

Theorie zur Beschreibung offener Quantensysteme mit Mastergleichungen

Von Björn Kramm

Gliederung

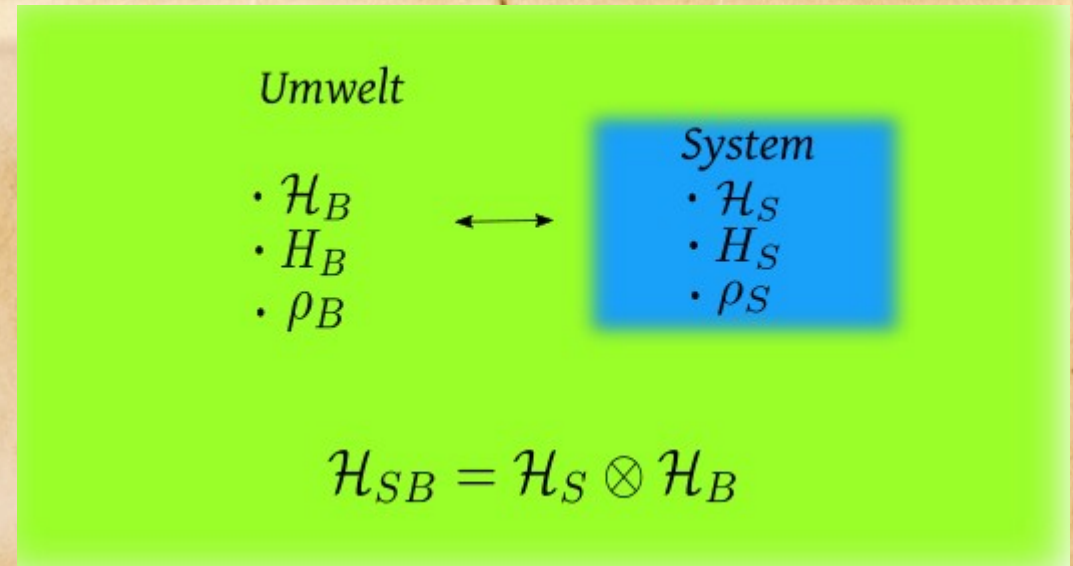
- Offene Quantensysteme
- Die Dichtematrix-Theorie (von Neumann Gleichung)
- Mastergleichungen (Redfield, Lindblad)
- Motivation der Polaron-Mastergleichung für ein 3-Niveau-System (V-System)
- Auswertung der Polaron-Mastergleichung

Gliederung

- Offene Quantensysteme
- Die Dichtematrix-Theorie (von Neumann Gleichung)
- Mastergleichungen (Redfield, Lindblad)
- Motivation der Polaron-Mastergleichung für ein 3-Niveau-System (V-System)
- Auswertung der Polaron-Mastergleichung

Offene Quantensysteme

- Kopplung von Systemen an ihre Umwelt
- Physikalische Zustände werden beschrieben durch den statistischen Operator $\rho_{SB} \in \mathcal{H}_{SB}$
- Besonderes Interesse an der Entwicklung des Systems ρ_S
- Anwendungen in der Quantenoptik, Quantenchemie und Quantentransporten (optisch angetriebenen V-Typ-Quantenpunktketten).



Quelle: Colloquium: Non-Markovian dynamics in open quantum systems
 Heinz-Peter Breuer, Elsi-Mari Laine, Jyrki Piilo
 Reviews of Modern Physics V 88 (2016)

Vgl.: Unidirectional quantum transport in optically driven V-type quantum dot chains
 Oliver Kaestle, Emil Vosmar Denning, Jesper Mork, Andreas Knorr
 Physical Review B 103 (2021)

Gliederung

- Offene Quantensysteme
- Die Dichtematrix-Theorie (von Neumann Gleichung)
- Mastergleichungen (Redfield, Lindblad)
- Motivation der Polaron-Mastergleichung für ein 3-Niveau-System (V-System)
- Auswertung der Polaron-Mastergleichung

