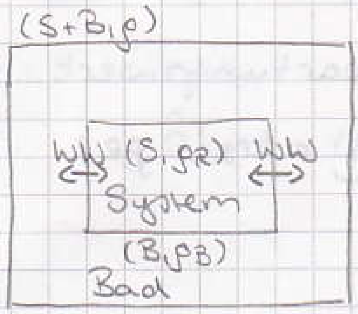
XI. Projektionsoperator Techniken für System-Bad-Wechselwirkungen

Literatur: Breuer „Open quantum systems"

Beschreibung der Dynamik offener Quantensysteme:

· Häufig kann man das Gesamt System aufteilen in System und Bad.



· Ein offenes System S koppelt an Umgebung B

· Das Bad hat viele Freiheitsgrade und ist oft noch im thermodynamischen Gleichgewicht.

· Wir interessieren uns nur für die Freiheitsgrade des Systems.

· S ist reduziertes System mit reduzierter Anzahl an Freiheitsgraden

Beispiel:

System ist meist elektronisches System. Bad können ein Ensamble von Phononmoden oder auch Ensamble von Elektronen sein.

Hier betrachteter Fall: System sind Elektronen, Bad sind Phononen

Der Zustand des Gesamtsystems wird beschrieben durch die Dichtematrix ρ. Der Erwartungswert einer System-Observablen $\hat{O}$ (hier elektronischen Observablen) ist bestimmt durch:

$$\langle \hat{O} \rangle = tr(\hat{O}\rho) = tr_S(\underbrace{tr_B(\hat{O}\rho)}_{\text{wirkt nicht aufs Bad}}) = tr_S(\hat{O}\, tr_B\, \rho)$$

$$\hookrightarrow tr(\ldots) = \sum_n \sum_m \langle n|_S \langle m|_B \ldots |m\rangle_B |n\rangle_S$$

Basis im Bad

Basis im System

Bei der Beschreibung von offenen Quantensystemen ist

$\rho_R = tr_B\, \rho$ zentrale Größe. ρ_R ist reduzierte Dichtematrix des offenen Quantensystems S und hat eine sehr viel niedrigere Dimension. Im Prinzip reicht es aus, wenn wir nur die relevante Dichtematrix betrachten.

Ziel → Gl.

Aber Achtung:

ρ_R lebt nur im Liouvilleraum (Raum der Dichtematrizen) des Systems!

Unser Hamiltonoperator insbesondere für die System-Bad-Kopplung ist Operator im Produktraum von System und Bad.

Wir müssen also ρ_R ergänzen:

$\rho_R \otimes \underbrace{\rho_B}_{\text{Bad im Gleichgewicht}}$ gibt gleichen Erwartungswert: $tr(\hat{O}\,\rho_R \otimes \rho_B)$

$= tr_S(\hat{O}\,\rho_R) \otimes \underbrace{tr_B(\rho_B)}_{=1} = tr_S(\hat{O}\,\rho_R)$

z.B. kanonische Verteilung

Aber auch der Einfluss von Abweichungen der kanonischen Verteilung ist wichtig.

Lösung: Projektionsoperatorformalismus!

Grundlegende Idee: Die Operation des Abspurens übers Bad wird als formale Projektion betrachtet:

$\rho \mapsto P\rho$ Projektionsoperator: $P^2 = P$, $Q^2 = Q$, $P + Q = Id$

Superoperator

Die Dichtematrix $P\rho$ soll relevanten Teil der Dichtematrix ρ beschreiben.

$\rho \mapsto Q\rho$ irrelevanten Anteil.

(Ziel: Gl. für $P\rho$ aufstellen!) nur sagen!

