\tau \\ &= -\Omega^2 x(t) + \int_0^t K(t - \tau)x(\tau) d\tau - N(t). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Mit der Gleichung (3.17) im Zusammenhang mit der Lösung von (3.16) haben wir die allgemeine Lösung für die Dynamik der System-Operatoren gefunden. Zu beachten ist, dass wir bisher im Gegensatz zur Lindblad-Beschreibung Bewegungsgleichungen für Operatoren statt für Erwartungswerte gelöst haben.

3.2.2. Berechnung der Erwartungswerte

Mit der Lösung für $x(t)$ aus Gleichung (3.17) kann die Zeitentwicklung des Erwartungswerts $\langle x(t) \rangle$ durch die Anfangswerte $\langle x_\nu^0 \rangle \equiv \bar{x}_\nu$ und $\langle p_\nu^0 \rangle \equiv \bar{p}_\nu$ ausgedrückt werden. Es folgt

$$\langle x(t) \rangle = q_1(t, 0) \langle x^0 \rangle + q_2(t, 0) \langle p^0 \rangle - \sum_\nu \lambda_\nu \int_0^t q_2(t, \tau) \left(\cos \omega_\nu \tau \bar{x}_\nu + \frac{\sin \omega_\nu \tau}{\omega_\nu} \bar{p}_\nu \right) d\tau. \quad (3.21)$$

Um die Schreibweise einfacher zu gestalten führen wir die partielle Fourier-Transformation ein:

$$\tilde{q}_2(t, \omega) = \int_0^t q_2(t, \tau) e^{i\omega\tau} d\tau, \quad (3.22)$$

$$\dot{\tilde{q}}_2(t, \omega) = \int_0^t \dot{q}_2(t, \tau) e^{i\omega\tau} d\tau = \frac{d}{dt} \tilde{q}_2(t, \omega). \quad (3.23)$$

Mit diesen Definitionen und mit $p = \dot{x}$ folgt für die Erwartungswerte von Ort und Impuls die Struktur (2.58), wenn wir die Größen

$$\mathbf{K}(t) = \begin{pmatrix} q_1(t, 0) & q_2(t, 0) \\ \dot{q}_1(t, 0) & \dot{q}_2(t, 0) \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

und

$$\mathbf{k}(t) = - \sum_\nu \frac{\lambda_\nu}{\omega_\nu} \bar{\mathbf{K}}(t, \omega_\nu) \bar{\mathbf{x}}_\nu \quad (3.25)$$

definieren. Dabei sind die Matrix $\bar{\mathbf{K}}$ und der Vektor $\bar{\mathbf{x}}_\nu$ durch

$$\bar{\mathbf{K}}(t, \omega_\nu) = \begin{pmatrix} \omega_\nu \operatorname{Re} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu) & \operatorname{Im} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu) \\ \omega_\nu \operatorname{Re} \dot{\tilde{q}}_2(t, \omega_\nu) & \operatorname{Im} \dot{\tilde{q}}_2(t, \omega_\nu) \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{x}}_\nu = \begin{pmatrix} \bar{x}_\nu \\ \bar{p}_\nu \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

gegeben.

Die Erwartungswerte von Ort und Impuls beinhalten offenbar zwei Anteile: zum Einen die Lösung des klassischen Problems, gegeben durch die Funktionen $q_1(t, t')$ und $q_2(t, t')$ und zum Anderen ein Rausch-Beitrag in Form einer Summation über alle Bad-Oszillatoren.

Nehmen wir an, dass sich alle Bad-Oszillatoren an ihren Ruhelagen befinden, also dass $\bar{\mathbf{x}}_\nu = 0$ für alle $\nu = 1, \dots, N$, so verschwindet der Beitrag vom Rausch-Term. Ort und Impuls folgen dann der klassischen Gleichung (3.16) eines dissipativen Oszillators.

Zur Berechnung der Varianzen sind die zweiten Momente von Ort und Impuls nötig. Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass die Zustände des zentralen Oszillators und des Bades zur Zeit $t_0 = 0$ unkorreliert sind. Eine Verallgemeinerung auf korrelierte Anfangszustände kann leicht vorgenommen werden.

3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus

Analog zu obigen Definitionen der Anfangswerte führen wir die Abkürzungen

$$\overline{xx}_{\nu\mu} = \langle x_\nu^0 x_\mu^0 \rangle, \quad \overline{pp}_{\nu\mu} = \langle p_\nu^0 p_\mu^0 \rangle, \quad \overline{xp}_{\nu\mu} = \langle \{x_\nu^0, p_\mu^0\} \rangle \quad (3.27)$$

ein und erhalten

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= q_1^2(t, 0) \langle (x^0)^2 \rangle + q_2^2(t, 0) \langle (p^0)^2 \rangle + q_1(t, 0) q_2(t, 0) \langle \{x^0, p^0\} \rangle \\ &+ \xi_x(t) + \kappa_x(t), \end{aligned} \quad (3.28)$$

wobei die Beiträge vom Rauschterm durch

$$\begin{aligned} \xi_x(t) &= \sum_{\nu\mu} \lambda_\nu \lambda_\mu \left(\operatorname{Re} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu) \operatorname{Re} \tilde{q}_2(t, \omega_\mu) \overline{xx}_{\nu\mu} \right. \\ &+ \frac{\operatorname{Im} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu) \operatorname{Im} \tilde{q}_2(t, \omega_\mu)}{\omega_\nu \omega_\mu} \overline{pp}_{\nu\mu} \\ &+ \left. \frac{\operatorname{Re} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu) \operatorname{Im} \tilde{q}_2(t, \omega_\mu)}{\omega_\mu} \overline{xp}_{\nu\mu} \right) \end{aligned} \quad (3.29)$$

und

$$\kappa_x(t) = -2 \sum_{\nu} \lambda_\nu \left(q_1(t, 0) \langle x^0 \rangle + q_2(t, 0) \langle p^0 \rangle \right) \left(\operatorname{Re} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu) \overline{x}_\nu + \frac{\operatorname{Im} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu)}{\omega_\nu} \overline{p}_\nu \right) \quad (3.30)$$

gegeben sind. Analoge Gleichungen ergeben sich für $\langle p^2(t) \rangle$ und $\langle \{x(t), p(t)\} \rangle$.

Um die zweiten Momente von Ort und Impuls in Matrixstruktur zu schreiben, müssen wir die Varianzen bzgl. der Orte, Impulse und der gemischten Terme aller Bad-Oszillatoren definieren:

$$\begin{aligned} (\Delta x)_{\nu\mu}^2 &= \overline{(x_\nu^0 - \langle x_\nu^0 \rangle)(x_\mu^0 - \langle x_\mu^0 \rangle)} = \overline{xx}_{\nu\mu} - \overline{x}_\nu \overline{x}_\mu, \\ (\Delta p)_{\nu\mu}^2 &= \overline{(p_\nu^0 - \langle p_\nu^0 \rangle)(p_\mu^0 - \langle p_\mu^0 \rangle)} = \overline{pp}_{\nu\mu} - \overline{p}_\nu \overline{p}_\mu, \\ (\Delta xp)_{\nu\mu} &= \frac{1}{2} \overline{\{x_\nu^0 - \langle x_\nu^0 \rangle, p_\mu^0 - \langle p_\mu^0 \rangle\}} = \frac{1}{2} \overline{xp}_{\nu\mu} - \overline{x}_\nu \overline{p}_\mu. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Für den Rausch-Beitrag $\xi_x(t)$ erhalten wir damit

$$\begin{aligned} \xi_x(t) &= \left[\sum_{\nu} \lambda_\nu \left(\operatorname{Re} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu) \overline{x}_\nu + \frac{\operatorname{Im} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu)}{\omega_\nu} \overline{p}_\nu \right) \right]^2 \\ &+ \sum_{\nu\mu} \lambda_\nu \lambda_\mu \left(\operatorname{Re} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu) \operatorname{Re} \tilde{q}_2(t, \omega_\mu) (\Delta x)_{\nu\mu}^2 \right. \\ &+ \frac{\operatorname{Im} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu) \operatorname{Im} \tilde{q}_2(t, \omega_\mu)}{\omega_\nu \omega_\mu} (\Delta p)_{\nu\mu}^2 \\ &+ \left. 2 \frac{\operatorname{Re} \tilde{q}_2(t, \omega_\nu) \operatorname{Im} \tilde{q}_2(t, \omega_\mu)}{\omega_\mu} (\Delta xp)_{\nu\mu} \right). \end{aligned} \quad (3.32)$$

Für die Varianzen

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xp} \\ \sigma_{xp} & \sigma_{pp} \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

folgt schließlich die Gleichung (2.59), wenn wir den Beitrag $\mathbf{C}(t)$ durch

$$\mathbf{C}(t) = \sum_{\nu,\mu} \frac{\lambda_\nu \lambda_\mu}{\omega_\nu \omega_\mu} \overline{\mathbf{K}}(t, \omega_\nu) \overline{\Sigma}_{\nu,\mu} \overline{\mathbf{K}}^T(t, \omega_\mu) \quad (3.34)$$

mit

$$\overline{\Sigma}_{\nu,\mu} = \begin{pmatrix} (\Delta x)_{\nu\mu}^2 & (\Delta xp)_{\nu\mu} \\ (\Delta xp)_{\mu\nu} & (\Delta p)_{\nu\mu}^2 \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

definieren.

3.2.3. Konstruktion der propagierenden Funktion

Wir können nun die propagierende Funktion für die reduzierte Dichtematrix des zentralen Oszillators angeben, denn wir wissen, dass Gauß-Zustände des zentralen Oszillators Gauß-förmig bleiben. Die propagierende Funktion muss damit von der Form (2.60) sein, die wir im Abschnitt 2.4 abgeleitet haben.

Durch Übersetzen der Matrizen $\mathbf{K}(t)$ und $\mathbf{C}(t) = \mathbf{C}^T(t)$, sowie des Vektors $\mathbf{k}(t)$ auf die Koeffizienten $a_1(t), \dots, a_9(t)$ erhalten wir die propagierende Funktion von der Form (2.60). Explizit finden wir

$$\begin{aligned} a_4(t) &= \frac{\dot{q}_2(t, 0)}{2q_2(t, 0)} & a_5(t) &= \frac{q_1(t, 0)}{2q_2(t, 0)}, \\ a_6(t) &= \frac{1}{2} \left(\dot{q}_1(t, 0) - \frac{q_1(t, 0)}{q_2(t, 0)} \dot{q}_2(t, 0) - \frac{1}{q_2(t, 0)} \right), \\ a_7(t) &= \frac{1}{2} \left(\dot{q}_1(t, 0) - \frac{q_1(t, 0)}{q_2(t, 0)} \dot{q}_2(t, 0) + \frac{1}{q_2(t, 0)} \right), \\ a_8(t) &= - \sum_{\nu} \lambda_{\nu} \int_0^t \left(\dot{q}_2(t, 0) - \frac{\dot{q}_2(t, 0)}{q_2(t, 0)} q_2(t, \tau) \right) \left(\cos \omega_{\nu} \tau \overline{x}_{\nu} + \frac{\sin \omega_{\nu} \tau}{\omega_{\nu}} \overline{p}_{\nu} \right) d\tau, \\ a_9(t) &= - \sum_{\nu} \lambda_{\nu} \int_0^t \frac{q_2(t, \tau)}{q_2(t, 0)} \left(\cos \omega_{\nu} \tau \overline{x}_{\nu} + \frac{\sin \omega_{\nu} \tau}{\omega_{\nu}} \overline{p}_{\nu} \right) d\tau. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Die Ausdrücke für a_1 , a_2 und a_3 sind sehr lang und werden hier nicht präsentiert.

Im Ergebnis haben wir die vollständige allgemeine propagierende Funktion für den harmonischen Oszillator berechnet, der linear an ein Bad von Oszillatoren koppelt. Wir haben damit das gesamte Problem vollständig für beliebige Anfangszustände durch Bewegungsgleichungen von Operatoren und anschließendes Bilden von Erwartungswerten gelöst. Dabei mussten wir zu keinem Zeitpunkt auf Pfadintegrale zurückgreifen.

Es sei betont, dass unsere Ableitung nicht nur einfacher, sondern sogar allgemeiner als die Berechnung über Pfadintegrale in der Literatur ist. So leiten etwa

C. Zerbe und P. Hänggi in Referenz [14] die propagierende Funktion mittels Pfadintegrale für einen parametrisch getriebenen Oszillator ab, müssen dabei aber die Annahme thermischer Anfangszustände machen. Dadurch führt die in [14] angegebene propagierende Funktion zum Beispiel bei der Wahl $\mathbf{x}_0 = 0$ auf das Ergebnis $\mathbf{x}(t) = 0$. Die Erwartungswerte von Ort und Impuls beinhalten nur den homogenen Anteil $\mathbf{x}(t) = \mathbf{K}(t)\mathbf{x}_0$ mit einer entsprechenden Matrix $\mathbf{K}(t)$. Anhand der Gleichung (3.25) sehen wir, dass die Wahl $\mathbf{k}(t) = 0$ der Vernachlässigung der Rausch-Terme entspricht. Auch die resultierenden Gleichungen für die Varianzen haben in Referenz [14] eine vereinfachte Form, da sie kein Rauschen beinhalten. Die von uns berechnete propagierende Funktion ist dagegen für beliebige Anfangszustände gültig.

3.3. Die Lösung des Modells in wichtigen Spezialfällen

Unsere Ableitung ist bisher vollkommen allgemein, und macht keine Annahmen über die Zeitabhängigkeit der Systemparameter oder die Anfangspräparation. Vereinfachungen der zentralen Gleichung (3.13) ergeben sich in den physikalisch wichtigen Fällen konstanter Systemparameter und eines thermischen Anfangszustandes des Bades.

3.3.1. Der Fall konstanter Koeffizienten

Im Spezialfall konstanter Koeffizienten in der Bewegungsgleichung (3.13), also konstanter Frequenz Ω des zentralen Oszillators, vereinfacht sich das Lösungsschema. Für die Lösungen $q_1(t, t')$ und $q_2(t, t')$ der klassischen Bewegungsgleichung (3.16) folgt: Wenn $q(t)$ die Lösung von

$$\ddot{q}(t) = -\Omega^2 q(t) + \int_0^t K(t - \tau)q(\tau) d\tau \quad (3.37)$$

zu den Anfangsbedingungen $q(t) = 0$ für $t < 0$ und $q(0) = 0$ bzw. $\dot{q}(0) = 1$ bezeichnet, dann gilt $q_2(t, t') = q(t - t')$ und $q_1(t, t') = \dot{q}(t - t')$.

Um diese Aussage zu verifizieren müssen wir zeigen, dass die so definierten Funktionen $q_1(t, t')$ und $q_2(t, t')$ die Bewegungsgleichung (3.16) zu den entsprechenden Anfangsbedingungen erfüllen.

Dazu betrachten wir zunächst die Funktion $q_2(t, t')$. Wegen $\ddot{q}_2(t, t') = \ddot{q}(t - t')$ erfüllt sie die Bewegungsgleichung und die Anfangsbedingungen sind $q_2(t, t) = q(0) = 0$ und $\dot{q}_2(t, t) = \dot{q}(0) = 1$.

Die Bewegungsgleichung für die Funktion $q_1(t, t')$ erhalten wir aus (3.37) durch Differenzieren nach der Zeit

$$\begin{aligned} \ddot{q}_1(t, t') &= \frac{d}{dt} \ddot{q}(t - t') = -\Omega^2 \dot{q}(t - t') + \frac{d}{dt} \int_0^{t-t'} K(t - t' - \tau)q(\tau) d\tau \\ &= -\Omega^2 q_1(t, t') + K(0)q(t - t') + \int_0^{t-t'} \frac{dK(t - t' - \tau)}{dt} q(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (3.38)$$

3.3. Die Lösung des Modells in wichtigen Spezialfällen

Der mittlere Term verschwindet wegen $K(0) = 0$. Das Integral können wir durch die Substitution $\tau' = \tau + t'$ umformen. Anschließend lassen wir den Strich an τ' weg und nutzen $dK(t - \tau)/dt = -dK(t - \tau)/d\tau$ aus. Zuletzt integrieren wir einmal partiell und erhalten

$$\begin{aligned}\ddot{q}_1(t, t') &= -\Omega^2 q_1(t, t') - \int_{t'}^t \frac{dK(t - \tau)}{d\tau} q(\tau - t') d\tau \\ &= -\Omega^2 q_1(t, t') - \left[K(t - \tau) q(\tau - t') \right]_{\tau=t'}^t + \int_{t'}^t K(t - \tau) \frac{dq(\tau - t')}{d\tau} d\tau \\ &= -\Omega^2 q_1(t, t') + \int_{t'}^t K(t - \tau) q_1(\tau, t') d\tau.\end{aligned}\tag{3.39}$$

Die Bewegungsgleichung für $q_1(t, t') = \dot{q}(t - t')$ entspricht der klassischen Gleichung (3.16). Bei der Ableitung dieser Gleichung war die Zeitunabhängigkeit von Ω^2 entscheidend. Die Anfangswerte für $q_1(t, t') = \dot{q}(t - t')$ sind gerade die in Abschnitt 3.2 geforderten, denn

$$\begin{aligned}q_1(t, t) &= \dot{q}(0) = 1 \\ \dot{q}_1(t, t) &= \ddot{q}(0) = -\Omega^2 q(0) + \int_0^0 K(-\tau) q(\tau) d\tau = -\Omega^2 q(0) = 0.\end{aligned}\tag{3.40}$$

Mit der vereinfachten Lösung $q(t)$ der Bewegungsgleichung (3.37) können wir die Lösung (3.17) umschreiben und erhalten

$$x(t) = \dot{q}(t)x^0 + q(t)p^0 - \int_0^t q(t - \tau)N(\tau) d\tau.\tag{3.41}$$

Bei der Bildung von Erwartungswerten müssen wir die Definition der partiellen Fourier-Transformation (3.22) anpassen:

$$\tilde{q}_2(t, \omega) = \int_0^t q(t - \tau)e^{i\omega\tau} d\tau = e^{i\omega t} \int_0^t q(\tau)e^{-i\omega\tau} d\tau = e^{i\omega t} \tilde{q}(t, \omega),\tag{3.42}$$

wobei wir

$$\tilde{q}(t, \omega) = \int_0^t q(\tau)e^{-i\omega\tau} d\tau\tag{3.43}$$

definiert haben. Für die Funktion $\dot{\tilde{q}}_2(t, \omega)$ gilt entsprechend

$$\dot{\tilde{q}}_2(t, \omega) = e^{i\omega t} \int_0^t \dot{q}(\tau)e^{-i\omega\tau} d\tau = e^{i\omega t} \dot{\tilde{q}}(t, \omega)\tag{3.44}$$

mit

$$\dot{\tilde{q}}(t, \omega) = \int_0^t \dot{q}(\tau)e^{-i\omega\tau} d\tau.\tag{3.45}$$

3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus

Wir müssen beachten, dass die durch (3.45) definierte Funktion $\dot{\tilde{q}}(t, \omega)$ nicht durch zeitliches Ableiten aus $\tilde{q}(t, \omega)$ hervorgeht, wie es bei den Funktionen $\dot{\tilde{q}}_2(t, \omega)$ und $\tilde{q}_2(t, \omega)$ der Fall war. Wir müssen $\dot{\tilde{q}}(t, \omega)$ vielmehr als Abkürzung für die Definition in Gleichung (3.45) sehen. Durch eine partielle Integration der Definition (3.45) folgt der Zusammenhang

$$\dot{\tilde{q}}(t, \omega) = q(t)e^{-i\omega t} + i\omega\tilde{q}(t, \omega). \quad (3.46)$$

Für den Erwartungswert des Ortes im Spezialfall konstanter Koeffizienten erhalten wir dann

$$\langle x(t) \rangle = \dot{q}(t) \langle x^0 \rangle + q(t) \langle p^0 \rangle - \sum_{\nu} \lambda_{\nu} \left(\operatorname{Re} \tilde{q}(t, \omega_{\nu}) e^{i\omega_{\nu} t} \bar{x}_{\nu} + \frac{\operatorname{Im} \tilde{q}(t, \omega_{\nu}) e^{i\omega_{\nu} t}}{\omega_{\nu}} \bar{p}_{\nu} \right). \quad (3.47)$$

In völliger Analogie können die anderen Erwartungswerte auf die Funktionen $q(t)$, $\tilde{q}(t, \omega)$ und $\dot{\tilde{q}}(t, \omega)$ umgeschrieben werden.