Die Dichtematrix-Theorie

- Zustand des System im reinen Zustand $\rightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{H}$
- WW zwischen System-Bad: Dekohärenzen & Informationsverlust
 \rightarrow Beschreibung über $\rho(t) = \sum_{ij} \rho_{ij}(0) |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_j(t)|$

- Erwartungswert einer phys. Observable: $\langle \hat{A} \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{A})$

- Eigenschaften der Dichtematrix:

$$\rho(t) = \rho^\dagger(t)$$

$$\text{tr}\{\rho(t)\} = 1$$

$$\text{tr}\{\rho^2\} = \begin{cases} = 1 & \text{reiner Zustand,} \\ < 1 & \text{gemischter Zustand.} \end{cases}$$

Die Dichtematrix-Theorie

- Zeitentwicklung der Dichtematrix führt auf die von Neumann Gleichung:

→ Start bei Definition der Dichtematrix und der SG

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = i\hbar \sum_{ij} \rho_{ij}(0) \left(|\dot{\psi}_i(t)\rangle \langle \psi_j(t)| + |\psi_i(t)\rangle \langle \dot{\psi}_j(t)| \right)$$

- Durch Einsetzen folgt die von Neumann Gleichung im Schrödinger-Bild:

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho(t)].$$

Die Dichtematrix-Theorie

- Ansatz: Zerlege Gesamt-Hamiltonian in ungestörtes System und in einen WW-Term: $H_0 = H_{\text{gesamt}} - H_1$
- Unitärer Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0) = e^{-\frac{iH_0(t-t_0)}{\hbar}}$
- Dichtematrix im WW-Bild $\tilde{\rho} = U_0^\dagger(t, t_0)\rho(t)U_0(t, t_0)$
 $\rightarrow \frac{d}{dt}\tilde{\rho} = \frac{i}{\hbar} \left(\left[\tilde{H}_0, \tilde{\rho} \right] - \left[\tilde{H}(t), \tilde{\rho} \right] \right) = -\frac{i}{\hbar} \left[\tilde{H}_1, \tilde{\rho} \right]$
- Zeitentwicklung im WW-Bild ist allein gegeben durch den WW-Hamiltonian des offenen Systems

*Quelle: Heinz-Peter Breuer und Francesco Petruccione
The theory of open quantum systems
Oxford University Press, 2002*

Gliederung

- Offene Quantensysteme
- Die Dichtematrix-Theorie (von Neumann Gleichung)
- Mastergleichungen (Redfield, Lindblad)
- Motivation der Polaron-Mastergleichung für ein 3-Niveau-System (V-System)
- Auswertung der Polaron-Mastergleichung

Mastergleichungen

- Operatorgleichungen (BWGL) für die reduzierte Dichtematrix ρ_S und ermöglicht Zugang zu umweltbedingten Gedächtniseffekten
- Offener Systemhamiltonian $H = H_S + H_B + H_{SB} = H_0 + H_{SB}$
- Strategie:
 - Lösung in 2. Ordnung Störungstheorie
 - Ausspuren der Reservoirvariablen $\rho_S = \text{tr}_B(\rho_{SB})$
 - Näherungen für eine zugängliche Darstellung
 - 2 Typen, Markoffsche- und nicht-Markoffsche Mastergleichungen

Mastergleichungen

- Badannahme: Zustand des Bades wird nicht vom System beeinflusst (Bad bleibt im Anfangszustand) $\rho_B(t) \approx \rho_B(0)$
- Born-Näherung: schwache System-Bad-Wechselwirkung
→ Faktorisierung der Dichtematrix $\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_B$
- Erste Markoff-Näherung: vergangene Zeiten τ werden in der System-Dichtematrix vernachlässigt $\rho_S(t - \tau) \approx \rho_S(t)$

Mastergleichungen

- Nicht-Markoffsche Mastergleichungen
 - Berücksichtigung der zeitabhängigen System-Bad-Korrelationen
 - Beschreibung von Gedächtniseffekten
- Redfield-Mastergleichung
- Markoffsche Mastergleichungen
 - Gleichungen in Lindblad-Form
 - keine erfassung von Gedächtniseffekten mit potentiellen Auswirkungen
- Lindblad-Mastergleichung