$P\rho := \underbrace{tr_B(\rho)}_{\text{relevanter Anteil}} \otimes \underbrace{\rho_B}_{\text{Bad im Gleichgewicht}}$

Der ~~zu~~ zu P orthogonale Projektor ist $Q = Id - P$

$\rho = \underbrace{P\rho}_{\text{relevanter Anteil}} + \underbrace{Q\rho}_{\text{nicht relevanter Anteil}}$ ⇐ mit Bad Abweichend vom Gleichgewicht

Ziel: Bewegungsgl. für ρ_0 ableiten!
(Zwei Varianten: Nakajima-Zwanzig Gl., time-convolutionless projection operator method)
Wir werden dabei das Wechselwirkungsbild verwenden!

$$H = \underbrace{H_{0,S}}_{\text{System}} + \underbrace{H_{0,B}}_{\text{Bad}} + \underbrace{H_{SB}}_{\text{System-Bad-Wechselwirkung}}$$

H_{SB} bestimmt Dynamic der Dichtematrix.

XI Die Nakajima-Zwanzig Gleichung

Die Liouville-von Neumann Gleichung kann mit Hilfe von Superoperatoren (den Operatoren im Liouvilleraum / Hilbertraum der Spurklasseoperatoren) ausgedrückt werden.

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \frac{i}{\hbar}[\rho, H_{SB}]_- = -\frac{i}{\hbar} H_{SB-}(t)\rho \equiv \mathcal{L}(t)\rho$$

Liouville-Superoperator

Wobei $A_L\rho = A\rho$, $A_R\rho = \rho A$
und $A_- := A_L - A_R$, $A_+ := \frac{1}{2}(A_L + A_R)$
Wir nehmen jetzt die Gleichung und teilen diese in den irrelevanten und den relevanten Teil auf.

Vermerk: $P + Q = \mathrm{Id}$

(i) $$\frac{\partial}{\partial t} P\rho(t) = -\frac{i}{\hbar} P H_{SB-}(t) \underset{\mathrm{Id}=P+Q}{\wedge} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} P H_{SB-}(t) P\rho(t) - \frac{i}{\hbar} P H_{SB-}(t) Q\rho(t)$$

Ziel: $Q\rho(t)$ aus der Gl. zu entfernen!

analog...

(ii) $$\frac{\partial}{\partial t} Q\rho(t) = -\frac{i}{\hbar} Q H_{SB-}(t) Q\rho(t) - \frac{i}{\hbar} Q H_{SB-}(t) P\rho(t)$$

Wir versuchen (ii) jetzt formal zu lösen!
Dafür definieren wir den Propagator $\mathcal{G}$, der

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar} Q H_{SB-}(t)\mathcal{G}(t,t_0) \text{ löst.} \qquad \mathcal{G}(t,t) = \mathrm{Id}$$

Dieser ist (ÜA): (Analog zur Propagation im Hilbertraum, / Greensfkt. " im Liouvilleraum)

Zeitordnungsoperator

$$\mathcal{G}(t,t_0) = T_\leftarrow \exp\left(\int_{t_0}^{t} -\frac{i}{\hbar} Q H_{SB-}(t')\,dt'\right)$$

Herleitung Übungsaufgabe

Wir multiplizieren $(\mathcal{G}(t,t_0))^{-1} := \mathcal{G}(t_0,t)$ jetzt von links an (ii)

$$\mathcal{G}(t_0,t)\frac{\partial}{\partial t} Q\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{G}(t_0,t)\, Q H_{SB-}(t)\, Q\rho(t) - \frac{i}{\hbar}\mathcal{G}(t_0,t)\, Q H_{SB-}(t)\, P\rho(t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}(t_0,t) Q\rho(t) - \frac{i}{\hbar}\mathcal{G}(t_0,t)\, Q H_{SB-}(t)\, Q\rho(t)$$
$$= -\frac{i}{\hbar}\mathcal{G}(t_0,t)\, Q H_{SB-}(t)\, Q\rho(t) - \frac{i}{\hbar}\mathcal{G}(t_0,t)\, Q H_{SB-}(t)\, P\rho(t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{G}(t_0,t)\, Q\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{G}(t_0,t)\, Q H_{SB-}(t)\, P\rho(t)$$

Integration:

$$\mathcal{G}(t_0,t)\, Q\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathcal{G}(t_0,s)\, Q H_{SB-}(s)\, P\rho(s)\, ds + \underbrace{Q\rho(t_0)}_{\text{Anfangsbedingung}}$$