Explizit kann die vereinfachte Lösung $q(t)$ der Bewegungsgleichung (3.37) im Fall konstanter Koeffizienten durch die Laplace-Transformation

$$\mathcal{L}(f(t)) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt = F(s), \quad (3.48)$$

berechnet werden, die einer gegebenen Funktion $f(t)$ mit $t \geq 0$, $t \in \mathbb{R}$ eine Funktion $F(s)$ mit $s \in \mathbb{C}$ zuordnet. Das Integral (3.48) konvergiert sicher, wenn $f(t)$ stetig ist und für $t \rightarrow \infty$ nicht stärker als $\exp[\alpha t]$ mit $\operatorname{Re} s > \alpha > 0$ divergiert. Für $\operatorname{Re} s \rightarrow \infty$ gilt $F(s) \rightarrow 0$. Die inverse Transformation ist

$$\mathcal{L}^{-1}(F(s)) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{st} F(s) ds = \begin{cases} f(t) & \text{für } t > 0 \\ 0 & \text{für } t < 0 \end{cases}, \quad (3.49)$$

wobei $\operatorname{Re} s = c > \alpha$.

Wenden wir die Transformation (3.48) auf die klassische Gleichung (3.37) an, indem wir die Gleichung mit dem Faktor $\exp[-st]$ multiplizieren und über positive Zeiten integrieren, so erhalten wir

$$\int_0^{\infty} e^{-st} \ddot{q} dt = -\Omega^2 \int_0^{\infty} e^{-st} q(t) dt + \int_0^{\infty} e^{-st} \int_0^t K(t-\tau) q(\tau) d\tau dt. \quad (3.50)$$

Zweimalige partielle Integration der linken Seite und Ausnutzen der Anfangsbedingungen $q(0) = 0$ und $\dot{q}(0) = 1$ liefert

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-st} \ddot{q} dt &= e^{-st} \dot{q}(t) \Big|_{t=0}^{\infty} + s \int_0^{\infty} e^{-st} \dot{q}(t) dt \\ &= -1 + s e^{-st} q(t) \Big|_{t=0}^{\infty} + s^2 \int_0^{\infty} e^{-st} q(t) dt \\ &= -1 + s^2 \mathcal{L}(q(t)) = -1 + s^2 F(s), \end{aligned} \quad (3.51)$$

wobei wir die Laplace-Transformierte der Lösung $q(t)$ mit $F(s)$ bezeichnet haben.

Für den zweiten Term auf der rechten Seite von (3.50) erhalten wir

$$\int_0^\infty e^{-st} \int_0^t K(t-\tau)q(\tau) d\tau dt = \sum_\nu \frac{\lambda_\nu^2}{\omega_\nu} \int_0^\infty e^{-st} \int_0^t \sin \omega_\nu(t-\tau)q(\tau) d\tau dt. \quad (3.52)$$

Durch zweimalige partielle Integration folgt

$$\begin{aligned} I(s) &= \int_0^\infty e^{-st} \int_0^t \sin \omega_\nu(t-\tau)q(\tau) d\tau dt \\ &= -\frac{1}{s} e^{-st} \int_0^t \sin \omega_\nu(t-\tau)q(\tau) d\tau \Big|_{t=0}^\infty + \frac{\omega_\nu}{s} \int_0^\infty e^{-st} \int_0^t \cos \omega_\nu(t-\tau)q(\tau) d\tau dt \\ &= \frac{\omega_\nu}{s^2} F(s) - \frac{\omega_\nu^2}{s^2} I(s) = \frac{\omega_\nu}{s^2} \frac{s^2}{s^2 + \omega_\nu^2} F(s) = \frac{\omega_\nu}{s^2 + \omega_\nu^2} F(s). \end{aligned} \quad (3.53)$$

Wir setzen (3.51) und (3.53) in (3.50) ein und erhalten

$$F(s) = \left(s^2 + \Omega^2 - \sum_\nu \frac{\lambda_\nu^2}{s^2 + \omega_\nu^2} \right)^{-1}. \quad (3.54)$$

Für eine konstante Frequenz des zentralen Oszillators algebraisiert die klassische Bewegungsgleichung (3.16) bei Laplace-Transformation. Die exakte Lösung $q(t)$ der klassischen Gleichung ist die inverse Laplace-Transformation von (3.54).

3.3.2. Das thermische Bad

Ein weiterer sehr wichtiger Spezialfall ist die Präparation des Bades zum Anfangszeitpunkt $t_0 = 0$ im thermischen Gleichgewicht. Dann ist der Anfangszustand des Gesamtsystems durch eine Dichtematrix $\gamma_0 = \rho_0 \otimes \Omega_B$ mit der kanonischen Dichtematrix $\Omega_B = \exp[-\beta H_B]/Z$ und der Zustandssumme $Z = \text{Tr} \exp[-\beta H_B]$, sowie dem Hamilton-Operator H_B des Bades aus (3.2) charakterisiert.

Für einen einzelnen Oszillator mit $H_0 = p^2/2 + \omega^2 x^2/2$ im thermischen Gleichgewicht gilt bekanntlich

$$\begin{aligned} E(\omega) &= \langle H_0 \rangle = \frac{\omega}{2} \coth \frac{\omega}{2T}, \\ \langle x \rangle &= \langle p \rangle = 0, \quad \langle \{x, p\} \rangle = 0, \\ \omega^2 \langle x^2 \rangle &= \langle p^2 \rangle = E(\omega). \end{aligned} \quad (3.55)$$

Setzen wir diese Werte für die Bad-Oszillatoren in die Gleichungen (3.21) und (3.28) ein, so verschwinden die Beiträge von den Rausch-Termen. Die Erwartungswerte von Ort und Impuls folgen den klassischen Trajektorien, die durch die Lösung von Gleichung (3.16) gegeben sind.

Der einzige nichtverschwindende Beitrag zu den Rauschtermen in den Varianzen geht aus den unabhängigen Erwartungswerten für jeden einzelnen Oszillator

3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus

hervor. Es gilt $\overline{x x_{\nu\mu}} = (E(\omega_\nu)/\omega_\nu^2) \delta_{\nu\mu}$, $\overline{p p_{\nu\mu}} = E(\omega_\nu) \delta_{\nu\mu}$ und $\overline{x p_{\nu\mu}} = 0$, sowie $\overline{x x_{0\nu}} = \langle x^0 \rangle \overline{x_\nu} = 0$, $\overline{p p_{0\nu}} = 0$, $\overline{x p_{0\nu}} = 0$ und $\overline{p x_{0\nu}} = 0$.

Damit erhalten wir

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{K}(t)\mathbf{x}_0 \quad (3.56)$$

und mit der Definition (2.17)

$$\Sigma(t) = \mathbf{K}(t)\Sigma_0\mathbf{K}^T(t) + \sum_{\nu} \frac{\lambda_{\nu}^2}{\omega_{\nu}^2} \overline{\mathbf{C}}^{\nu}(t)E(\omega_{\nu}) \quad (3.57)$$

mit der Matrix $\mathbf{K}(t)$ aus (3.24) und

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{C}}_{xx}^{\nu}(t) &= |\tilde{q}_2(t, \omega_{\nu})|^2, \\ \overline{\mathbf{C}}_{xp}^{\nu}(t) &= \operatorname{Re} \tilde{q}_2(t, \omega_{\nu}) \operatorname{Re} \dot{\tilde{q}}_2(t, \omega_{\nu}) + \operatorname{Im} \tilde{q}_2(t, \omega_{\nu}) \operatorname{Im} \dot{\tilde{q}}_2(t, \omega_{\nu}), \\ \overline{\mathbf{C}}_{pp}^{\nu}(t) &= |\dot{\tilde{q}}_2(t, \omega_{\nu})|^2. \end{aligned} \quad (3.58)$$

3.4. Der Übergang zum kontinuierlichen Bad

In den bisherigen Gleichungen stehen Summen über diskrete Frequenzen der Bad-Oszillatoren. Für ein endliches Bad findet irreversibles Verhalten nur für Zeiten statt, die klein zum inversen Abstand $1/|\omega_{\nu+1} - \omega_{\nu}|$ der Bad-Frequenzen sind. Um ein wirkliches dissipatives System mit irreversiblen Verhalten für alle Zeiten zu beschreiben, müssen wir den Übergang vom diskreten Bad zum Kontinuum durchführen. Das heißt, wir wählen eine große Anzahl von Bad-Oszillatoren $N \rightarrow \infty$ und lassen dabei das Spektrum der Eigenfrequenzen immer dichter werden $|\omega_{\nu+1} - \omega_{\nu}| \rightarrow 0$. In diesem Grenzfall konvergiert die Zustandsdichte

$$D(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\nu=1}^N \delta(\omega - \omega_{\nu}) \quad (3.59)$$

gegen eine stetige Funktion. Um endliche Resultate zu erhalten, müssen die Kopplungskonstanten $\lambda_{\nu} \propto N^{-1/2}$ skalieren. Wir setzen daher $\lambda_{\nu} = \lambda(\omega_{\nu})/N^{1/2}$ mit einer Kopplungsstärkefunktion $\lambda(\omega)$. Wir können dann die Spektralfunktion des Bades

$$J(\omega) = D(\omega)\lambda^2(\omega) \quad (3.60)$$

einführen.

Mit der so definierten Zustandsdichte können Summen $(1/N) \sum_{\nu} f(\omega_{\nu})$ in Integrale $\int D(\omega)f(\omega) d\omega$ umgeschrieben werden.

Führen wir diesen Grenzfall für die Positivitätsbedingung explizit durch, so erhalten wir das Ergebnis

$$\begin{aligned} \Omega^2 - \sum_{\nu} \frac{\lambda_{\nu}^2}{\omega_{\nu}^2} &= \Omega^2 - \frac{1}{N} \sum_{\nu} \frac{\lambda^2(\omega_{\nu})}{\omega_{\nu}^2} = \Omega^2 - \int D(\omega) \frac{\lambda^2(\omega)}{\omega^2} d\omega \\ &= \Omega^2 - \int \frac{J(\omega)}{\omega^2} d\omega \geq 0. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Für den Dämpfungskern finden wir

$$K(t) = \sum_{\nu} \frac{\lambda_{\nu}^2}{\omega_{\nu}} \sin \omega_{\nu} t = \int \frac{J(\omega)}{\omega} \sin \omega t d\omega. \quad (3.62)$$

Offenbar ist der Dämpfungskern $K(t)$ die Sinus-Fourier-Transformierte von $J(\omega)/\omega$.

3.4.1. Berechnung der Erwartungswerte

Wir können nun den Übergang zum kontinuierlichen Bad für die Erwartungswerte von Ort und Impuls explizit durchführen. Dazu müssen wir das Verhalten von \bar{x}_{ν} , \bar{p}_{ν} für $N \rightarrow \infty$ spezifizieren. Wir beginnen mit dem Ansatz

$$\bar{x}_{\nu} = \frac{1}{\sqrt{N}} \bar{x}(\omega_{\nu}) \quad \text{und} \quad \bar{p}_{\nu} = \frac{1}{\sqrt{N}} \bar{p}(\omega_{\nu}), \quad (3.63)$$

mit integrierbaren Funktionen $\bar{x}(\omega)$ und $\bar{p}(\omega)$. Die Skalierung mit $1/\sqrt{N}$ garantiert einen endlichen Erwartungswert des Wechselwirkungsterms $x \sum_{\nu} \lambda_{\nu} x_{\nu}$.

Unter dieser Annahme kann für $N \rightarrow \infty$ die Summe über ν in Gleichung (3.21) als Integral geschrieben werden. Mit $\bar{\mathbf{x}}(\omega) = (\bar{x}(\omega), \bar{p}(\omega))^T$ folgt

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{K}(t) \mathbf{x}_0 - \int D(\omega) \frac{\lambda(\omega)}{\omega} \bar{\mathbf{K}}(t, \omega) \bar{\mathbf{x}}(\omega) d\omega. \quad (3.64)$$

Bei der Durchführung des Übergangs zum Kontinuum für die Varianzen beschränken wir uns auf den einfachsten Fall unkorrelierter Anfangszustände, so dass für $\mu \neq \nu$ gilt

$$(\Delta x)_{\nu\mu}^2 = (\Delta p)_{\nu\mu}^2 = (\Delta xp)_{\nu\mu} = 0. \quad (3.65)$$

Um die Schreibweise zu vereinfachen definieren wir $(\Delta x)_{\nu\nu}^2 \equiv \bar{x}_{\nu}^2$, $(\Delta p)_{\nu\nu}^2 \equiv \bar{p}_{\nu}^2$ und $(\Delta xp)_{\nu\nu} \equiv \bar{x}\bar{p}_{\nu}$.

Analog zum Ansatz für das Verhalten der ersten Momente der Bad-Observablen zur Zeit $t = 0$ definieren wir anschließend integrierbare Funktionen $\bar{x}^2(\omega)$, $\bar{p}^2(\omega)$ und $\bar{x}\bar{p}(\omega)$ durch

$$\bar{x}_{\nu}^2 = \bar{x}^2(\omega_{\nu}), \quad \bar{p}_{\nu}^2 = \bar{p}^2(\omega_{\nu}), \quad \bar{x}\bar{p}_{\nu} = \bar{x}\bar{p}(\omega_{\nu}). \quad (3.66)$$

Diese schreiben wir wie in (3.35) in eine symmetrische Matrix

$$\bar{\Sigma}(\omega) = \begin{pmatrix} \bar{x}^2(\omega) & \bar{x}\bar{p}(\omega) \\ \bar{x}\bar{p}(\omega) & \bar{p}^2(\omega) \end{pmatrix} \quad (3.67)$$

und folgern

$$\mathbf{C}(t) = \int \frac{J(\omega)}{\omega^2} \bar{\mathbf{K}}(t, \omega) \bar{\Sigma}(\omega) \bar{\mathbf{K}}^T(t, \omega) d\omega. \quad (3.68)$$

3.4.2. Der Fall Ohmscher Dämpfung

Ein spezieller Fall der Kopplung eines zentralen Oszillators an ein kontinuierliches Bad ist der Fall Ohmscher Dämpfung. Er ist durch die Wahl der Spektralfunktion als

$$J(\omega) = \lambda \omega^2 e^{-\omega/\omega_c} \quad (3.69)$$

gegeben, wobei wir die Regularisierung $\exp[-\omega/\omega_c]$ hinzugefügt haben, damit das Integral in Gleichung (3.61) konvergiert. Der reine Ohmsche Fall ergibt sich dann im Grenzfall $\omega_c \rightarrow \infty$. Bei der Ausführung dieses Grenzfalls müssen wir beachten, dass die Positivitätsbedingung

$$\Omega^2 \geq \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega^2} d\omega = \lambda \int_0^\infty e^{-\omega/\omega_c} d\omega = -\lambda \omega_c e^{-\omega/\omega_c} \Big|_{\omega=0}^\infty = \lambda \omega_c \quad (3.70)$$

gleichzeitig $\lambda \rightarrow 0$ fordert.

