In der welt der offenen Quantensysteme sind wir interessiert an möglichst akkuraten Berechnungsmethoden der Zeitentwicklung eines Quantensystems. Das Quantensystem wird dabei beeinflusst von wärme. In quantenphysik wird diese Wärme, auch thermisches Bad genannt, als eine Summe verschiedener Moden mit verschieden Frequenzen beschrieben, die an ein System koppelt. Dabei interessiert uns meist einen Ausdruck der zeitabhängigen Dichtematrix. Bei vielen Methoden wie z.B Redfield und Lindblad-mastergleichung wird eine Markov und oder eine Bornnäherung getroffen um Bewegungsgleichung für offene Quantensysteme aufzustellen und zu lösen. Bei Markov Näherung wird angenommen dass das Bad keine Gedächniseffekte hat. Ebenfalls beinhaltet die Markovnäherung, in den meisten interpretationen, dass die Kopplungskonstante für alle Frequenzen die gleiche ist. Die die Bornnäherung besagt aus dass das Bad nicht vom system beeinflusst wird, also keine Informationen des Quantensystems in das Bad übergehen. Und somit das Bad nicht von dem quantensystem beeinflusst wird. Doch gerade Gedächniseffekte sind in der aktuellen Forschung der Quantenphysik von grosser Interesse. Um nur ein Forschungsgebiet zu nennen wäre da z.B das Giantatom, welches das Bad beeinflusst und nach einer gewissen zeit, die durch seine grösse gegeben ist, wieder durch seine eigene Emission beeinflusst wird. Schon früh hatten Feynman und Vernom einen Pfadintegral formalismus aufgestellt welche die Bewegung eines willkürlichen Quantesystems, gekoppelt an ein thermisches Bad exakt beschreibt. Das thermische Bad im bosonischen Fall kann somit in seiner korrelationsfunktion beschrieben werden. Doch Pfadintegrale lassen sich nur für bestimmte fälle lösen. Jedoch konnte tanimura aus ihnen eine hirarchie aus gekoppelten Differentialgleichungen aufstellen die a priori exakt ist, jedoch irgendwann abgebrochen werden muss. Und für diskrete künstliche/matsubara frequenzen gelöst werden kann. Diese methode ist sehr vielfältigwurde kürzlich erfolgreich für optochemische prozesse umgesetzt. (Tanimura nummericly exact approach to openquantum systems).

Herleitung:

Feyynam und wernom beschreiben wie ein bad mit koordinaten xi an ein testsystem q mit dem potential V koppelt. (Bild aus feynamn vernom)

Auf die Herleitung des influenzfunktionals wede ich aus zeitlichen gründen nicht genau eingehen.

Eine übergangsamplitude vom zustand n,m kann mit gleichung 2.6 gegeben werden. Das influenzfunktional F(q,q) wird mit gleichung 2.7 gegeben. Q beschreibt mein quantensystem und x meine thermisches bad, das mithilfe eines potentials gestört wird. Die koordinaten des bades Xi treten quadratisch in der Action S(x) auf, was man sich zunutzen machen kann und ausintegriert werden können. Der kernel des bades kann dann mittels gaussintegral gebildet werden. Für ein thermisches bosonisches bad erhalten wir dann den kernel j(w)\*coth()...

Einen ausdruck für die dichte matrix an einem zeitpunkt T aus einer initialen zeit tau ergibt sich dann wie folgt. 2.18

HEOM:

Das influenz funktional hängt jtz nur noch von den systemkoordinaten und der korrelationsfunktionen des bades ab. Die Badkorelationsfunktion wilgerade für eine nummerische implementation in sogenante künstliche frequnzen geschreiben werden. Somit kann der coth(T) in in eine reihendarstellung gebracht werden. Das geschieht mithilfe der matsubara frequenzen. Das integral über den frequenzraum wird somit in eine summe von komplexen zahlen umgeschrieben, was uns einfacher macht, das integral mithilfe des residuensatzes zu lösen. Die korrelationsfunktion lässt sich dann somit in eine exponenentialdarstellung überführen.

Die korelationsfunktion des bades ist eine gleichung die abhängig ist von der temperatur der frequenzraumes. Die zeitabhängige dichtematrix rho(t) einen ausruck mit rho(t,w1,w2...T)

Wie feynam vernom schon beschrieben hat, kann man rho(t) als pfadintegral beschreiben, bei dem die badkoordinaten bereits ausintegriert wurden. Um aber nicht ein pfadintegral über die koordinaten des testsystems lösen zu müssen, (was auch mit anderen ansätzen bereits probiert wurde), wird aus dem pfadintegral eine Bewegungsgleichung inform einer gekoppelten differentialgleichung konstruiert, indem man den ausdruck für rho(t) nach der zeit ableitet.

Der teil, der des pfadintegrals wo ein komutator und ein antikomutator des badpotentials mit der dichtematrix auftritt. (V^x,V°) kann natürlich nicht abgelleitet werden. 4.14 Da man den ausdruck von rho nicht kennt. Da kommt dann die erste hilfsdichtematrix ins spiel rho\_1.

Wird dann wieder um die hilfsdichtematrix rho\_1 auf die selbe art und weise entickelt. Kommt rho\_n ins spiel. Und so weiter. Rho\_n ist dann gegeben mit der gl 4.15.

Da nun die dichtematrix sowie von den diskreten frequenzen abhängt. Muss der ausdruck für alle möglichen matsubarafrequenen einzeln aufgescieben werden und aufsumiert. Man erhält dann folgende formel für die bewegungsgleichung Nter hirarchie: 4.4 aus pra41. Bemerke den zugekommene liouvillien und vonneumangleichung, der durch die zeitliche ableitung des system action im pfadintegral hervorkommt.

Daraus ergibt sich folgende gekoppelte diffgleichung mit der dieser strukur die eigentlich durch die produktregel des differentials ensteht. (4.5 und bild der hirarchie.)

Diese darstellung ist für die hirarchie mit zwei matsubara frequenzen. Die dichtematrix r\_oo eintspricht der realen dichtematrix des quantensystems. Für ein qubit hat sie also die dimension 2. Die darstellung hier ist ordnung aufgeschrieben. Zuerst erscheint also die vonneuman gleichung mit dem liovillien. Darauf folgt die abhängikeitet der ersten hilfsdichtematrix.

Erst die zeitliche änderung der hilfsdichtematrix ist dann vom bad abhängig. Diese erste hilfsdichtematrix wird dann für jee einzelne matsubarafrequenz berechnet. Siehe die anzahl der indizes der hilfsdichtematritzen beschreiben die anzahl der matsubarafrequenzen. Die höhe von n beschreiben dann die nte entwichklung um die jeweilige frequenz.