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 Bornnäherung besagt, 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 Strahlung in das thermische Bad emitiert und nach einer gewissen zeit, die durch seine räumliche Ausdehnung gegeben ist, wieder emittiert. Somit wird es durch seine eigene Emission beeinflusst. 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 durch Korrelationsfunktionen beschrieben werden. Doch Pfadintegrale lassen sich immer für alle Fälle lösen. Jedoch konnte Tanimura aus ihnen eine Hirarchie aus gekoppelten Differentialgleichungen aufstellen die a priori exakt ist, jedoch irgendwann abgebrochen werden muss. Die Vorteile von HEOM ist seine vielfältigkeit und die möglichkeit einer effizienten nummerischen Implementierung. Erst kürzlich wurde HEOM erfolgreich für optochemische Prozesse angewendet. (Tanimura nummericly exact approach to openquantum systems).

Herleitung:

Feynam und vernom beschrieben schon 1963 die Bewegungsgleichung wie ein bad mit koordinaten xi an ein testsystem q mit dem potential V koppelt, mit dem Pfadintegralformalismus. (Bild aus feynamn vernom)

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

Mit dem Pfadintegralformalismus lassen sich wie z.s 2.6 eine Übergangsamplitude vom zustand n zu m berechnet werden. Da koordinaten des bades Xi treten quadratisch in der Action Sbad(x) auf, wodurch man das wicktheorem benutzen kann. With the help of the Wick theorem, n-point correlation functions can be expressed as a sum of products of two-point correlation functions. These, in turn, can be integrated out by multigaussian Gaussian integral. Es ensteht Somit der Kernel des Bades mittels Gaussintegral gebildet werden. Alle Therme die die Badkoordinaten beinhalten werden zu dem Influenzfunktinal. Das in sogenannte Feynmaninfluenzfunktional F(q,q) wird mit gleichung 2.7 gegeben. Q beschreibt die system koordinate die Interaction zwischen x meine thermisches bad betreibt. Mit dem gaussian noise der brown motion werden dann V(Q,t) zu V(Q)\*C(t) wobei c(t) die korelationsfunktion ist. Nach dem ausintegrieren der bademoden über ein multigaussian erhalten wir Für ein thermisches bosonisches Bad erhalten wir dann den kernel der von der korrelationsfunktion des bades und der action der kopplung kommt. Die korrelationsfunktionen lassen sich in unserem bosonischen fall mit j(w)\*coth()... Wobei J(w) die Spektraldichte istbeschreiben.

Gewünscht ist einen Ausdruck für die Dichtematrix in Abhängigkeit der Zeit. Dieser Ausdruck für die Dichtematrix an einem zeitpunkt T aus einer initialen zeit tau ergibt sich dann wie folgt. Wäre dann analog 2.18/2.17 diese beiden gleichung vielleicht als stelle von der übergangsamplitude 2.6

HEOM:

Solche Pfadintegrale lassen sich jedoch noch nicht direkt lösen. Jedoch fand Tanimura im paper. eine Möglichkeit, eine Bewegungsgleichung in differentieller Form aus dem Pfadintegralformal für die Dichtematrix herzuleiten.

Wir bemerken, dass das Influenz funktional hängt jetzt nur noch von den Systemkoordinaten und der Korrelationsfunktionen des Bades ab. Die Badkorelationsfunktion ist abhängig von der Spektralen dichte und den frequnzen. Für eine Nummerische implementation und eine expansion um die jeweilige Frequenz, müssen die Frequenzen diskretisiert werden.

Die ursprüngliche Dichtematrix ρ(t)\rho(t)ρ(t) hängt nun nicht nur von der Zeit, sondern auch von den Frequenzmoden γk\gamma\_kγk​ des Bades ab. Das bedeutet, dass wir für jede Frequenz kkk eine eigene Hilfs-Dichtematrix einführen: Um die Effekte der Badkorrelationen in das System einzubinden, erweitern wir die reduzierte Dichtematrix des Systems durch zusätzliche Dichtematrizen, die von den Frequenzen des Bades abhängen. Jede dieser Dichtematrizen beschreibt die Dynamik des Systems, beeinflusst durch eine spezifische Frequenzmode des Bades.“

Nach einer fourietrafo ist Ausdruck für eine Dichtematrix im Pfadintegralformalismus dann von den Frequenzen rho\_(t,w1,w2,w...) abhängig.

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.)

Der coth(T) wird dadurch in in eine Reihendarstellung gebracht. Das geschieht mithilfe der matsubara frequenzen. Das integral über den frequenzraum wird somit in eine summe von komplexen zahlen umgeschrieben, was das lösen mittels Residuentheorem einfacher macht. Die Korrelationsfunktion lässt sich dann somit in eine Exponenentialdarstellung überführen. Die Korrelationsfunktion ist nun gegeben durch die Spektrale dichte, der Temperatur und den Matsubarafrequenzen.

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. Wenn man nun mithilfe der exponentialzerlegung die gekoppelten differentialgleichungen drstellen will sieht das wie folgt aus.