Für den Dämpfungskern (3.62) folgt

$$\begin{aligned} K(t) &= \lambda \int_0^\infty \omega \sin \omega t e^{-\omega/\omega_c} d\omega = -\lambda \frac{d}{dt} \int_0^\infty \cos \omega t e^{-\omega/\omega_c} d\omega \\ &= -\lambda \frac{d}{dt} \frac{\omega_c}{1 + \omega_c^2 t^2} = \frac{2\lambda \omega_c^3 t}{(1 + \omega_c^2 t^2)^2}. \end{aligned} \quad (3.71)$$

In der klassischen Bewegungsgleichung (3.37) tritt der Dämpfungskern unter einem Integral auf:

$$\int_0^t K(t-\tau)q(\tau) d\tau = -\frac{\lambda \omega_c}{1 + \omega_c^2 \tau^2} q(t-\tau) \Big|_{\tau=0}^t + \frac{\pi \lambda}{2} \int_0^t \frac{2\omega_c}{\pi(1 + \omega_c^2 \tau^2)} \frac{dq(t-\tau)}{d\tau} d\tau. \quad (3.72)$$

Mit der Anfangsbedingung $q(0) = 0$ liefert der erste Term den Beitrag $\lambda \omega_c q(t)$, welcher wie erwähnt auch im Grenzfall $\omega_c \rightarrow \infty$ endlich bleibt. Den zweiten Term können wir vereinfachen, denn für $\omega_c \rightarrow \infty$ gilt

$$\frac{2\omega_c}{\pi(1 + \omega_c^2 \tau^2)} = \begin{cases} 0 & \text{für } \tau > 0 \\ \infty & \text{für } \tau = 0 \end{cases}, \quad \text{so dass} \quad \frac{2\omega_c}{\pi(1 + \omega_c^2 \tau^2)} \rightarrow \delta(\tau), \quad (3.73)$$

denn

$$\lim_{\omega_c \rightarrow \infty} \int_0^\infty \frac{2\omega_c}{\pi(1 + \omega_c^2 t^2)} dt = \lim_{\omega_c \rightarrow \infty} \frac{2}{\pi} \arctan \omega_c t \Big|_{t=0}^\infty = 1. \quad (3.74)$$

Führen wir den Grenzfall $\omega_c \rightarrow \infty$ im zweiten Term von (3.72) durch und beachten dabei $dq(t-\tau)/d\tau = -dq(t-\tau)/dt$, so folgt

$$\int_0^t K(t-\tau)q(\tau) d\tau = \lambda \omega_c q(t) - \frac{\pi \lambda}{2} \dot{q}(t). \quad (3.75)$$

Mit den Abkürzungen $\tilde{\Omega}^2 = \Omega^2 - \lambda \omega_c$ und $\gamma = \pi \lambda / 4$ lautet die für Ohmsche Dämpfung resultierende Bewegungsgleichung also

$$\ddot{q}(t) = -\tilde{\Omega}^2 q(t) - 2\gamma \dot{q}(t). \quad (3.76)$$

Es ist die Differentialgleichung eines klassischen gedämpften harmonischen Oszillators. Damit ist der Fall Ohmscher Dämpfung mit der Behandlung im Rahmen der Lindblad-Theorie vergleichbar. In dieser Beschreibung war die Dämpfung des harmonischen Oszillators über einen Term $-2\lambda\dot{x}$ in der Gleichung für die ersten Momente gegeben. Andererseits gibt es in der System-Bad-Beschreibung auch im Ohmschen Fall noch Rausch-Beiträge, die in der Lindblad-Beschreibung nicht enthalten waren.

Für eine konstante Frequenz des zentralen Oszillators ist die Lösung der Gleichung (3.76) bekannt und lautet mit der Definition $\tilde{\omega}^2 = \tilde{\Omega}^2 - \gamma^2$:

$$q(t) = \frac{\sin \tilde{\omega}t}{\tilde{\omega}} e^{-\gamma t}, \quad \dot{q}(t) = \left(\cos \tilde{\omega}t - \frac{\gamma}{\tilde{\omega}} \sin \tilde{\omega}t \right) e^{-\gamma t}. \quad (3.77)$$

Statt die Bewegungsgleichung (3.76) direkt zu lösen können wir auch die Laplace-Transformation anwenden und erhalten

$$F(s) = \left(s^2 + \Omega^2 - \lambda\omega_c + \frac{\pi\lambda}{2}s \right)^{-1} = \left((s + \gamma)^2 + \tilde{\omega}^2 \right)^{-1}, \quad (3.78)$$

was nach Rücktransformation ebenfalls die Lösung (3.77) ergibt.

Für die partiell Fourier-transformierte Funktion $\tilde{q}(t, \omega)$ folgt damit

$$\tilde{q}(t, \omega) = \frac{1}{(\gamma + i\omega)^2 + \tilde{\omega}^2} \left(1 - \cos \tilde{\omega}t e^{-(\gamma+i\omega)t} - \frac{\gamma + i\omega}{\tilde{\omega}} \sin \tilde{\omega}t e^{-(\gamma+i\omega)t} \right). \quad (3.79)$$

Im Ergebnis haben wir bis auf einige Frequenzintegrale die explizite Lösung des Problems für den Fall Ohmscher Dämpfung berechnet. Die Erwartungswerte von Ort und Impuls des zentralen Oszillators beschreiben gedämpfte Schwingungen, die von den Rausch-Beiträgen der Bad-Oszillatoren überlagert werden.

Wir haben nun also die vollständige Lösung für den harmonischen Oszillator im System-Bad-Formalismus in der Hand. Dabei haben wir Bewegungsgleichungen für System-Operatoren gelöst und durch Bilden von Erwartungswerten die propagierende Funktion konstruiert. Durch den Übergang zum kontinuierlichen Bad haben wir ein wirkliches dissipatives System mit irreversiblen Verhalten für alle Zeiten erhalten.

3.5. Das Beispiel der linearen Kette

Wir betrachten im Folgenden eine lineare Kette von Oszillatoren, die harmonisch an ihre Ruhelage gebunden und durch Federn untereinander gekoppelt sind (Abb. 3.2). Die klassische Lösung dieses Problems wurde von Robertson und Huerta [23] diskutiert. Eine quantenmechanische Behandlung hat Agarwal [24] durchgeführt. Beide Ansätze betrachten alle Oszillatoren als gleichwertig in dem Sinne, dass die Federkonstanten und harmonischen Potentiale für alle Oszillatoren identisch sind.

Wir werden diese Einschränkung fallen lassen, indem wir einen Oszillator aus der Kette herausgreifen. Diesen betrachten wir als zentralen Oszillator. Das Bad ist dann durch zwei halbusendliche Ketten gegeben. Die Frequenz des zentralen Oszillators und die Federn, die den zentralen Oszillator an seine nächsten Nachbarn koppeln, wählen wir unabhängig von den entsprechenden Größen der Bad-Oszillatoren.

3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus

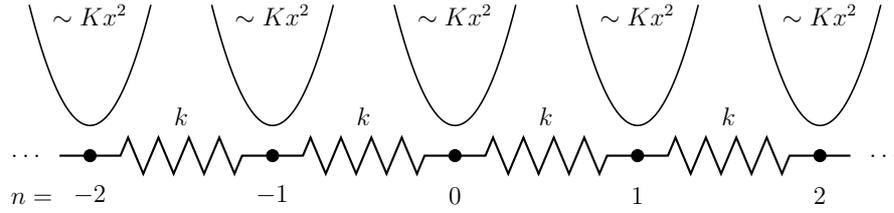


Abbildung 3.2.: Unendliche lineare Kette von Oszillatoren, von denen jeder harmonisch ($\sim Kx^2$) an seine Ruhelage gebunden und durch eine Feder (Federkonstante k) mit seinen nächsten Nachbarn gekoppelt ist.

3.5.1. Das Modell

Der Hamilton-Operator der unendlichen linearen Kette identischer Oszillatoren ist durch

$$H = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{p_n^2}{2} + \frac{k}{2}(x_{n+1} - x_n)^2 + \frac{K}{2}x_n^2 \right] \quad (3.80)$$

gegeben. Um ihn in die Form des Hamilton-Operators (3.4) des System-Bad-Modells zu bringen, müssen wir das Bad auf Eigenmoden transformieren. Dazu berechnen wir Bewegungsgleichungen im Heisenberg-Bild und erhalten

$$\begin{aligned} \dot{x}_l &= -i[x_l, H] = -\frac{i}{2} \sum_n [x_l, p_n^2] = -\frac{i}{2} \sum_n 2ip_n \delta_{n,l} = p_l, \\ \dot{p}_l &= -i[p_l, H] = -i\frac{k}{2} \sum_n [p_l, (x_{n+1} - x_n)^2] - i\frac{K}{2} \sum_n [p_l, x_n^2], \end{aligned} \quad (3.81)$$

so dass mit $[p_l, x_j x_k] = x_j [p_l, x_k] + [p_l, x_j] x_k = -i(x_j \delta_{k,l} + x_k \delta_{j,l})$ die Bewegungsgleichungen

$$\ddot{x}_l = \dot{p}_l = -(2k + K)x_l + k(x_{l+1} + x_{l-1}) \quad (3.82)$$

für $l = -\infty, \dots, \infty$ folgen. Wir definieren $\Omega^2 = 2k + K$ und $\omega_0^2 = k$ und verbleiben mit

$$\ddot{x}_l = \dot{p}_l = -\Omega^2 x_l + \omega_0^2 (x_{l+1} + x_{l-1}). \quad (3.83)$$

Als zentralen Oszillator wählen wir den mit $l = 0$. Die Grundfrequenz des zentralen Oszillators sei Ω_c . Die Frequenz, die der Kopplung des zentralen Oszillators an seine nächsten Nachbarn zugeordnet ist bezeichnen wir mit ω_c . Es folgen der Hamilton-Operator

$$H = \frac{p_0^2}{2} + \frac{\Omega_c^2}{2} x_0^2 - \omega_c^2 x_0 (x_{-1} + x_1) + \sum_{\substack{n=-\infty, \\ n \neq 0}}^{\infty} \left[\frac{p_n^2}{2} + \frac{\Omega^2}{2} x_n^2 \right] - \omega_0^2 \sum_{\substack{n=-\infty, \\ n \neq -1, 0}}^{\infty} x_n x_{n+1}, \quad (3.84)$$

und die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \ddot{x}_{\pm l} &= -\Omega^2 x_{\pm l} + \omega_0^2 (x_{\pm l+1} + x_{\pm l-1}) & \text{für } l \geq 2, \\ \ddot{x}_{\pm 1} &= -\Omega^2 x_{\pm 1} + \omega_0^2 x_{\pm 2} + \omega_c^2 x_0, \\ \ddot{x}_0 &= -\Omega_c^2 x_0 + \omega_c^2 (x_1 + x_{-1}). \end{aligned} \quad (3.85)$$

3.5.2. Lösung des Modells im System-Bad-Formalismus

Wir diskutieren zunächst eine endliche Kette mit offenen Randbedingungen. Diese wird uns die Normierung der Eigenmoden und Zustände liefern. Anschließend werden wir zur unendlichen Kette übergehen.

Eigenmoden der endlichen offenen Kette

Wir betrachten $2N + 1$ Oszillatoren mit $l = -N, \dots, -1, 0, 1, \dots, N$. Als zentralen Oszillator wählen wir den bei $l = 0$. Mit $\mathbf{q} = (x_{-N}, \dots, x_{-1}, x_1, \dots, x_N)^T$ lauten die linearen inhomogenen Bewegungsgleichungen der $2N$ Bad-Oszillatoren

$$\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{A}\mathbf{q} + \mathbf{b}, \quad (3.86)$$

wobei die Matrix \mathbf{A} durch die Nullmatrix $\mathbf{0}$ und eine Matrix \mathbf{B} gemäß

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{B} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{pmatrix} \quad (3.87)$$

mit

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} -\Omega^2 & \omega_0^2 & & 0 \\ \omega_0^2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \omega_0^2 \\ 0 & & \omega_0^2 & -\Omega^2 \end{pmatrix} \quad (3.88)$$

gegeben ist. Dabei haben wir den Hamilton-Operator gemäß

$$H = \frac{p_0^2}{2} + \frac{\Omega_c^2}{2} x_0^2 - \omega_c^2 x_0 (x_{-1} + x_1) + \sum_{\substack{n=-N, \\ n \neq 0}}^N \left[\frac{p_n^2}{2} + \frac{\Omega^2}{2} x_n^2 \right] - \omega_0^2 \sum_{\substack{n=-N, \\ n \neq -1, 0}}^{N-1} x_n x_{n+1} \quad (3.89)$$

gewählt. Wir schneiden das System also nicht bei einer realen Feder ab, sondern so, dass die Struktur der Matrix erhalten bleibt.

Mit Hilfe der Eigenwerte λ_j^B und Eigenvektoren \mathbf{v}_j der Matrix \mathbf{B}

$$\lambda_j^B = -\Omega^2 + 2\omega_0^2 \cos\left(\frac{\pi j}{N+1}\right) \quad \text{bzw.} \quad v_{j,l} = \sin\left(\frac{\pi j l}{N+1}\right) \quad (3.90)$$

für $j, l = 1, \dots, N$ lassen sich die Eigenwerte λ_j und Eigenvektoren $\mathbf{v}_{j,1}$ und $\mathbf{v}_{j,2}$ der Matrix \mathbf{A} berechnen. Wir erhalten

$$\lambda_j = -\Omega^2 + 2\omega_0^2 \cos\left(\frac{\pi j}{N+1}\right), \quad \text{je 2-fach entartet,}$$

$$\mathbf{v}_{j,1} = \begin{pmatrix} \sin\left(\frac{\pi j}{N+1}\right) \\ \vdots \\ \sin\left(\frac{\pi j N}{N+1}\right) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_{j,2} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \sin\left(\frac{\pi j}{N+1}\right) \\ \vdots \\ \sin\left(\frac{\pi j N}{N+1}\right) \end{pmatrix}. \quad (3.91)$$

3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus

Es folgt $\sqrt{\lambda_j} = \pm i \sqrt{\Omega^2 - 2\omega_0^2 \cos\left(\frac{\pi j}{N+1}\right)} = \pm i\omega_j$ und damit für die Eigenfrequenzen

$$\omega_j^2 = \Omega^2 - 2\omega_0^2 \cos\left(\frac{\pi j}{N+1}\right). \quad (3.92)$$

Die Norm von \mathbf{v}_j ist

$$|\mathbf{v}_j| = \sqrt{\sum_{l=1}^N \sin^2\left(\frac{\pi j l}{N+1}\right)} = \sqrt{\frac{N+1}{2}} = |\mathbf{v}_{j,1}| = |\mathbf{v}_{j,2}|. \quad (3.93)$$

Die Lösung der homogenen Bewegungsgleichung lässt sich damit in der Form

$$\mathbf{q}(t) = \sum_{j=1}^N \left[(c_{j,1} e^{i\omega_j t} + c_{j,1}^* e^{-i\omega_j t}) \mathbf{v}_{j,1} + (c_{j,2} e^{i\omega_j t} + c_{j,2}^* e^{-i\omega_j t}) \mathbf{v}_{j,2} \right] \quad (3.94)$$

schreiben. Bezeichnen wir mit $\xi_j, \xi_{-j}, \chi_j, \chi_{-j}$ ($j = 1, \dots, N$) Komponenten von Vektoren bzgl. der $\mathbf{v}_{j,1}, \mathbf{v}_{j,2}$ -Basis, gilt für die Transformation auf die Eigenmoden des Systems

$$x_l = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{j=1}^N v_{j,|l|} \xi_{\text{sign}(l)j}, \quad p_l = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{j=1}^N v_{j,|l|} \chi_{\text{sign}(l)j} \quad (3.95)$$

mit $l = -N, \dots, -1, 1, \dots, N$. Die Größen ξ und χ erfüllen die kanonische Vertauschungsrelation $[\xi_{\text{sign}(l)j}, \chi_{\text{sign}(m)k}] = i\delta_{j,k} \delta_{\text{sign}(l), \text{sign}(m)}$, denn dann gilt

$$\begin{aligned} [x_l, p_m] &= \sum_{j,k=1}^N v_{j,|l|} v_{k,|m|} \frac{2}{N+1} [\xi_{\text{sign}(l)j}, \chi_{\text{sign}(m)k}] \\ &= \sum_{j,k=1}^N \sin\left(\frac{\pi j|l|}{N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi k|m|}{N+1}\right) \frac{2}{N+1} i\delta_{j,k} \delta_{\text{sign}(l), \text{sign}(m)} \\ &= \frac{2i}{N+1} \delta_{\text{sign}(l), \text{sign}(m)} \sum_{j=1}^N \sin\left(\frac{\pi j|l|}{N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi j|m|}{N+1}\right) \\ &= \frac{2i}{N+1} \delta_{\text{sign}(l), \text{sign}(m)} \frac{N+1}{2} \delta_{|l|, |m|} = i\delta_{l,m}. \end{aligned} \quad (3.96)$$

Wir haben somit über (3.95) das Bad auf Eigenmoden transformiert. Der transformierte Hamilton-Operator hat die Form

$$H = \frac{p_0^2}{2} + \frac{\Omega_c^2}{2} x_0^2 - \omega_c^2 x_0 (x_1 + x_{-1}) + \sum_{\substack{n=-N, \\ n \neq 0}}^N \left[\frac{\chi_n^2}{2} + \frac{\omega_n^2}{2} \xi_n^2 \right]. \quad (3.97)$$

Durch Umschreiben der Operatoren x_1 und x_{-1} auf Eigenmoden erhalten wir

$$x_1 + x_{-1} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{j=1}^N v_{j,1} (\xi_j + \xi_{-j}) = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{\substack{j=-N, \\ j \neq 0}}^N v_{|j|,1} \xi_j, \quad (3.98)$$

woraus wir die Kopplungskonstanten

$$\lambda_n = -\omega_c^2 \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{\pi|n|}{N+1}\right). \quad (3.99)$$

ablesen.

Im Ergebnis ist es uns gelungen den Hamilton-Operator (3.89) durch Transformation des Bades auf Eigenmoden in eine für den System-Bad-Formalismus geeignete Form zu bringen. Dieses Vorgehen hat uns die Kopplungskonstanten λ_n geliefert.

Übergang zur unendlichen Kette

Wir gehen nun zur unendlichen Kette über. Diese wird uns Größen, wie die Zustandsdichte $D(\omega)$ und die Spektralfunktion $J(\omega)$ des Bades liefern.