$\mathcal{G}(t,t_0)\cdot|$

$$Q\rho(t) = \underbrace{\mathcal{G}(t,t_0)\mathcal{G}(t_0,t)}_{\mathrm{Id}}\, Q\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathcal{G}(t,s)\, Q H_{SB-}(s)\, P\rho(s)\, ds + \mathcal{G}(t,t_0)\, Q\rho(t_0)$$

Das kann jetzt in die Gleichung für $P\rho$ eingesetzt werden.

$$\frac{\partial}{\partial t}P\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}P H_{SB-}(t)\, P\rho(t) - \frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} P H_{SB-}(t)\, \mathcal{G}(t,s)\, Q H_{SB-}(t)\, P\rho(s)\, ds$$
$$-\frac{i}{\hbar}P H_{SB-}(t)\,\mathcal{G}(t,t_0)\, Q\rho(t_0) \quad \| \text{ Nakajima-Zwanzig-Gl.}$$

- exakte Gl. für relevante Freiheitsgrade des reduzierten Systems
- inhomogener Term $P H_{SB-}(t)\,\mathcal{G}(t,t_0)\, Q\rho(t_0)$ abhängig von den Anfangsbedingungen zur Zeit t_0.
- Integral über Vergangenheit des Systems im Intervall $[t_0,t]$
- Reduktion der Freiheitsgrade in der effektiven Beschreibung von offenen Systemen führt zu Nicht-Markov'schem Verhalten.

Die Gleichung kann mit Hilfe des Integral kernels

$$K(t,s) = -\frac{1}{\hbar^2} P H_{SB-}(t) \mathcal{G}(t,s) Q H_{SB-}(s) P$$

ausgedrückt werden.

Wir sehen uns den Fall $P H_{SB-}(t) P = 0$ an.

Trifft z.B. zu bei einem harmonischen Bad und wenn H_{SB} linear in Badoparatoren z.B. b^+, b ist.

Dann ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} P\rho(t) = \underbrace{\int_{t_0}^{t} ds\, \mathcal{K}(t,s) P\rho(s)}_{\text{Einfluss des Bades}} \underbrace{- \frac{i}{\hbar} P H_{SB-}(t) \mathcal{G}(t,t_0) Q \rho(t_0)}_{\text{Anfangsbedingung}}$$

Haben wir zu Beginn faktorisierende Anfangsbedingungen, so gilt $Q\rho(t_0) = 0$! $(\rho(t_0) = \rho_R(t_0) \otimes \rho_B \rightarrow P\rho(t_0) = \rho(t_0))$

Dann verschwindet inhomogener Term:

$$\frac{\partial}{\partial t} P\rho(t) = \int_{t_0}^{t} ds\, \underbrace{K(t,s) P\rho(s)}$$

Man sieht, dass die gesamte Historie von $P\rho(s)$ wichtig ist.

Also sind Gedächtniseffekte (sog. Nicht-Markov'sche Effekte) wichtig!

Problem: Das ist in der Regel numerisch sehr aufwendig!

Für die Auswertung muss $\mathcal{K}$ bestimmt werden.

Selten gelingt das exakt, meist wird $\mathcal{K}$ in Ordnungen von H_{SB-} entwickelt:

$$\mathcal{K}(t,s) = -\frac{1}{\hbar^2} P H_{SB-}(t) \overset{\overset{\text{Neumann Reihe}}{\text{Id}}}{\overbrace{\mathcal{G}(t,s)}} Q H_{SB-}(s) P$$

jeweils eine Ordnung

Dies ist dann in zweiter Ordnung:

$$K^{(2)}(t,s) = -\frac{1}{\hbar} P H_{SB-}(t) H_{SB-}(t) P$$

wobei $P H_{SB}(t) P = 0$ verwendet wurde.

$$\frac{\partial}{\partial t} P\rho(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^{t} ds \, P H_{SB-}(t) \, H_{SB-}(s) \, P \rho(s)$$

Setzen wir die Operatoren ein:

$$\frac{\partial}{\partial t} P\rho(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^{t} ds \, \underbrace{tr_B \left[H_{SB}(t), \left[H_{SB}(s), P\rho(s) \right]_- \right]_-}_{\text{Hängt immer noch von Vergangenheit ab!}}$$