Die Herausnahme des zentralen Oszillators führt auf zwei halbumendliche Ketten. Die Eigenmoden des Bades stimmen mit denen im endlichen Fall überein, wenn wir $2N \rightarrow \infty$ gehen lassen. Um diesen Grenzfall explizit durchführen zu können, definieren wir eine Wellenzahl k . Im Fall der endlichen Kette ist diese diskret und für $j = 1, \dots, N$ durch

$$k_j = \frac{\pi j}{N+1} \quad (3.100)$$

gegeben. Beim Übergang zur unendlichen Kette wird die Wellenzahl kontinuierlich und kann Werte zwischen 0 und π annehmen. Mit (3.92) folgt für die Dispersionsrelation

$$\omega^2(k) = \Omega^2 - 2\omega_0^2 \cos k, \quad \text{so dass} \quad \omega^2 \in [\Omega^2 - 2\omega_0^2, \Omega^2 + 2\omega_0^2]. \quad (3.101)$$

Die Zustandsdichte $D(\omega)$ ergibt sich aus der Anzahl ΔN der Schwingungen pro Frequenzintervall Δk multipliziert mit dk

$$D(\omega) d\omega = \Delta N dk = \Delta N \frac{dk}{d\omega} d\omega = \Delta N \left(\frac{d\omega}{dk}\right)^{-1} d\omega. \quad (3.102)$$

Aus der Dispersionsrelation $\omega^2(k)$ erhalten wir

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{d\omega}{d\omega^2} \frac{d\omega^2}{dk} = \frac{1}{2\omega} 2\omega_0^2 \sin k = \frac{\omega_0^2}{\omega} \sin k. \quad (3.103)$$

Die Umkehrung der Dispersionsrelation liefert

$$k = \arccos\left(\frac{\Omega^2 - \omega^2}{2\omega_0^2}\right) = \arcsin\sqrt{1 - \left(\frac{\Omega^2 - \omega^2}{2\omega_0^2}\right)^2}, \quad (3.104)$$

3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus

und damit

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{\omega_0^2}{\omega} \sqrt{1 - \left(\frac{\Omega^2 - \omega^2}{2\omega_0^2}\right)^2} = \frac{\sqrt{4\omega_0^4 - (\Omega^2 - \omega^2)^2}}{2\omega}. \quad (3.105)$$

Allgemein wurde die Zustandsdichte für N Bad-Oszillatoren in Gleichung (3.59) als Summe von δ -Funktionen definiert, so dass für die Normierung

$$\int D(\omega) d\omega = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \int \delta(\omega - \omega_n) d\omega = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N 1 = 1 \quad (3.106)$$

folgt. Wir müssen die Zustandsdichte daher auf 1 normieren und erhalten

$$D(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{2\omega}{\sqrt{4\omega_0^4 - (\Omega^2 - \omega^2)^2}}. \quad (3.107)$$

Wir können nun den Übergang zum Kontinuum im Dämpfungskern vornehmen, indem wir Summen $1/(N+1) \sum_{n=1}^N f(\omega_n)$ in Integrale $\int d\omega D(\omega) f(\omega)$ umschreiben und erhalten

$$\begin{aligned} K(t) &= \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}}^{\infty} \frac{\lambda_n^2}{\omega_n} \sin \omega_n t \stackrel{!}{=} \int D(\omega) \lambda^2(\omega) \frac{\sin \omega t}{\omega} d\omega \\ &= \frac{4\omega_c^4}{N+1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_n} \sin \omega_n t \sin^2 k_n = \frac{4\omega_c^4}{N+1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_n} \sin \omega_n t \left[1 - \left(\frac{\Omega^2 - \omega^2}{2\omega_0^2}\right)^2\right] \\ &= \frac{\omega_c^4}{\omega_0^4} \int D(\omega) \frac{\sin \omega t}{\omega} \left[4\omega_0^4 - (\Omega^2 - \omega^2)^2\right] d\omega. \end{aligned} \quad (3.108)$$

Daraus können wir die Kopplungsstärkefunktion $\lambda(\omega)$ ablesen:

$$\lambda^2(\omega) = \frac{\omega_c^4}{\omega_0^4} \left[4\omega_0^4 - (\Omega^2 - \omega^2)^2\right] \quad \Leftrightarrow \quad \lambda(\omega) = \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2} \sqrt{4\omega_0^4 - (\Omega^2 - \omega^2)^2}. \quad (3.109)$$

Das Produkt von Kopplungsstärkefunktion und Zustandsdichte ergibt sich zu

$$\lambda(\omega) D(\omega) = \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2} \frac{2\omega}{\pi}, \quad (3.110)$$

und schließlich die Spektralfunktion des Bades zu

$$J(\omega) = \lambda^2(\omega) D(\omega) = \frac{\omega_c^4}{\omega_0^4} \frac{2\omega}{\pi} \sqrt{4\omega_0^4 - (\Omega^2 - \omega^2)^2}. \quad (3.111)$$

Wir haben damit alle für das Modell der linearen Kette spezifischen Größen, wie die Spektralfunktion (3.111), die Zustandsdichte (3.107) und die Kopplungsstärkefunktion (3.109) abgeleitet. Diese setzen wir nun in das für das Bad-Modell abgeleitete

Lösungsschema ein. Die Frequenz Ω_c des zentralen Oszillators wählen wir zeitunabhängig, so dass wir die Ergebnisse für konstante Koeffizienten verwenden können. In diesem Fall war die Lösung $q(t)$ der klassischen Gleichung (3.37) durch eine inverse Laplace-Transformation

$$q(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{st} F(s) ds \quad (3.112)$$

der Funktion

$$F(s) = \left(s^2 + \Omega_c^2 - \sum_{\nu} \frac{\lambda_{\nu}^2}{s^2 + \omega_{\nu}^2} \right)^{-1} \quad (3.113)$$

gegeben, wobei die Summe über alle Bad-Oszillatoren läuft.

Es kann gezeigt werden [5, 13], dass das Integral der inversen Laplace-Transformation von $F(s)$ in ein geschlossenes Kurvenintegral in der komplexen Ebene umgeschrieben werden kann, so dass

$$q(t) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\sin zt}{g(z)} dz, \quad (3.114)$$

mit

$$g(z) = -\frac{1}{F(iz)} = z^2 - \Omega_c^2 + \sum_{\nu} \frac{\lambda_{\nu}^2}{\omega_{\nu}^2 - z^2}. \quad (3.115)$$

Die Kontur muss dabei alle Pole von $g(z)$ umschließen. Diese liegen auf der reellen Achse, so dass wir die Kontur dicht oberhalb und unterhalb der reellen Achse legen und im Unendlichen schließen können.

Mit der Dirac-Identität $1/(x - x_0 \pm i\eta) = P(1/(x - x_0)) \mp i\pi\delta(x - x_0)$ für $\eta \ll 1$ und der Umschreibung der Summe in Gleichung (3.115) in ein Integral folgt

$$\begin{aligned} g_{\pm}(x) &= g(x \pm i\eta) = x^2 - \Omega_c^2 + P \int_0^{\infty} \frac{J(\omega)}{\omega^2 - x^2} d\omega \pm i\pi \int_0^{\infty} J(\omega)\delta(x^2 - \omega^2) d\omega \\ &= x^2 - \Omega_c^2 + P \int_0^{\infty} \frac{J(\omega)}{\omega^2 - x^2} d\omega \pm i\pi \int_0^{\infty} J(\omega)\delta(x^2 - \omega^2) \frac{d(\omega^2)}{2\omega} \\ &= x^2 - \Omega_c^2 + P \int_0^{\infty} \frac{J(\omega)}{\omega^2 - x^2} d\omega \pm i\pi \frac{J(|x|)}{2x}. \end{aligned} \quad (3.116)$$

Das Hauptwertintegral kann analytisch berechnet werden. Nach längerer Rechnung folgt

$$\begin{aligned} g_{\pm}(x) &= x^2 - \Omega_c^2 + \frac{\omega_c^4}{\omega_0^4} (\Omega^2 - x^2) \pm i\pi \frac{J(|x|)}{2x} \\ &= x^2 - \Omega_c^2 + \frac{\omega_c^4}{\omega_0^4} (\Omega^2 - x^2) \pm i \frac{\omega_c^4}{\omega_0^4} \frac{|x|}{x} \sqrt{4\omega_0^4 - (\Omega^2 - x^2)^2}, \end{aligned} \quad (3.117)$$

3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus

so dass

$$\begin{aligned} q(t) &= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\sin zt}{g(z)} dz = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{g_-(x)} - \frac{1}{g_+(x)} \right) \sin xt dx \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_+(x) - g_-(x)}{g_+(x) g_-(x)} \sin xt dx = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin xt}{x} \frac{J(|x|)}{g_+(x) g_-(x)} dx. \end{aligned} \quad (3.118)$$

Das verbleibende Integral ist symmetrisch bzgl. x , so dass wir es auf positive x beschränken können. Zusätzlich werden die Werte von x durch die Spektralfunktion eingeschränkt. Diese ist nur dann von Null verschieden, wenn $x^2 \in [\Omega^2 - 2\omega_0^2, \Omega^2 + 2\omega_0^2]$, so dass wir die Integration auf diesen Bereich einschränken können. Wir erhalten

$$q(t) = \int_{\sqrt{\Omega^2 - 2\omega_0^2}}^{\sqrt{\Omega^2 + 2\omega_0^2}} \frac{\sin xt}{x} \frac{J(x)}{g_+(x) g_-(x)} dx. \quad (3.119)$$

Bei der numerischen Auswertung dieses Integrals hat sich gezeigt, dass eine Substitution der Eigenmoden des Bades $x = \omega(k) = \sqrt{\Omega^2 - 2\omega_0^2 \cos k}$, so dass $dx/(dk) = \omega_0^2 \sin k / \omega(k)$, zur Verbesserung der Genauigkeit der numerischen Integration sinnvoll ist. Durch Einsetzen der Funktionen $g_{\pm}(x)$ und der Spektralfunktion $J(x)$ nimmt das Integral für die Funktion $q(t)$ die Form

$$q(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\sin \omega(k)t}{\omega(k)} \frac{4\omega_0^4 \omega_c^4 \sin^2 k}{[\omega_0^2(\Omega_c^2 - \Omega^2 + 2\omega_0^2 \cos k) - 2\omega_c^4 \cos k]^2 + 4\omega_c^8 \sin^2 k} dk \quad (3.120)$$

an. Dies ist die allgemeine Lösung der klassischen Gleichung (3.37) für den zentralen Oszillator einer linearen Kette. Alle weiteren Größen, die in den Erwartungswerten $\mathbf{x}(t)$ und Varianzen $\Sigma(t)$ und damit in der propagierenden Funktion auftauchen, gehen aus dieser durch partielle Fourier-Transformation und einige Frequenz-Integrale hervor.

3.5.3. Ergebnisse

Für $\Omega_c = \Omega$ und $\omega_c = \omega_0$ wird der Faktor in (3.120) Eins und wir erhalten

$$q(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\sin \omega(k)t}{\omega(k)} dk. \quad (3.121)$$

Dies reproduziert das Ergebnis von H. S. Robertson und M. A. Huerta [23].

Für den Fall schwacher Kopplung $\gamma = \omega_0^2 / \Omega^2 \ll 1$ beschreibt die Lösung eine Oszillation mit der Frequenz Ω , deren Amplitude durch eine Bessel-Funktion bestimmt ist [23, 24]

$$q(t) = J_0(\gamma \Omega t) \frac{\sin \Omega t}{\Omega}. \quad (3.122)$$

In Abbildung 3.3 ist die Funktion $q(t)$ für die Wahl $\Omega_c = \Omega = 15$, $\omega_c = \omega_0 = 5$ und $\gamma = 1/9$ gezeigt. Wir sehen, dass die Lösung bereits sehr gut durch die Gleichung (3.122) beschrieben werden kann. Der zentrale Oszillator der linearen Kette

beschreibt eine Schwingung der Frequenz Ω . Die Amplitude der Schwingung ist durch die Bessel-Funktion nullter Ordnung bestimmt. Diese nimmt asymptotisch wie $1/\sqrt{t}$ ab, so dass die Lösung $q(t)$ asymptotisch verschwindet. Der klassische Oszillator in der linearen Kette würde damit zum Stillstand kommen. In der quantenmechanischen Beschreibung im System-Bad-Modell können die Rausch-Beiträge zu den Momenten von Ort und Impuls des zentralen Oszillators jedoch zu einer endlichen Dynamik für alle Zeiten führen. Ob dies der Fall ist, werden wir im nächsten Kapitel klären.

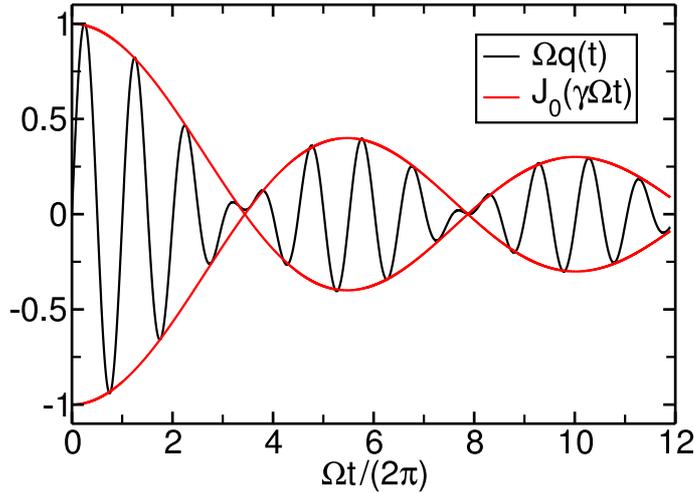


Abbildung 3.3.: Zeitverhalten der Funktion $q(t)$ für die Wahl $\Omega_c = \Omega = 15$ und $\omega_c = \omega_0 = 5$, so dass $\gamma = 1/9$. Schwarz gezeichnet ist die numerische Lösung für $q(t)$, während die roten Linien die Einhüllende der analytischen Lösung (3.122) darstellen.

Erhöhen wir die Frequenz des zentralen Oszillators Ω_c und lassen dabei sowohl die entsprechende Bad-Frequenz Ω , als auch die Kopplungen ω_c und ω_0 unverändert, lässt sich die Lösung nicht mehr durch (3.122) approximieren. Dieses Verhalten ist in Abbildung 3.4 gezeigt. Offenbar nimmt die Amplitude der Schwingung zunächst langsamer ab. Im weiteren Verlauf nimmt die Amplitude der wiederkehrenden Schwingungen jedoch schneller ab, als es bei der Wahl $\Omega_c = \Omega$ der Fall war. Im Grenzfall $t \rightarrow \infty$ wird die Lösung $q(t)$ verschwinden.

Erhöhen wir nun zusätzlich die Kopplung des zentralen Oszillators an seine nächsten Nachbarn ω_c , so werden die Abweichungen zur analytischen Lösung (3.122) größer. Das zeigt die Abbildung 3.5. Die Amplitude der Schwingung ist zwar immernoch moduliert, besitzt aber keine Nulldurchgänge mehr. Auch hier trifft das Resultat zu, dass die Amplitude der Schwingung zunächst langsamer abnimmt, im weiteren Verlauf die Amplitude der wiederkehrenden Schwingungen jedoch schneller abnimmt. Auch hier wird somit die Lösung $q(t)$ asymptotisch verschwinden. Diese Eigenschaft wird bei der Diskussion von Equilibrierung und Thermalisierung im folgenden Kapitel wichtig sein.

3. Der dissipative harmonische Oszillator im System-Bad-Formalismus

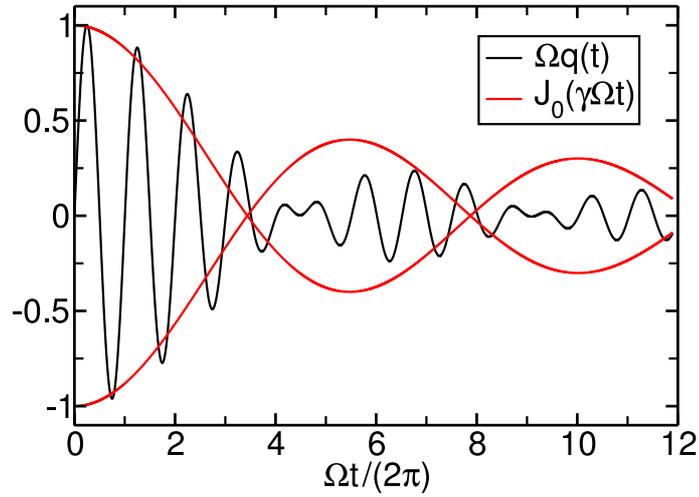


Abbildung 3.4.: Zeitverhalten der Funktion $q(t)$ für die Wahl $\Omega_c = 16$, $\Omega = 15$ und $\omega_c = \omega_0 = 5$, so dass $\gamma = 1/9$.

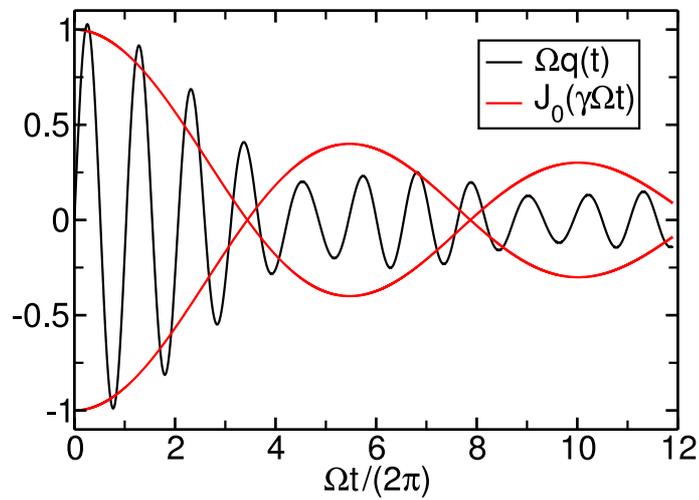


Abbildung 3.5.: Zeitverhalten der Funktion $q(t)$ für die Wahl $\Omega_c = 18$, $\Omega = 15$, $\omega_c = 6$ und $\omega_0 = 5$, so dass $\gamma = 1/9$.

4. Equilibrierung und Thermalisierung des dissipativen Oszillators

Im letzten Kapitel dieser Arbeit werden wir die beiden Konzepte des Lindblad-Formalismus und des System-Bad-Formalismus, die wir in den Kapiteln 2 und 3 getrennt verfolgt haben, wieder zusammenführen. Dazu diskutieren wir die Frage nach Thermalisierung des harmonischen Oszillators vergleichend im Lindblad- und im System-Bad-Formalismus am Beispiel der linearen Kette, wobei wir unkorrelierte Anfangszustände und eine konstante Frequenz des Oszillators betrachten.

Für die lineare Kette haben sowohl Robertson und Huerta [23], als auch Agarwal [24] gefunden, dass dieses System unabhängig von der Kopplungsstärke immer thermalisiert. Wir werden zeigen, dass deren Betrachtungen unvollständig sind. Für genauere Aussagen müssen wir die zwei Aspekte Equilibrierung und Thermalisierung getrennt betrachten.

4.1. Equilibrierung und das Langzeitverhalten der Erwartungswerte

Unter Equilibrierung des harmonischen Oszillators verstehen wir das Erreichen einer stationären Dichtematrix im Grenzfall $t \rightarrow \infty$. Starten wir von Gauß-Zuständen, so ist diese Bedingung äquivalent dazu, dass die ersten und zweiten Momente von Ort und Impuls des Oszillators asymptotisch stationäre Werte annehmen. Diese Tatsache gilt aber auch für allgemeinere Anfangszustände. Wir wissen bereits, dass die propagierende Funktion (2.60) vollständig durch $\mathbf{x}(t)$ und $\Sigma(t)$ bestimmt ist, so dass die propagierende Funktion stationär wird, wenn die ersten und zweiten Momente asymptotisch stationäre Werte annehmen. Dann läuft aber auch die über die Gleichung (1.28) definierte Dichtematrix in einen Gleichgewichtszustand.

Um die Frage nach Equilibrierung zu beantworten, müssen wir uns also die im Lindblad-Formalismus abgeleiteten Gleichungen (2.19) für die Erwartungswerte von Ort und Impuls, sowie (2.20) für die Varianzen im Grenzfall $t \rightarrow \infty$ ansehen. Die entsprechenden Gleichungen im System-Bad-Formalismus sind (3.64) für $\mathbf{x}(t)$ und (3.68) für $\Sigma(t)$.

Wir betrachten zunächst die im Lindblad-Formalismus abgeleiteten Gleichungen (2.19) und (2.20). Offenbar werden die ersten und zweiten Momente asymptotisch stationär, wenn der Zeitentwicklungsoperator $\mathbf{U}(t, t')$ stationär wird. Für eine konstante Oszillatorfrequenz ist dieser als Exponential der zeitunabhängigen Matrix $-\mathbf{R}$

4. Equilibrierung und Thermalisierung des dissipativen Oszillators

gegeben. Die Eigenwerte von \mathbf{R} sind in der Gleichung (2.14) gegeben. Sie besitzen für alle im Kapitel 2 diskutierten Fälle einen endlichen und positiven Realteil, so dass der Zeitentwicklungsoperator für $t \rightarrow \infty$ verschwindet. Im Ergebnis wird die Anfangspräparation durch die Kopplung an das Bad ausgedämpft. Die Erwartungswerte von Ort und Impuls verschwinden asymptotisch. Das in der Gleichung (2.20) für die Varianzen auftauchende Integral liefert für $t \rightarrow \infty$ einen konstanten Wert. Der Oszillator im Lindblad-Formalismus equilibriert demnach immer.

Betrachten wir nun den harmonischen Oszillator im System-Bad-Formalismus, so ist sofort klar, dass die Diskussion hier einer grundsätzlich anderen Strategie unterliegen muss. Im Lindblad-Fall gab es nur bei den Varianzen Inhomogenitäten in den Bewegungsgleichungen, die zusätzlich auch zeitunabhängig waren. Hier haben wir explizit zeitabhängige Rausch-Terme, die von der Bad-Präparation abhängen. Wir müssen daher insbesondere das Zeitverhalten der Rausch-Terme für $t \rightarrow \infty$ untersuchen. Wir wählen dabei wie in Kapitel 3.4 ein kontinuierliches Bad.

Die Koeffizienten der Matrix $\overline{\mathbf{K}}(t, \omega)$ sind in Gleichung (3.26) gegeben. Für diese gelten die Gleichungen (3.42) und (3.44). Im Langzeitlimes $t \rightarrow \infty$ konvergiert die Funktion $\tilde{q}(t, \omega)$ zu einer Funktion

$$\tilde{q}(\omega) \equiv \tilde{q}(\infty, \omega). \quad (4.1)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \langle x(\infty) \rangle &= \dot{q}(\infty) \langle x^0 \rangle + q(\infty) \langle p^0 \rangle \\ &\quad - \lim_{t \rightarrow \infty} \int D(\omega) \lambda(\omega) \left(\operatorname{Re} \tilde{q}(\omega) e^{i\omega t} \overline{x}(\omega) + \frac{\operatorname{Im} \tilde{q}(\omega)}{\omega} e^{i\omega t} \overline{p}(\omega) \right) d\omega, \end{aligned} \quad (4.2)$$

so dass die Integralterme in der Gleichung (3.64) offenbar die Fourier-Transformationen von $D(\omega) \lambda(\omega) \overline{x}(\omega) \operatorname{Re} \tilde{q}(\omega)$ und ähnlicher Funktionen sind. Weiterhin wissen wir, dass für jede integrable Funktion $f(\omega)$ die Eigenschaft

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \int f(\omega) e^{i\omega t} d\omega = 0 \quad (4.3)$$

erfüllt ist, so dass für $t \rightarrow \infty$ der Beitrag vom Rauschterm verschwindet. Die Erwartungswerte von Ort und Impuls entwickeln sich asymptotisch nach der klassischen Bewegungsgleichung (3.37). Informationen über den Anfangszustand gehen verloren. Insbesondere erreicht $\mathbf{x}(t)$ immer dann einen stationären Wert, wenn die Lösung $q(t)$ der klassischen Gleichung für $t \rightarrow \infty$ stationär wird.

Wir haben damit gezeigt, dass unter den folgenden Annahmen die Erwartungswerte von Ort und Impuls des zentralen Oszillators asymptotisch konstante Werte erreichen:

- (i) die Anfangszustände des Systems und des Bades zur Zeit $t_0 = 0$ sind unkorreliert;
- (ii) die Frequenz Ω des zentralen Oszillators ist unabhängig von der Zeit;
- (iii) es gilt die Gleichung (3.63) mit integrablen Funktionen $\overline{x}(\omega)$ und $\overline{p}(\omega)$;
- (iv) es gilt $q(t) \rightarrow q(\infty) = \textit{konst.}$

4.1. Equilibrierung und das Langzeitverhalten der Erwartungswerte

Um nun analoge Ergebnisse für die Varianzen zu erhalten, müssen wir die Annahmen (i) bis (iv) auf die Gleichung (3.68) anwenden. Diese können wir mit der folgenden und ähnlichen Identitäten für eine komplexe Zahl $z = u + iv$ umschreiben

$$\begin{aligned} [\operatorname{Re} z e^{i\omega t}]^2 &= [u \cos \omega t - v \sin \omega t]^2 = u^2 \cos^2 \omega t + v^2 \sin^2 \omega t - 2uv \cos \omega t \sin \omega t \\ &= \frac{|z|^2}{2} + \frac{u^2 - v^2}{2} \cos 2\omega t - uv \sin 2\omega t, \end{aligned} \quad (4.4)$$

und erhalten zum Beispiel

$$\begin{aligned} &\int J(\omega) \left[\operatorname{Re} \tilde{q}(t, \omega) e^{i\omega t} \right]^2 \overline{x^2}(\omega) d\omega \\ &= \frac{1}{2} \int J(\omega) \overline{x^2}(\omega) \left(|\tilde{q}(t, \omega)|^2 + [\operatorname{Re}^2 \tilde{q}(t, \omega) - \operatorname{Im}^2 \tilde{q}(t, \omega)] \cos 2\omega t \right. \\ &\quad \left. - 2 \operatorname{Re} \tilde{q}(t, \omega) \operatorname{Im} \tilde{q}(t, \omega) \sin 2\omega t \right) d\omega. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Aufgrund der Eigenschaft (4.3) verschwinden die Terme unter dem Integral, die Winkelfunktionen enthalten. Die konstanten Terme geben einen endlichen Beitrag.

Insgesamt finden wir mit $\dot{\tilde{q}}(\omega) \equiv \dot{\tilde{q}}(\infty, \omega)$

$$\mathbf{C}(\infty) = \begin{pmatrix} \xi_x(\infty) & \xi_{xp}(\infty) \\ \xi_{xp}(\infty) & \xi_p(\infty) \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

wobei

$$\begin{aligned} \xi_x(\infty) &= \frac{1}{2} \int J(\omega) \left[\overline{x^2}(\omega) + \frac{\overline{p^2}(\omega)}{\omega^2} \right] |\tilde{q}(\omega)|^2 d\omega, \\ \xi_p(\infty) &= \frac{1}{2} \int J(\omega) \left[\overline{x^2}(\omega) + \frac{\overline{p^2}(\omega)}{\omega^2} \right] |\dot{\tilde{q}}(\omega)|^2 d\omega, \\ \xi_{xp}(\infty) &= \frac{1}{2} \int J(\omega) \left[\overline{x^2}(\omega) + \frac{\overline{p^2}(\omega)}{\omega^2} \right] \left(\operatorname{Re} \tilde{q}(\omega) \operatorname{Re} \dot{\tilde{q}}(\omega) + \operatorname{Im} \tilde{q}(\omega) \operatorname{Im} \dot{\tilde{q}}(\omega) \right) d\omega. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Diese Größen werden bei der Diskussion der Thermalisierung des dissipativen harmonischen Oszillators wesentlich sein.

Unter den Annahmen (i) bis (iv), wobei (iii) durch

(iii)' Es gilt (3.66) mit integrierbaren Funktionen $\overline{x^2}(\omega)$, $\overline{p^2}(\omega)$ und $\overline{xp}(\omega)$.

ersetzt wird, erreichen die Varianzen asymptotisch stationäre Werte. Wenn wir das Bad im thermischen Gleichgewicht präparieren, erhalten wir die Gleichung (3.57) zurück. Der wesentliche Unterschied ist, dass wir mit einem beliebigen Anfangszustand starten können und im Ergebnis eine stationäre Dichtematrix des zentralen Oszillators erhalten. Equilibrierung des zentralen Oszillators findet daher in fast allen Fällen statt.

Das heißt wir konnten zeigen, dass der harmonische Oszillator sowohl im Lindblad-, als auch im System-Bad-Formalismus fast immer equilibriert.

4.2. Die Bedingungen für Thermalisierung

Wir werden nun untersuchen, ob der asymptotisch stationäre Zustand des harmonischen Oszillators auch thermisch ist. Dazu muss er sich als kanonische Dichtematrix $\propto e^{-\beta H_S}$ mit dem Hamilton-Operator H_S schreiben lassen. Bei der Behandlung von Gauß-Zuständen im Kapitel 2 haben wir gelernt, dass sich Gauß-Zustände immer in dieser Form schreiben lassen, wenn wir für H_S einen allgemeinen bilinearen Hamilton-Operator zulassen. In diesem Sinne wäre der stationäre Zustand für $t \rightarrow \infty$ immer auch thermisch.

Es ist klar, dass im Allgemeinen der Hamilton-Operator H_S dann nicht der des ungekoppelten harmonischen Oszillators ist. Wir werden daher den Begriff der Thermalisierung im Folgenden präzisieren müssen. Wir sagen, dass der zentrale Oszillator thermalisiert, wenn sich der asymptotisch stationäre Zustand als kanonische Dichtematrix $\propto e^{-\beta H_S}$ mit dem „nackten“ Hamilton-Operator H_S des zentralen Oszillators schreiben lässt. Wir wissen, dass die Ankopplung des Bades im System-Bad-Formalismus auch zu einer Frequenzverschiebung des zentralen Oszillators führt. Wir erlauben daher, dass im Hamilton-Operator H_S statt der ungestörten Frequenz genau diese verschobene Frequenz auftaucht. Dann ist Thermalisierung des harmonischen Oszillators insbesondere durch die Eigenschaften

$$\begin{aligned} (1) \quad \langle x \rangle &= \langle p \rangle = 0, \\ (2) \quad \langle \{x, p\} \rangle &= 0, \\ (3) \quad \omega^2 \langle x^2 \rangle &= \langle p^2 \rangle = E(\omega) = \frac{\omega}{2} \coth \frac{\omega}{2T} \end{aligned} \quad (4.8)$$

des asymptotischen Zustands charakterisiert.

Wir betrachten zunächst wieder den Oszillator in der Lindblad-Beschreibung. Aufgrund der Eigenschaft $\mathbf{U}(t, t') \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$ ist die erste Bedingung in (4.8) immer erfüllt. Für das Langzeitverhalten der Varianzen erhalten wir mit $m = 1$

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(\infty) &= \frac{1}{2\lambda(\lambda^2 + \omega^2 - \mu^2)} \left[(2\lambda(\lambda + \mu) + \omega^2) D_{xx} + 2(\lambda + \mu) D_{xp} + D_{pp} \right], \\ \sigma_{xp}(\infty) &= \frac{1}{2\lambda(\lambda^2 + \omega^2 - \mu^2)} \left[-(\lambda + \mu)\omega^2 D_{xx} + 2(\lambda^2 - \mu^2) D_{xp} + (\lambda - \mu) D_{pp} \right], \\ \sigma_{pp}(\infty) &= \frac{1}{2\lambda(\lambda^2 + \omega^2 - \mu^2)} \left[\omega^4 D_{xx} - 2\omega^2(\lambda - \mu) D_{xp} + (2\lambda(\lambda - \mu) + \omega^2) D_{pp} \right]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Offenbar sind die zweite und dritte Bedingung in (4.8) nicht erfüllt. Insbesondere im klassischen Fall $\mu = \lambda$ wird Thermalisierung im oben definierten Sinn nie stattfinden, da die Bedingung (2) dann nur durch die Wahl $D_{xx} = 0$ erfüllt werden kann, was jedoch aufgrund der Eigenschaften (2.7) der Diffusionskonstanten nicht erlaubt ist. Lediglich im nicht-klassischen Fall $\mu < \lambda$ können wir durch die spezielle Wahl der Diffusionskonstanten

$$D_{xx} = \frac{\lambda - \mu}{2\omega} \coth \frac{\omega}{2T}, \quad D_{pp} = \frac{\lambda + \mu}{2} \omega \coth \frac{\omega}{2T} \quad \text{und} \quad D_{xp} = 0, \quad (4.10)$$

das heißt

$$\omega^2 D_{xx} = \frac{\lambda - \mu}{\lambda + \mu} D_{pp}, \quad (4.11)$$

die Bedingungen (4.8) erfüllen. Nur dann wird der harmonische Oszillator im Lindblad-Formalismus thermalisieren.

Man könnte vermuten, dass die Wahl der Diffusionskonstanten gemäß (4.11) einem thermischen Bad entspricht, da zum Beispiel im Fall $\mu = 0$ gerade die Bedingungen $\omega^2 D_{xx} = D_{pp}$ und $D_{xp} = 0$ folgen. Da der Lindblad-Formalismus jedoch ein phänomenologisches Konzept ist, können die Diffusionskonstanten nicht mit Bad-Eigenschaften in Verbindung gebracht werden.

Wir betrachten nun den Oszillator im System-Bad-Formalismus. Da die Kopplung an ein Bad zu einer endlichen Dämpfung in der klassischen Gleichung (3.37) führt, werden die Funktion $q(t)$ und damit die Erwartungswerte von Ort und Impuls asymptotisch verschwinden.

Für die Varianzen muss zunächst die Eigenschaft (2), also $\langle \{x(t), p(t)\} \rangle \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$ gelten. Es ist klar, dass mit $q(t) \rightarrow 0$ die klassischen Beiträge zu den Varianzen verschwinden, so dass diese asymptotisch durch (4.7) gegeben sind. Um zu sehen, dass $\langle \{x, p\} \rangle$ für $t \rightarrow \infty$ unter den gemachten Annahmen verschwindet, betrachten wir die Definitionen (3.43) und (3.45) der Funktionen $\tilde{q}(t, \omega)$ und $\dot{\tilde{q}}(t, \omega)$ und folgern

$$\begin{aligned} & \operatorname{Re} \tilde{q}(t, \omega) \operatorname{Re} \dot{\tilde{q}}(t, \omega) + \operatorname{Im} \tilde{q}(t, \omega) \operatorname{Im} \dot{\tilde{q}}(t, \omega) \\ &= \left[\int_0^t q(\tau) \cos \omega \tau \, d\tau \right] \left[\int_0^t \dot{q}(\tau) \cos \omega \tau \, d\tau \right] + \left[\int_0^t q(\tau) \sin \omega \tau \, d\tau \right] \left[\int_0^t \dot{q}(\tau) \sin \omega \tau \, d\tau \right]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Eine partielle Integration in den Integralen mit \dot{q} liefert mit $q(0) = 0$

$$\int_0^t \dot{q}(\tau) \begin{pmatrix} \cos \omega \tau \\ \sin \omega \tau \end{pmatrix} d\tau = q(t) \begin{pmatrix} \cos \omega t \\ \sin \omega t \end{pmatrix} - \omega \int_0^t q(\tau) \begin{pmatrix} -\sin \omega \tau \\ \cos \omega \tau \end{pmatrix} d\tau \quad (4.13)$$

und damit

$$\begin{aligned} & \operatorname{Re} \tilde{q}(t, \omega) \operatorname{Re} \dot{\tilde{q}}(t, \omega) + \operatorname{Im} \tilde{q}(t, \omega) \operatorname{Im} \dot{\tilde{q}}(t, \omega) \\ &= \left(\int_0^t q(\tau) \cos \omega \tau \, d\tau \right) q(t) \cos \omega t + \left(\int_0^t q(\tau) \sin \omega \tau \, d\tau \right) q(t) \sin \omega t \\ &= q(t) \int_0^t q(\tau) \cos \omega(t - \tau) \, d\tau = q(t) \operatorname{Re} \left(e^{i\omega t} \int_0^t q(\tau) e^{-i\omega \tau} \, d\tau \right) \\ &= q(t) \operatorname{Re} \left(e^{i\omega t} \tilde{q}(t, \omega) \right), \end{aligned} \quad (4.14)$$

so dass mit $q(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$ die Gleichung

$$\operatorname{Re} \tilde{q}(\omega) \operatorname{Re} \dot{\tilde{q}}(\omega) + \operatorname{Im} \tilde{q}(\omega) \operatorname{Im} \dot{\tilde{q}}(\omega) = 0 \quad (4.15)$$

4. Equilibrierung und Thermalisierung des dissipativen Oszillators

und damit

$$\xi_{xp}(\infty) = 0 \quad (4.16)$$

folgt. Der asymptotische Zustand sieht daher zunächst wie ein thermischer Zustand aus. Wir müssen jedoch noch die Eigenschaft (3) aus (4.8) prüfen.

Es ist klar, dass wir die asymptotischen Varianzen $\xi_x(\infty)$ und $\xi_p(\infty)$ in eine effektive Frequenz ω_T und eine effektive Temperatur T des asymptotischen Zustands umrechnen können. Dann ist die Eigenschaft (3) mit den Größen

$$\omega_T^2 = \frac{\xi_p(\infty)}{\xi_x(\infty)} > 0 \quad \text{und} \quad T = \frac{\omega_T}{2} \frac{1}{\operatorname{arcoth} \left[2\sqrt{\xi_p(\infty)\xi_x(\infty)} \right]} \quad (4.17)$$

trivial erfüllt. Hat der asymptotische Zustand zum Beispiel eine minimale Unschärfe, also gilt $\sqrt{\xi_p(\infty)\xi_x(\infty)} = 1/2$, so ist die Temperatur $T = 0$. Zustände mit sehr hoher Unschärfe $\sqrt{\xi_p(\infty)\xi_x(\infty)} \rightarrow \infty$ haben auch sehr hohe Temperaturen $T \rightarrow \infty$.

Die Entropie S des asymptotischen Zustands ist dann die eines harmonischen Oszillators der Temperatur T (bzw. der inversen Temperatur $\beta = 1/T$) und der Frequenz ω_T

$$S = -\ln(1 - e^{-\beta\omega_T}) + \beta\omega_T e^{-\beta\omega_T} (1 - e^{-\beta\omega_T})^{-1}. \quad (4.18)$$

Eine genauere Analyse zeigt jedoch, dass die Frequenz ω_T des asymptotischen Zustands im Allgemeinen nicht die durch die Ankopplung an das Bad verschobene Frequenz des zentralen Oszillators ist. Der Hamilton-Operator H_S des kanonischen Zustands $\propto e^{-\beta H_S}$ ist nicht der des nackten zentralen Oszillators. In diesem Sinne findet Thermalisierung im Allgemeinen nicht statt.

Für schwache Kopplung ist die Funktion $\tilde{q}(\omega)$ aus (4.1) eine schmale Verteilung um die durch die Ankopplung an das Bad verschobene Frequenz des zentralen Oszillators. Für die Funktion $\tilde{q}(t, \omega)$ gilt die Eigenschaft (3.46), so dass mit $q(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$

$$|\dot{\tilde{q}}(\omega)|^2 = \omega^2 |\tilde{q}(\omega)|^2 \quad (4.19)$$

folgt. Auch $\dot{\tilde{q}}(\omega)$ ist damit eine schmale Verteilung um die durch die Ankopplung an das Bad verschobene Frequenz des zentralen Oszillators. Die Integration über ω in den Gleichungen (4.7) liefert dann die Eigenschaft (3) in (4.8) eines thermischen Zustands. Auf den ersten Blick thermalisiert der zentrale Oszillator also eventuell für schwache Kopplung.

Eine genauere Analyse zeigt jedoch, dass auch diese Aussage nicht zutrifft. Die über die Gleichung (4.17) definierte Temperatur hängt auch für schwache Kopplung von der Anfangspräparation des Bades ab. Koppeln wir nacheinander zwei verschiedene Oszillatoren mit Frequenzen $\omega_{1,2}$ an ein Bad mit gleicher Anfangspräparation, so führt die Eigenschaft der Funktion $\tilde{q}(\omega)$ eine schmale Verteilung um $\omega_{1,2}$ zu sein gerade auf die Eigenschaft $\omega_{1,2}^2 \xi_x(\infty) = \xi_p(\infty)$. Bei der Berechnung der Temperatur

über

$$\omega_T^2 = \frac{\xi_p(\infty)}{\xi_x(\infty)} = \omega_{1,2}^2 \quad \text{und} \quad (4.20)$$

$$T = \frac{\omega_T}{2} \frac{1}{\operatorname{arccoth}\left[2\sqrt{\xi_p(\infty)\xi_x(\infty)}\right]} = \frac{\omega_{1,2}}{2} \frac{1}{\operatorname{arccoth}\left[2\omega_{1,2}\xi_x(\infty)\right]}$$

geht offenbar die Frequenz ein, so dass sich im Allgemeinen asymptotisch auch zwei verschiedene Temperaturen einstellen werden. Nur dann, wenn wir das Bad in einem thermischen Zustand präparieren, also alle Bad-Oszillatoren dieselbe Temperatur T_B besitzen, gilt

$$\xi_x(\infty) = \frac{1}{2\omega_{1,2}} \coth \frac{\omega_{1,2}}{2T_B}, \quad (4.21)$$

so dass alle zentralen Oszillatoren – unabhängig von der Frequenz – für $t \rightarrow \infty$ die Temperatur des Bades annehmen.

Wir erhalten das folgende wesentliche Ergebnis: Equilibrierung des quantenmechanischen dissipativen harmonischen Oszillators tritt – unter schwachen Annahmen – immer auf. Hierfür spielt die Anfangspräparation keine Rolle, so dass diese Aussage auch für beliebige nicht-thermische Anfangszustände des Bades gilt. Wichtig ist nur, dass der harmonische Oszillator an ein kontinuierliches Bad gekoppelt wird. Für das Auftreten von Thermalisierung ist dagegen die genaue Form der Anfangspräparation wesentlich. Thermalisierung des quantenmechanischen dissipativen harmonischen Oszillators tritt nur für ganz spezielle Anfangszustände des Bades, nämlich eben thermische, auf.

4.3. Das Beispiel der linearen Kette

Wir kommen nun zurück zur Diskussion der linearen Kette. Nach den Rechnungen aus Kapitel 3.5 wird die Lösung $q(t)$ der klassischen Gleichung asymptotisch verschwinden. Es folgt, dass der zentrale Oszillator equilibriert. Nach obigen Ergebnissen wird der zentrale Oszillator jedoch nicht thermalisieren, es sei denn, wir präparieren das Bad – also alle anderen Oszillatoren – bereits in einem thermischen Zustand und nehmen zusätzlich schwache Kopplung – also $\omega_c/\Omega_c \ll 1$ – an.

Wählen wir gleiche Grundfrequenzen und Kopplungen für alle Oszillatoren der Kette, indem wir $\Omega_c = \Omega$ und $\omega_c = \omega_0$ setzen, so kann die Diskussion etwas anders geführt werden. Zunächst ist klar, dass die Eigenschaften (1) und (2) in der Gleichung (4.8) unabhängig von der speziellen Wahl der Frequenzen sind. Wir haben gesehen, dass sie eine direkte Folge der Eigenschaft $q(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$ der klassischen Lösung sind. Wir schlussfolgern, dass die Eigenschaften (1) und (2) immer erfüllt sind.

Wir können dann über die Gleichung (4.17) eindeutig eine asymptotische Frequenz ω_T und eine Temperatur T des zentralen Oszillators bestimmen. Die Frequenz ω_T wird dabei mit der Grundfrequenz des zentralen Oszillators übereinstimmen, da alle

4. *Equilibrierung und Thermalisierung des dissipativen Oszillators*

Oszillatoren dieselbe Schwingungsfrequenz besitzen und somit im gesamten System keine anderen Frequenzen existieren. Zusätzlich wird man die in der allgemeinen Diskussion erwähnte Frequenzabhängigkeit der Temperatur in diesem System nicht sehen, da die Variation der Frequenz des zentralen Oszillators wegen der Eigenschaft gleicher Frequenzen aller Oszillatoren auch eine Veränderung des Bades nach sich zieht. Für die Wahl $\Omega_c = \Omega$ und $\omega_c = \omega_0$ ist es daher unmöglich zwei verschiedene Oszillatoren an ein Bad zu koppeln.

Wir verstehen nun, was Agarwal übersehen hat: Thermalisierung im eigentlichen Sinn tritt nur dann auf, wenn die Bedingungen (4.8) mit der Frequenz des ungestörten Oszillators für den asymptotischen Zustand erfüllt sind und wenn das Ankoppeln von verschiedenen Oszillatoren an ein Bad zu gleichen asymptotischen Temperaturen führt. Diese Eigenschaften zeigen sich aber nicht, wenn man nur einen Oszillator an ein Bad koppelt, wie es bei der Kette von Agarwal der Fall ist.

Hier zeigt sich in aller Deutlichkeit, wie wichtig die Unterscheidung von Equilibrierung und Thermalisierung ist.

Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit haben wir einen Einblick in die theoretische Beschreibung von Quantendissipation erhalten. Der Lindblad-Formalismus liefert eine phänomenologische Behandlung von Dissipation als Erweiterung der üblichen Quantenmechanik auf offene Systeme. Er basiert dabei auf der Ersetzung der dynamischen Gruppe durch eine Halbgruppe. Alle Effekte, die die Umgebung auf die Dynamik des offenen Systems hat, sind – im Rahmen dieser Theorie – in der speziellen Struktur der Mastergleichung enthalten.

Der System-Bad-Formalismus verwendet dagegen spezielle Bad-Modelle, um von der Dynamik des Gesamtsystems über die partielle Spur auf die Zeitentwicklung des offenen Systems zu schließen. Er ist aufgrund der Vielzahl von Bad-Freiheitsgraden nur für speziell gewählte Bad-Modelle praktisch anwendbar. Er liefert dann jedoch im Rahmen der üblichen quantendynamischen Gesetze eine mikroskopische Beschreibung der Dynamik des offenen Systems.

Beide Formalismen haben wir auf das Beispiel des quantenmechanischen harmonischen Oszillators angewendet. Dabei ergaben sich wiederkehrende Strukturen in den Gleichungen für die Erwartungswerte von Ort und Impuls, sowie für die Varianzen. Wir haben gezeigt, dass sich die propagierende Funktion zumindest für den harmonischen Oszillator als lineares System auch ohne die Verwendung von Pfad-Integralen berechnen lässt. Dabei haben wir lediglich die Tatsache ausgenutzt, dass Gauß-Zustände für solche Systeme auf Gauß-Zustände abgebildet werden. Die propagierende Funktion lässt sich dann in einfacher Weise aus den Erwartungswerten von Ort und Impuls, sowie den Varianzen rekonstruieren. Der besondere Vorteil ist, dass diese Vorgehensweise auch nicht-thermische Anfangszustände für das Bad enthält.

Für das Beispiel einer linearen Kette von Oszillatoren, die wir im Rahmen des vorgestellten System-Bad-Modells behandeln konnten, existieren bislang keine analytischen Resultate. Wir konnten jedoch Gleichungen ableiten, die eine einfache numerische Behandlung ermöglichen. Die dabei auftretende inverse Laplace-Transformation haben wir zu einem Integral über eine reelle Funktion vereinfacht, welches über einem reellen und endlichen Intervall zu berechnen ist. Im Ergebnis haben wir gezeigt, dass die Beantwortung der Frage nach Thermalisierung sehr subtil ist. In der Literatur ist der Unterschied zwischen Equilibrierung zu einer fiktiven Temperatur und Thermalisierung im eigentlichen Sinn oft übersehen worden. Wir konnten zeigen, dass der dissipative harmonische Oszillator bereits unter sehr schwachen Annahmen equilibriert, Thermalisierung dagegen nur auftreten kann, wenn das Bad bereits in einem thermischen Zustand präpariert wird.

Die vorgestellten Resultate werfen die Frage auf, inwieweit sich unser Vorgehen auf

andere Fragestellungen übertragen lässt. Betrachten wir zum Beispiel einen Oszillator mit zeitabhängiger Frequenz. Im Gegensatz zur vollständigen Diagonalisierung lässt sich diese Verallgemeinerung im Rahmen unseres Zugangs leicht durchführen. Die entsprechenden Gleichungen für diesen Fall haben wir bereits bei der Behandlung des Oszillators im Lindblad-Formalismus und im System-Bad-Modell abgeleitet. Lediglich die Beantwortung der Fragen nach Equilibrierung und Thermalisierung muss angepasst werden.

Schwieriger zu beantworten sind die Fragen nach zufälligen Anfangszuständen und Anfangskorrelationen zwischen dem offenen System und dem Bad. Prinzipiell sollte sich das vorgestellte Konzept jedoch auch auf diese Fälle anwenden lassen. Damit könnte die Frage untersucht werden, ob Anfangskorrelationen zerfallen und unter welchen Bedingungen bei zufälligen Anfangszuständen Thermalisierung auftritt.

Eine weitere interessante Fragestellung betrifft den Einfluss von Korrelationen innerhalb des offenen Systems auf dessen Dynamik. Hierfür müsste das System selbst vergrößert werden, etwa durch Hinzufügen eines zweiten zentralen Oszillators. Es wäre vorstellbar, dass dann beide Oszillatoren gegen verschiedene Temperaturen laufen können. Ein derartiges Modell kann im Prinzip mit dem hier vorgestellten System-Bad-Formalismus analysiert werden.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die in der Literatur behandelte Frage der Thermalisierung des quantenmechanischen dissipativen harmonischen Oszillators eine genauere Betrachtung erfordert. Dazu müssen die zwei Aspekte Equilibrierung und Thermalisierung getrennt betrachtet werden. Die vorgestellten Modelle liefern eine phänomenologische und eine mikroskopische Beschreibung, anhand derer diese Diskussion geführt werden kann. Auch wenn mit Blick auf das Problem der Thermalisierung noch einige offene Fragestellungen zu beantworten sind, konnten wir eine wesentliche Aussage treffen: Der Oszillator equilibriert fast immer, thermalisiert jedoch fast nie.

A. Integrale über Gauß-Funktionen mit komplexen Exponenten

Wir fragen danach, wie wir gewöhnliche Gauß-Integrale des Typs

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a(x+b)^2} dx \quad (\text{A.1})$$

mit komplexen Koeffizienten a und b im Exponenten berechnen können.

Dazu werden wir zunächst den Einfluss des Imaginärteils von a auf das bekannte Ergebnis klären, also

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx \quad (\text{A.2})$$

mit $a \in \mathbb{C}$ und $\operatorname{Re} a > 0$ berechnen. Wir schreiben die komplexe Zahl a als $a = re^{i\varphi}$, so dass $\sqrt{a} = \pm\sqrt{r}e^{i\varphi/2}$. Anschließend substituieren wir $y = \sqrt{a}x$ und erhalten

$$I_1 = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\pm 1}{\sqrt{a}} \int_{-\sqrt{r}Re^{i\varphi/2}}^{\sqrt{r}Re^{i\varphi/2}} e^{-y^2} dy = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{r}e^{i\varphi/2}} \int_{\mathcal{C}} e^{-y^2} dy. \quad (\text{A.3})$$

Die Integration ist entlang der Kontur \mathcal{C} auszuführen, die wir entsprechend der Abbildung A.1 in drei Abschnitte einteilen. Mit $y = y_0e^{i\theta}$, so dass $dy = e^{i\theta}dy_0 + iy_0e^{i\theta}d\theta$ folgt für das Integral

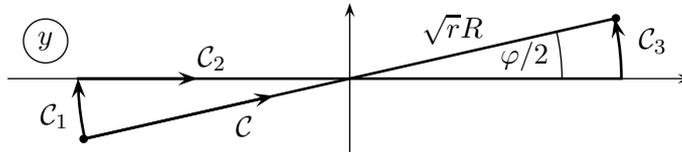


Abbildung A.1.: Aufspaltung der Integrations-Kontur \mathcal{C} in drei Teile.

$$I_1 = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{r}e^{i\varphi/2}} \left\{ \int_{\varphi/2}^0 iy_0e^{i\theta}e^{-y_0^2e^{2i\theta}} d\theta \Big|_{y_0=-\sqrt{r}R} + \int_{-\sqrt{r}R}^{\sqrt{r}R} e^{i\theta}e^{-y_0^2e^{2i\theta}} dy_0 \Big|_{\theta=0} + \int_0^{\varphi/2} iy_0e^{i\theta}e^{-y_0^2e^{2i\theta}} d\theta \Big|_{y_0=\sqrt{r}R} \right\}. \quad (\text{A.4})$$

Das erste und das letzte Integral liefern denselben Beitrag, welcher für $R \rightarrow \infty$ wegen der e^{-R^2} -Abhängigkeit verschwindet. Es verbleibt das mittlere Integral

$$I_1 = \frac{1}{\sqrt{r}e^{i\varphi/2}} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\sqrt{r}R}^{\sqrt{r}R} e^{-y_0^2} dy_0 = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (\text{A.5})$$

A. Integrale über Gauß-Funktionen mit komplexen Exponenten

wobei wir mit \sqrt{a} den Hauptwert der Quadratwurzel von a bezeichnen.

Die Konvergenz des Integrals folgt aus der Bedingung $\operatorname{Re} a > 0$, denn mit der Definition $a = re^{i\varphi}$ folgt $\varphi \in [-\pi/2, \pi/2]$ und damit $\theta \in [-\pi/4, \pi/4]$, so dass die oben gezeigte Rechnung gilt. Wäre $\operatorname{Re} a < 0$, so würde $\theta \in [\pi/4, 3\pi/4]$ gelten und damit das mittlere Integral an der Stelle $\theta = \pi/2$ zu nehmen sein. Das würde Vorzeichen vor y_0^2 in (A.5) ändern, wodurch das Integral divergieren würde.

Wir werden nun den Einfluss einer Verschiebung des Mittelpunkts der Verteilung um eine imaginäre Zahl bestimmen, also

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x+ic)^2} dx \quad (\text{A.6})$$

mit $c \in \mathbb{R}$ berechnen. Dazu substituieren wir $y = x + ic$ und erhalten

$$I_2 = \int_{-\infty+ic}^{+\infty+ic} e^{-y^2} dy = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R+ic}^{R+ic} e^{-y^2} dy = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{D}} e^{-y^2} dy. \quad (\text{A.7})$$

Die Kontur \mathcal{D} teilen wir anschließend entsprechend der Abbildung A.2 in drei Abschnitte auf, wobei der Winkel φ_0 durch $\varphi_0 = \arctan(c/R)$ definiert ist. Mit $y = y_0 e^{i\varphi}$ folgt für das Integral

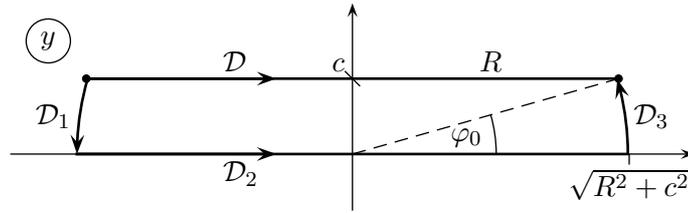


Abbildung A.2.: Aufspaltung der Integrations-Kontur \mathcal{D} in drei Teile.

$$I_2 = \lim_{R \rightarrow \infty} \left\{ \int_{\pi-\varphi_0}^{\pi} iy_0 e^{i\varphi} e^{-y_0^2 e^{2i\varphi}} d\varphi \Big|_{y_0=\sqrt{R^2+c^2}} + \int_{-\sqrt{R^2+c^2}}^{\sqrt{R^2+c^2}} e^{i\varphi} e^{-y_0^2 e^{2i\varphi}} dy_0 \Big|_{\varphi=0} + \int_0^{\varphi_0} iy_0 e^{i\varphi} e^{-y_0^2 e^{2i\varphi}} d\varphi \Big|_{y_0=\sqrt{R^2+c^2}} \right\}. \quad (\text{A.8})$$

Die Integrale entlang der Kreisbögen \mathcal{D}_1 und \mathcal{D}_3 verschwinden im Grenzfall $R \rightarrow \infty$. Das verbleibende Integral liefert das bekannte Ergebnis

$$I_2 = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\sqrt{R^2+c^2}}^{\sqrt{R^2+c^2}} e^{-y_0^2} dy_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y_0^2} dy_0 = \sqrt{\pi}. \quad (\text{A.9})$$

Insgesamt erhalten wir für das zu Anfang formulierte Integral das Ergebnis

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a(x+b)^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (\text{A.10})$$

mit dem Hauptwert der Quadratwurzel von a , wobei a und b komplexe Zahlen sind und $\operatorname{Re} a > 0$ für die Konvergenz vorausgesetzt werden muss.

B. Die kanonische Dichtematrix für bilineare Hamilton-Operatoren

Das folgende Kapitel soll in einem ersten Schritt zeigen, wie man die Ortsdarstellung der kanonischen Dichtematrix eines einfachen harmonischen Oszillators berechnen kann. In einem zweiten Schritt werden wir versuchen die Vorgehensweise sukzessive auf allgemeinere bilineare Hamilton-Operatoren zu erweitern. Für den allgemeinsten bilinearen Hamilton-Operator (2.22) wird uns das nicht gelingen, jedoch werden die Rechnungen den Umgang mit Operatoren – wie dem Verschiebungs- und dem Quetschungsoperator – demonstrieren.

Die kanonische Dichtematrix des harmonischen Oszillators

Wir betrachten zunächst einen einfachen harmonischen Oszillator der Frequenz ω mit

$$H_0 = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \frac{p^2}{2m} = \omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (\text{B.1})$$

Dabei bezeichnen wir mit n den Besetzungszahl-Operator.

Die kanonische Dichtematrix ist durch

$$\rho = \frac{1}{Z_0} \exp[-\beta H_0], \quad (\text{B.2})$$

mit der Zustandssumme $Z_0 = \text{Tr} \exp[-\beta H_0]$ und der inversen Temperatur $\beta = 1/T$ definiert.

Die Zustandssumme lässt sich einfach berechnen. Das Ergebnis ist

$$Z_0 = \text{Tr} \exp[-\beta H_0] = e^{-\beta\omega/2} \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\beta\omega n} | n \rangle = \frac{e^{-\beta\omega/2}}{1 - e^{-\beta\omega}}. \quad (\text{B.3})$$

Die Dichtematrix lässt sich dann in der Form

$$\rho = (1 - e^{-\beta\omega}) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\omega n} |n\rangle \langle n| \quad (\text{B.4})$$

schreiben. Die Ortsdarstellung kann durch eine Integration über kohärente Zustände

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (\text{B.5})$$

B. Die kanonische Dichtematrix für bilineare Hamilton-Operatoren

mit $\alpha \in \mathbb{C}$ ausgedrückt werden, die die Vollständigkeitsrelation

$$\mathbb{1} = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha \quad (\text{B.6})$$

erfüllen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \rho(x, x') &= \langle x | \rho | x' \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \langle x | \rho | \tilde{\alpha} \rangle \langle \tilde{\alpha} | x' \rangle d^2\tilde{\alpha} \\ &= \frac{1 - e^{-\beta\omega}}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \langle x | e^{-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}} \sum_{n, n'=0}^{\infty} e^{-\beta\omega n'} \frac{\tilde{\alpha}^{n'}}{\sqrt{n'!}} |n'\rangle \langle n'|n\rangle \langle n| \frac{(\tilde{\alpha}^*)^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{|\tilde{\alpha}|^2}{2}} |x'\rangle d^2\tilde{\alpha} \\ &= \frac{1 - e^{-\beta\omega}}{\pi} \int_{\mathbb{C}} e^{|\tilde{\alpha}|^2(e^{-\beta\omega} - 1)} \\ &\quad \times \langle x | e^{-\frac{1}{2}|\tilde{\alpha}e^{-\beta\frac{\omega}{2}}|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\tilde{\alpha}e^{-\beta\frac{\omega}{2}})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \langle n| e^{-\frac{1}{2}|\tilde{\alpha}e^{-\beta\frac{\omega}{2}}|^2} \frac{(\tilde{\alpha}^*e^{-\beta\frac{\omega}{2}})^n}{\sqrt{n!}} |x'\rangle d^2\tilde{\alpha} \\ &= \frac{1 - e^{-\beta\omega}}{\pi} \int_{\mathbb{C}} e^{|\tilde{\alpha}|^2(e^{-\beta\omega} - 1)} \langle x | \tilde{\alpha}e^{-\beta\omega/2} \rangle \langle \tilde{\alpha}e^{-\beta\omega/2} | x' \rangle d^2\tilde{\alpha}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Die Substitution $\alpha = \tilde{\alpha}e^{-\beta\omega/2}$, das heißt $d^2\tilde{\alpha} = d^2\alpha e^{\beta\omega}$ führt auf

$$\rho(x, x') = \frac{e^{\beta\omega} - 1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} e^{|\alpha|^2(1 - e^{\beta\omega})} \langle x | \alpha \rangle \langle \alpha | x' \rangle d^2\alpha. \quad (\text{B.8})$$

Mit der Definition der „thermischen Spur“

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\beta}(\dots) &= \frac{e^{\beta\omega} - 1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} e^{|\alpha|^2(1 - e^{\beta\omega})} \langle \alpha | \dots | \alpha \rangle d^2\alpha \\ &= (1 - e^{-\beta\omega}) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\omega n} \langle n | \dots | n \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

können wir verkürzt auch

$$\rho(x, x') = \text{Tr}_{\beta}(|x'\rangle \langle x|) \quad (\text{B.10})$$

schreiben. Da die Ortsdarstellung von kohärenten Zuständen eine Gauß-Funktion

$$\langle x | \alpha \rangle = \alpha(x) = e^{-i \text{Im } \alpha \text{ Re } \alpha} e^{\frac{1}{2} \text{Im } \alpha x} \frac{1}{\sqrt{l\sqrt{2\pi}}} \exp\left[-\frac{1}{4}\left(\frac{x - 2l \text{Re } \alpha}{l}\right)^2\right] \quad (\text{B.11})$$

mit der charakteristischen Länge $l = 1/\sqrt{2m\omega}$ ist, ergibt sich die Ortsdarstellung der kanonischen Dichtematrix als Faltung von Gauß-Funktionen. Die explizite Rechnung

liefert das Ergebnis

$$\begin{aligned}
\rho(x, x') &= \frac{e^{\beta\omega} - 1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} e^{|\alpha|^2(1-e^{\beta\omega})} e^{\frac{i}{l}(x-x')\text{Im}\alpha} \frac{1}{l\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{4}\left(\frac{x-2l\text{Re}\alpha}{l}\right)^2} e^{-\frac{1}{4}\left(\frac{x'-2l\text{Re}\alpha}{l}\right)^2} d^2\alpha \\
&= \frac{e^{\beta\omega} - 1}{\pi} \frac{1}{l\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{C}} \exp \left[- (1 + e^{\beta\omega}) \left(\text{Re}\alpha - \frac{x + x'}{2l(1 + e^{\beta\omega})} \right)^2 \right. \\
&\quad \left. - (e^{\beta\omega} - 1) \left(\text{Im}\alpha - \frac{i(x - x')}{2l(e^{\beta\omega} - 1)} \right)^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{x^2 + x'^2}{4l^2} + \frac{(x + x')^2}{4l^2(e^{\beta\omega} + 1)} - \frac{(x - x')^2}{4l^2(e^{\beta\omega} - 1)} \right] d^2\alpha \\
&= \frac{e^{\beta\omega} - 1}{\pi} \frac{1}{l\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{e^{\beta\omega} + 1}} \sqrt{\frac{\pi}{e^{\beta\omega} - 1}} e^{-\frac{x^2+x'^2}{4l^2} + \frac{(x+x')^2}{4l^2(e^{\beta\omega}+1)} - \frac{(x-x')^2}{4l^2(e^{\beta\omega}-1)}} \\
&= \frac{1}{l\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{e^{\beta\omega} - 1}{e^{\beta\omega} + 1}} \exp \left[- \frac{x^2(e^{2\beta\omega} + 1) - 4xx'e^{\beta\omega} + x'^2(e^{2\beta\omega} + 1)}{4l^2(e^{\beta\omega} - 1)(e^{\beta\omega} + 1)} \right].
\end{aligned} \tag{B.12}$$

Im Grenzfall $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) ergibt sich eine Gauß-Funktion mit endlicher Varianz

$$\rho(x, x') \longrightarrow \frac{1}{l\sqrt{2\pi}} \exp \left[- \frac{x^2 + x'^2}{4l^2} \right], \tag{B.13}$$

wohingegen der andere Grenzfall $T \rightarrow \infty$ ($\beta \rightarrow 0$) eine „ausgeschmierte“ Gauß-Funktion ergibt

$$\rho(x, x') \longrightarrow \sqrt{\frac{\beta\omega}{4\pi l^2}} \exp \left[- \frac{(1 + 2\beta\omega)(x - x')^2 + \beta^2\omega^2(x^2 - xx' + x'^2)}{4l^2\beta\omega} \right]. \tag{B.14}$$

Der reine Gauß-Zustand des einfachen harmonischen Oszillators ist nach den Ergebnissen des Abschnitts 2.3.1 durch einen einzigen Parameter $m\omega$ vollständig bestimmt. Beim Übergang zum Gemisch tritt dann offenbar ein zusätzlicher Parameter mT auf.

Die kanonische Dichtematrix des verschobenen harmonischen Oszillators

Sei nun der Hamilton-Operator durch

$$H = ax^2 + bp^2 + dx + ep \tag{B.15}$$

gegeben. Wir identifizieren die Masse und die Frequenz des Oszillators durch

$$b = \frac{1}{2m} \quad \Leftrightarrow \quad m = \frac{1}{2b} \quad \text{bzw.} \quad a = \frac{m\omega^2}{2} \quad \Leftrightarrow \quad \omega = 2\sqrt{ab}. \tag{B.16}$$

Es folgt

$$m\omega = \sqrt{\frac{a}{b}} \quad \text{und} \quad l = \sqrt[4]{\frac{b}{4a}}. \tag{B.17}$$

B. Die kanonische Dichtematrix für bilineare Hamilton-Operatoren

Die Leiteroperatoren sind durch

$$\hat{a} = \frac{1}{2l}x + ilp \quad \text{und} \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{2l}x - ilp \quad (\text{B.18})$$

gegeben.

Der Verschiebungsoperator

$$D(\alpha) = e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}}, \quad (\text{B.19})$$

mit $D^\dagger(\alpha) = D^{-1}(\alpha) = D(-\alpha)$ führt auf

$$\begin{aligned} D(-\alpha)x D(\alpha) &= x + 2l \operatorname{Re} \alpha = x + \sqrt[4]{\frac{4b}{a}} \operatorname{Re} \alpha, \\ D(-\alpha)p D(\alpha) &= p + \frac{1}{l} \operatorname{Im} \alpha = p + \sqrt[4]{\frac{4a}{b}} \operatorname{Im} \alpha, \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

so dass mit $H_0 = ax^2 + bp^2$

$$\begin{aligned} D(-\alpha)H_0D(\alpha) &= a\left(x + \sqrt[4]{\frac{4b}{a}} \operatorname{Re} \alpha\right)^2 + b\left(p + \sqrt[4]{\frac{4a}{b}} \operatorname{Im} \alpha\right)^2 \\ &= ax^2 + bp^2 + 2\sqrt[4]{4a^3b}x \operatorname{Re} \alpha + 2\sqrt[4]{4ab^3}p \operatorname{Im} \alpha + \sqrt{ab}|\alpha|^2 \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

folgt.

Mit den Definitionen

$$\operatorname{Re} \alpha = \frac{d}{2\sqrt[4]{4a^3b}} \quad \text{und} \quad \operatorname{Im} \alpha = \frac{e}{2\sqrt[4]{4ab^3}}, \quad (\text{B.22})$$

so dass

$$\sqrt{ab}|\alpha|^2 = \sqrt{ab}\left(\frac{d^2}{4\sqrt[4]{4a^3b}} + \frac{e^2}{4\sqrt[4]{4ab^3}}\right) = \frac{d^2}{4a} + \frac{e^2}{4b}, \quad (\text{B.23})$$

ergibt sich für den Hamilton-Operator

$$H = D(-\alpha)H_0D(\alpha) - \frac{d^2}{4a} - \frac{e^2}{4b}. \quad (\text{B.24})$$

Die Ortsdarstellung des zugehörigen kanonischen Zustandes ist damit

$$\langle x | \frac{1}{Z} e^{-\beta H} | x' \rangle = \frac{1}{Z} e^{\beta\left(\frac{d^2}{4a} + \frac{e^2}{4b}\right)} \iint \langle x | D(-\alpha) | y \rangle \langle y | e^{-\beta H_0} | y' \rangle \langle y' | D(\alpha) | x' \rangle dy dy'. \quad (\text{B.25})$$

Den Term $\langle y | e^{-\beta H_0} | y' \rangle$ kennen wir bereits aus dem letzten Abschnitt. Die Ortsdarstellung des Verschiebungsoperators können wir berechnen, indem wir ihn zunächst auf Orts- und Impulsoperatoren umschreiben

$$D(\alpha) = e^{-i \operatorname{Re} \alpha \operatorname{Im} \alpha} e^{\frac{1}{l} \operatorname{Im} \alpha x} e^{-i 2l \operatorname{Re} \alpha p} \quad (\text{B.26})$$

und anschließend das Matrixelement mit Orts-Eigenzuständen bilden

$$\begin{aligned}\langle x | D(\alpha) | x' \rangle &= e^{-i \operatorname{Re} \alpha \operatorname{Im} \alpha} e^{\frac{i}{l} \operatorname{Im} \alpha x} \langle x | e^{-i 2l \operatorname{Re} \alpha p} | x' \rangle \\ &= e^{-i \operatorname{Re} \alpha \operatorname{Im} \alpha} e^{\frac{i}{l} \operatorname{Im} \alpha x} \delta(x - x' - 2l \operatorname{Re} \alpha).\end{aligned}\quad (\text{B.27})$$

Damit erhalten wir für den Gauß-Zustand

$$\begin{aligned}\rho(x, x') &= \frac{1}{Z} e^{\beta \left(\frac{a^2}{4a} + \frac{c^2}{4b} \right)} e^{\frac{i}{l} \operatorname{Im} \alpha (x' - x)} Z_0 \frac{1}{l \sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{e^{\beta\omega} - 1}{e^{\beta\omega} + 1}} \\ &\quad \times \exp \left[-\frac{1}{4l^2 (e^{2\beta\omega} - 1)} \left\{ (x + 2l \operatorname{Re} \alpha)^2 (e^{2\beta\omega} + 1) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 4(x + 2l \operatorname{Re} \alpha)(x' + 2l \operatorname{Re} \alpha) e^{\beta\omega} + (x' + 2l \operatorname{Re} \alpha)^2 (e^{2\beta\omega} + 1) \right\} \right].\end{aligned}\quad (\text{B.28})$$

Für die Zustandssumme Z ergibt sich

$$1 = \int \rho(x, x) dx = \frac{1}{Z} e^{\beta \left(\frac{a^2}{4a} + \frac{c^2}{4b} \right)} Z_0 \quad \Rightarrow \quad Z = Z_0 e^{\beta \left(\frac{a^2}{4a} + \frac{c^2}{4b} \right)}.\quad (\text{B.29})$$

Im Ergebnis ist der Gauß-Zustand in Ortsdarstellung durch

$$\begin{aligned}\rho(x, x') &= \frac{1}{l \sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{e^{\beta\omega} - 1}{e^{\beta\omega} + 1}} e^{\frac{i}{l} \operatorname{Im} \alpha (x' - x)} \exp \left[-\frac{x^2 (e^{2\beta\omega} + 1) - 4xx' e^{\beta\omega} + x'^2 (e^{2\beta\omega} + 1)}{4l^2 (e^{\beta\omega} + 1)(e^{\beta\omega} - 1)} \right. \\ &\quad \left. - (x + x' + 2l \operatorname{Re} \alpha) \frac{\operatorname{Re} \alpha (e^{\beta\omega} - 1)}{l (e^{\beta\omega} + 1)} \right]\end{aligned}\quad (\text{B.30})$$

gegeben. Der Zustand ist damit durch vier Parameter bestimmt. Das sind zum Beispiel ω , T , $\operatorname{Re} \alpha$ und $\operatorname{Im} \alpha$. Der reine Zustand hat also wieder genau einen Parameter weniger als der gemischte Zustand in der Dichtematrix-Darstellung.

Die kanonische Dichtematrix für allgemeine bilineare Hamilton-Operatoren

Wir betrachten nun den allgemeinen bilinearen Hamilton-Operator (2.22). Wir wissen bereits, dass die linearen Terme durch eine Verschiebung eines harmonischen Oszillators mit H_0 erzeugt werden können. Den Term $c(xp + px)$ können wir durch eine Quetschung des Oszillators erzeugen. Mit dem Quetschungs-Operator

$$S(\sigma) = \exp \left[\frac{1}{2} (\sigma^* \hat{a}^2 - \sigma (\hat{a}^\dagger)^2) \right],\quad (\text{B.31})$$

mit $S^{-1}(\sigma) = S^\dagger(\sigma) = S(-\sigma)$ folgt mit der Definition $\sigma = |\sigma| e^{i\varphi} \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned}S(-\sigma)xS(\sigma) &= x(\cosh |\sigma| - \sinh |\sigma| \cos \varphi) - 2l^2 p \sinh |\sigma| \sin \varphi, \\ S(-\sigma)pS(\sigma) &= p(\cosh |\sigma| + \sinh |\sigma| \cos \varphi) - \frac{x}{2l^2} \sinh |\sigma| \sin \varphi,\end{aligned}\quad (\text{B.32})$$

B. Die kanonische Dichtematrix für bilineare Hamilton-Operatoren

so dass

$$\begin{aligned}
 S(-\sigma)H_0S(\sigma) &= \frac{m\omega^2}{2}(\cosh 2|\sigma| - \sinh 2|\sigma| \cos \varphi)x^2 \\
 &\quad + \frac{1}{2m}(\cosh 2|\sigma| + \sinh 2|\sigma| \cos \varphi)p^2 \\
 &\quad - \frac{\omega}{2} \sinh 2|\sigma| \sin \varphi(xp + px).
 \end{aligned} \tag{B.33}$$

Wir benötigen zur Erzeugung der Mischterme $c(xp + px)$ nur einen Parameter und können daher zum Beispiel $\varphi = \pi/2$ wählen. Dann ist $\sigma = i|\sigma|$. Anschließend lassen wir die Betragsstriche an σ weg und es folgt

$$S(-i\sigma)H_0S(i\sigma) = \frac{m\omega^2}{2} \cosh 2\sigma x^2 + \frac{p^2}{2m} \cosh 2\sigma - \frac{\omega}{2} \sinh 2\sigma(xp + px). \tag{B.34}$$

Um nun auch die linearen Terme zu erzeugen müssen wir den Oszillator verschieben. Wir finden

$$\begin{aligned}
 D(-\alpha)S(-i\sigma)H_0S(i\sigma)D(\alpha) &= \frac{m\omega^2}{2} \cosh 2\sigma x^2 + \frac{p^2}{2m} \cosh 2\sigma - \frac{\omega}{2} \sinh 2\sigma(xp + px) \\
 &\quad + \sqrt{2m\omega^3}(\cosh 2\sigma \operatorname{Re} \alpha - \sinh 2\sigma \operatorname{Im} \alpha)x \\
 &\quad + \sqrt{\frac{2\omega}{m}}(\cosh 2\sigma \operatorname{Im} \alpha - \sinh 2\sigma \operatorname{Re} \alpha)p \\
 &\quad + \omega(\cosh 2\sigma|\alpha|^2 - 2 \sinh 2\sigma \operatorname{Re} \alpha \operatorname{Im} \alpha).
 \end{aligned} \tag{B.35}$$

Wir können also

$$H = D(-\alpha)S(-i\sigma)H_0S(i\sigma)D(\alpha) - \omega(\cosh 2\sigma|\alpha|^2 - 2 \sinh 2\sigma \operatorname{Re} \alpha \operatorname{Im} \alpha) \tag{B.36}$$

setzen, wenn wir m , ω , σ , $\operatorname{Re} \alpha$ und $\operatorname{Im} \alpha$ entsprechend wählen.

Leider ist die Ortsdarstellung des Quetschungs-Operators S nicht einfach berechenbar, so dass wir die kanonische Dichtematrix in Ortsdarstellung nicht explizit angeben können.

C. Die Ableitung der Bewegungsgleichung für die Husimi-Funktion

Bei der Ableitung der Bewegungsgleichung für die Husimi-Funktion in Kapitel 2.5.1 sind wir von der von-Neumann-Gleichung für die Zeitentwicklung von Dichtematrizen ausgegangen. Das Bilden von Matrixelementen mit kohärenten Zuständen hat uns auf (2.75) geführt. Der zugrundeliegende Hamilton-Operator war in (2.74) gegeben.

Um eine geschlossene Bewegungsgleichung für die Husimi-Funktion zu finden, müssen wir Terme $\langle \alpha | [(a^\dagger \pm a)^n, A] | \alpha \rangle$ mit einem beliebigen Operator A auswerten. Diese beinhalten vier Typen von Termen. Zwei davon können leicht berechnet werden, denn es gilt

$$\langle \alpha | Aa | \alpha \rangle = \alpha \langle \alpha | A | \alpha \rangle \quad \text{und} \quad \langle \alpha | a^\dagger A | \alpha \rangle = \alpha^* \langle \alpha | A | \alpha \rangle . \quad (\text{C.1})$$

Die beiden anderen Terme $\langle \alpha | Aa^\dagger | \alpha \rangle$ und $\langle \alpha | aA | \alpha \rangle$ können wir aus den Ableitungen von kohärenten Zuständen nach dem Real- bzw. Imaginärteil zusammensetzen. Dabei bietet sich die Darstellung der kohärenten Zustände über den Verschiebungsoperator (B.19) $|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle$ an. Wir erhalten mit $\alpha \equiv u + iv$

$$\frac{\partial}{\partial u} |u + iv\rangle = \frac{\partial}{\partial u} e^{-\frac{1}{2}(u^2+v^2)} e^{(u+iv)a^\dagger} |0\rangle = (a^\dagger - u) |u + iv\rangle , \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{\partial}{\partial v} |u + iv\rangle = (ia^\dagger - v) |u + iv\rangle . \quad (\text{C.3})$$

Für die Ableitungen des Matrixelementes $\langle \alpha | A | \alpha \rangle$ ergibt sich damit

$$\frac{\partial}{\partial u} \langle \alpha | A | \alpha \rangle = \langle \alpha | Aa^\dagger | \alpha \rangle + \langle \alpha | aA | \alpha \rangle - 2u \langle \alpha | A | \alpha \rangle , \quad (\text{C.4})$$

$$-i \frac{\partial}{\partial v} \langle \alpha | A | \alpha \rangle = \langle \alpha | Aa^\dagger | \alpha \rangle - \langle \alpha | aA | \alpha \rangle + 2iv \langle \alpha | A | \alpha \rangle . \quad (\text{C.5})$$

Durch Addition bzw. Subtraktion dieser beiden Gleichungen finden wir

$$\langle \alpha | Aa^\dagger | \alpha \rangle = \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + u - i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v} + v \right) \right\} \langle \alpha | A | \alpha \rangle , \quad (\text{C.6})$$

$$\langle \alpha | aA | \alpha \rangle = \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + u + i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v} + v \right) \right\} \langle \alpha | A | \alpha \rangle . \quad (\text{C.7})$$

Mit Hilfe dieser Gleichungen wäre es möglich alle unbekanntenen Terme in (2.75) einzeln zu berechnen. Um alle Terme $\langle \alpha | [(a^\dagger \pm a)^n, A] | \alpha \rangle$ mit beliebigem n zu erhalten, werden wir hier jedoch weiter allgemein rechnen.

C. Die Ableitung der Bewegungsgleichung für die Husimi-Funktion

Wir definieren eine Funktion

$$f(\alpha, \lambda) = \langle \alpha | Ae^{\lambda(a^\dagger + a)} | \alpha \rangle, \quad (\text{C.8})$$

die wir unter Ausnutzung von (C.6), (C.7) und (C.1) nach dem Parameter λ ableiten

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} f(\alpha, \lambda) &= \langle \alpha | Ae^{\lambda(a^\dagger + a)} (a^\dagger + a) | \alpha \rangle \\ &= \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + 2u - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} \right\} f(\alpha, \lambda). \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Da der Operator in den geschweiften Klammern unabhängig vom Parameter λ ist, können wir die n -fache Ableitung durch die n -te Potenz des Operators ausdrücken. Anschließend setzen wir $\lambda = 0$ und erhalten den ersten Teil des Kommutators

$$\langle \alpha | A(a^\dagger + a)^n | \alpha \rangle = \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + 2u - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} \right\}^n \langle \alpha | A | \alpha \rangle. \quad (\text{C.10})$$

Bei der Berechnung des noch fehlenden Teils verfahren wir analog mit der komplex konjugierten Funktion $f^*(\alpha, \lambda)$ und erhalten für den ersten Kommutator

$$\langle \alpha | [(a^\dagger + a)^n, A] | \alpha \rangle = \left(\left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + 2u + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} \right\}^n - \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + 2u - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} \right\}^n \right) \langle \alpha | A | \alpha \rangle. \quad (\text{C.11})$$

Die Berechnung der Terme mit dem anderen Vorzeichen $\langle \alpha | [(a^\dagger - a)^n, A] | \alpha \rangle$ gelingt analog zu der bereits durchgeführten Rechnung, wenn wir eine andere Funktion

$$g(\alpha, \lambda) = \langle \alpha | Ae^{\lambda(a^\dagger - a)} | \alpha \rangle \quad (\text{C.12})$$

definieren. Wir finden

$$\langle \alpha | [(a^\dagger - a)^n, A] | \alpha \rangle = \left(\left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} + 2iv \right\}^n - \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} - 2iv \right\}^n \right) \langle \alpha | A | \alpha \rangle. \quad (\text{C.13})$$

Im Ergebnis haben wir alle Terme berechnet. Wir setzen die Ausdrücke (C.11) und (C.13) in die Bewegungsgleichung (2.75) ein und erhalten die gesuchte Bewegungsgleichung für die Husimi-Funktion

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} Q(\alpha) &= -\frac{\omega_0}{4} \left(\left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} + 2iv \right\}^2 - \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} - 2iv \right\}^2 \right) Q(\alpha) \\ &\quad + \frac{\omega^2(t)}{4\omega_0} \left(\left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + 2u + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} \right\}^2 - \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + 2u - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} \right\}^2 \right) Q(\alpha) \\ &\quad - F(t)l \left(\left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + 2u + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} \right\} - \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u} + 2u - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial v} \right\} \right) Q(\alpha) \\ &= -\frac{\omega_0}{4} \left(i \frac{\partial^2}{\partial u \partial v} + 4iv \frac{\partial}{\partial u} \right) Q(\alpha) + \frac{\omega^2(t)}{4\omega_0} \left(i \frac{\partial^2}{\partial u \partial v} + 4iu \frac{\partial}{\partial v} \right) Q(\alpha) \\ &\quad - iF(t)l \frac{\partial}{\partial v} Q(\alpha), \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

welche wir durch die Division durch i in die Form (2.76) bringen.

D. Gauß-Funktionen

Eine normierte Gauß-Funktion in n Dimensionen wird definiert als

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} e^{-\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{x}}, \quad (\text{D.1})$$

mit $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, einer symmetrischen ($\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$), positiv definiten ($\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ für alle $\mathbf{x} \neq 0$) Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$ und der Normierungskonstanten N .

Aus der Symmetrie-Eigenschaft und der positiven Definitheit folgt die Diagonalisierbarkeit der Matrix \mathbf{A} . Es existiert also eine orthogonale Matrix \mathbf{S} und eine diagonale Matrix \mathbf{D} mit

$$\mathbf{A} = \mathbf{S} \mathbf{D} \mathbf{S}^T. \quad (\text{D.2})$$

Da die Einträge von \mathbf{D} positiv sein müssen, existiert die Quadratwurzel dieser Matrix. Somit erhalten wir durch die Definition von

$$\mathbf{W} = \mathbf{S} \mathbf{D}^{\frac{1}{2}} \mathbf{S}^T \quad (\text{D.3})$$

auch eine Quadratwurzel von \mathbf{A} , denn

$$\mathbf{W} \mathbf{W} = \mathbf{W}^2 = \mathbf{S} \mathbf{D}^{\frac{1}{2}} \mathbf{S}^T \mathbf{S} \mathbf{D}^{\frac{1}{2}} \mathbf{S}^T = \mathbf{S} \mathbf{D} \mathbf{S}^T = \mathbf{A}. \quad (\text{D.4})$$

Die Matrix \mathbf{W} muss ebenfalls symmetrisch und positiv definit sein.

Für die Determinanten dieser Matrizen gilt weiterhin der Zusammenhang:

$$\det \mathbf{W} = \sqrt{\det \mathbf{A}}. \quad (\text{D.5})$$

Damit lässt sich die Normierungskonstante der Gauß-Funktion (D.1) bestimmen:

$$N = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-(\mathbf{x} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}/2) \cdot \mathbf{A} (\mathbf{x} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}/2) + \mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}/4} d\mathbf{x}. \quad (\text{D.6})$$

Durch die Substitution $\mathbf{x}' = \mathbf{x} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}/2$ folgt:

$$N = e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}/4} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\mathbf{x}' \cdot \mathbf{A} \mathbf{x}'} d\mathbf{x}'. \quad (\text{D.7})$$

Substituieren wir nun $\mathbf{y} = \mathbf{W} \mathbf{x}'$, so dass $d\mathbf{y} = \det \mathbf{W} d\mathbf{x}'$, so bleibt

$$N = \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{A}}} e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}/4} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\mathbf{y} \cdot \mathbf{y}} d\mathbf{y} = \sqrt{\frac{\pi^n}{\det \mathbf{A}}} e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}/4}. \quad (\text{D.8})$$

D. Gauß-Funktionen

Für den Erwartungswert einer beliebigen Komponente erhalten wir unter Verwendung derselben Substitutionen (und mit $\mathbf{y} = \mathbf{W}\mathbf{x}'$, so dass $x'_m = \sum_k W_{mk}^{-1} y_k$):

$$\begin{aligned}
 \langle x_m \rangle &= \frac{1}{N} e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 4} \int_{\mathbb{R}^n} x_m e^{-(\mathbf{x} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 2) \cdot \mathbf{A} (\mathbf{x} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 2)} d\mathbf{x} \\
 &= \frac{1}{N} e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 4} \int_{\mathbb{R}^n} \left(x'_m + \frac{1}{2} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_m \right) e^{-\mathbf{x}' \cdot \mathbf{A} \mathbf{x}'} d\mathbf{x}' \\
 &= \frac{1}{2} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_m + \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{A}}} \sum_k W_{mk}^{-1} \frac{1}{N} e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 4} \int_{\mathbb{R}^n} y_k e^{-\mathbf{y} \cdot \mathbf{y}} d\mathbf{y} \\
 &= \frac{1}{2} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_m .
 \end{aligned} \tag{D.9}$$

Wiederum mit denselben Substitutionen berechnen wir den Erwartungswert für das Produkt zweier Orts-Komponenten:

$$\begin{aligned}
 \langle x_l x_m \rangle &= \frac{1}{N} e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 4} \int_{\mathbb{R}^n} x_l x_m e^{-(\mathbf{x} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 2) \cdot \mathbf{A} (\mathbf{x} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 2)} d\mathbf{x} \\
 &= \frac{1}{N} e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 4} \int_{\mathbb{R}^n} \left(x'_l + \frac{1}{2} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_l \right) \left(x'_m + \frac{1}{2} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_m \right) e^{-\mathbf{x}' \cdot \mathbf{A} \mathbf{x}'} d\mathbf{x}' \\
 &= \frac{1}{4} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_l (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_m + \frac{1}{N} e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 4} \int_{\mathbb{R}^n} x'_l x'_m e^{-\mathbf{x}' \cdot \mathbf{A} \mathbf{x}'} d\mathbf{x}' \\
 &= \frac{1}{4} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_l (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_m + \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{A}}} \sum_{j,k} W_{lj}^{-1} W_{mk}^{-1} \frac{1}{N} e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 4} \int_{\mathbb{R}^n} y_j y_k e^{-\mathbf{y} \cdot \mathbf{y}} d\mathbf{y} .
 \end{aligned} \tag{D.10}$$

Mit der Symmetrie-Eigenschaft der Matrix \mathbf{W} folgt schließlich

$$\begin{aligned}
 \langle x_l x_m \rangle &= \frac{1}{4} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_l (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_m + \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{A}}} \sum_{j,k} W_{lj}^{-1} W_{mk}^{-1} \frac{1}{N} e^{\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} / 4} \frac{\sqrt{\pi^n}}{2} \delta_{jk} \\
 &= \frac{1}{4} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_l (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_m + \sum_k W_{lk}^{-1} W_{mk}^{-1} \frac{1}{2} \\
 &= \frac{1}{4} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_l (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_m + \frac{1}{2} \sum_k W_{lk}^{-1} W_{km}^{-1} \\
 &= \frac{1}{4} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_l (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_m + \frac{1}{2} \left(\mathbf{W}^{-1} \mathbf{W}^{-1} \right)_{lm} \\
 &= \langle x_l \rangle \langle x_m \rangle + \frac{1}{2} \mathbf{A}_{lm}^{-1} .
 \end{aligned} \tag{D.11}$$

Literaturverzeichnis

- [1] U. WEISS, *Quantum Dissipative Systems*, volume 13 of *Series in Modern Condensed Matter Physics*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., third edition, 2008.
- [2] H. P. BREUER and F. PETRUCCIONE, *The theory of open quantum systems*, Oxford University Press, 2002.
- [3] R. ALICKI and K. LENDI, *Quantum Dynamical Semigroups and Applications*, volume 286 of *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, 1987.
- [4] T. DITTRICH, P. HÄNGGI, G.-L. INGOLD, B. KRAMER, G. SCHÖN, and W. ZWERGER, *Quantum Transport and Dissipation*, WILEY-VCH Verlag GmbH, 1998.
- [5] F. HAAKE and R. REIBOLD, *Phys. Rev. A* **32**, 2462 (1985).
- [6] H. KLEINERT, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., third edition, 2004.
- [7] A. ISAR, A. SANDULESCU, H. SCUTARU, E. STEFANESCU, and W. SCHEID, *Int. J. Mod. Phys. E* **3**, 635 (1994).
- [8] G. LINDBLAD, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119 (1976).
- [9] V. GORINI, A. KOSSAKOWSKI, and E. C. G. SUDARSHAN, *J. Math. Phys.* **17**, 821 (1976).
- [10] H. GRABERT, P. SCHRAMM, and G.-L. INGOLD, *Phys. Rep.* **168**, 115 (1988).
- [11] V. GORINI, A. FRIGERIO, M. VERRI, A. KOSSAKOWSKI, and E. C. G. SUDARSHAN, *Rep. Math. Phys.* **13**, 149 (1978).
- [12] R. KOSLOFF, M. A. RATNER, and W. B. DAVIS, *J. Chem. Phys.* **106**, 7036 (1997).
- [13] P. ULLERSMA, *Physica* **32**, 27 (1966).
- [14] C. ZERBE and P. HÄNGGI, *Phys. Rev. E* **52**, 1533 (1995).
- [15] R. KARRLEIN and H. GRABERT, *Phys. Rev. E* **55**, 153 (1997).

Literaturverzeichnis

- [16] K. HUSIMI, *Prog. Theor. Phys.* **9**, 238 (1953).
- [17] K. HUSIMI, *Prog. Theor. Phys.* **9**, 381 (1953).
- [18] R. J. GLAUBER, *Phys. Rev.* **131**, 2766 (1963).
- [19] K. HUSIMI, *Proc. Phys. Math. Soc. Jpn.* **22**, 264 (1940).
- [20] K. E. CAHILL and R. J. GLAUBER, *Phys. Rev.* **177**, 1882 (1969).
- [21] P. CARRUTHERS and M. M. NIETO, *Am. J. Phys.* **33**, 537 (1965).
- [22] E. WIGNER, *Phys. Rev.* **40**, 749 (1932).
- [23] H. S. ROBERTSON and M. A. HUERTA, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 825 (1969).
- [24] G. S. AGARWAL, *Phys. Rev. A* **3**, 828 (1971).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all jenen bedanken, die mir bei der Erstellung dieser Arbeit und während meines gesamten Studiums hilfreich zur Seite standen. Mein herzlicher Dank gilt Herrn Prof. Dr. H. Fehske für die Vergabe und die ausgezeichnete Betreuung dieser Arbeit, sowie für viele hilfreiche Ratschläge. Besonderen Dank schulde ich Herrn Dr. A. Alvermann, der durch seine engagierte Betreuung und stete Hilfsbereitschaft sehr zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat und mir jederzeit mit fachlichem Rat zur Seite stand. Bedanken möchte ich mich auch bei den Mitarbeitern der gesamten Arbeitsgruppe, die immer ein offenes Ohr für meine Probleme hatten und mir bei deren Bewältigung stets geholfen haben. Einen Dank auch an meine Kommilitonen für die fruchtbare Zusammenarbeit während des Studiums und der Hilfsbereitschaft bei vielen kleinen Fragen. Nicht zuletzt möchte ich meinen Eltern für deren Unterstützungen in jeglicher Hinsicht während der Erstellung der Masterarbeit und der Dauer des Studiums meinen Dank aussprechen.