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} \left[H_S, \rho_S(t) \right] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \text{tr}_B \left\{ \left[H_1, \left[H_1(-\tau), \rho_S(t) \otimes \rho_B(0) \right] \right] \right\}$$

- Zeigt Einfluss der Vergangenheit $\tau = 0, \dots, t$ auf gegenwärtigen Zustand
- Spurerhaltend, aber nicht zwangsläufig positiv-semidefinit, negative Dichten sind unphysikalisch

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} \left[H_S, \rho_S(t) \right] + \gamma \left[2J\rho_S(t)J^\dagger - J^\dagger J\rho_S(t) - \rho_S(t)J^\dagger J \right]$$

- Systemobservablen entwickeln sich auf größeren Zeitskalen, Vernachlässigung von Gedächtniseffekten
- Besitzt keinen effektiven Speicherkern

*Quelle: Heinz-Peter Breuer und Francesco Petruccione
The theory of open quantum systems
Oxford University Press, 2002*

Gliederung

- Offene Quantensysteme
- Die Dichtematrix-Theorie (von Neumann Gleichung)
- Mastergleichungen (Redfield, Lindblad)
- Motivation der Polaron-Mastergleichung für ein 3-Niveau-System (V-System)
- Auswertung der Polaron-Mastergleichung

V-System

- Hamiltonian der Systeme

→ freier elektronischer Beitrag

$$H_{el,0} = \hbar(\Delta_2\sigma_{22} + \Delta_3\sigma_{33}).$$

→ Licht-Wechselwirkungs-Hamiltonian

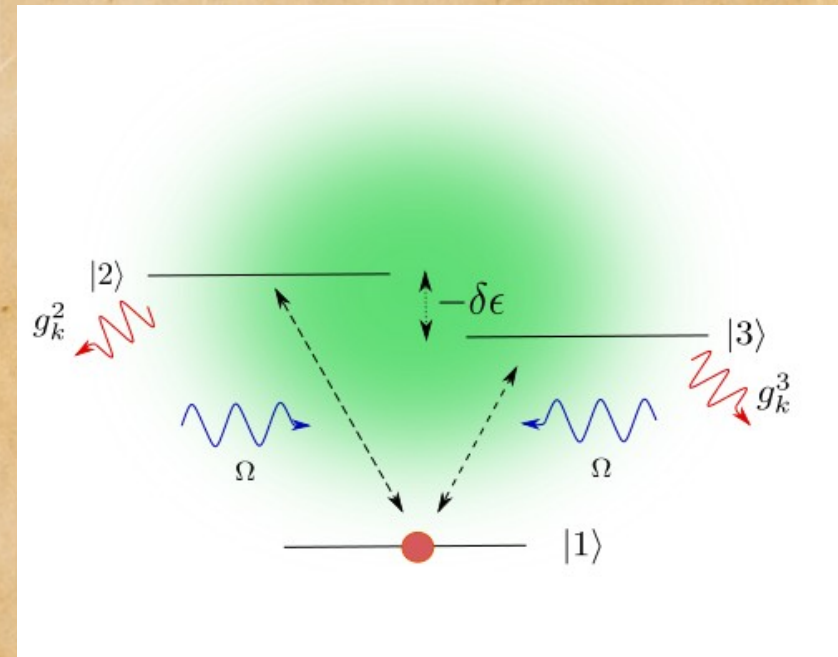
$$H_l = \hbar\Omega(\sigma_{12} + \sigma_{21} + \sigma_{13} + \sigma_{31}).$$

→ homogene Phonon-Hamiltonian

$$H_{ph,0} = \hbar \sum_k w_k r_k^\dagger r_k$$

→ Elektron-Phonon Wechselwirkungs-Hamiltonian

$$H_{el,ph} = \hbar \sum_k (g_k^2\sigma_{22} + g_k^3\sigma_{33})(r_k^\dagger + r_k)$$



Polaron-Transformation

- Erkundung der System-Bad-Kopplung (Weg zur Polaron-Mastergleichung)

$$H_P = U_P H U_P^{-1} \quad U_P = \exp \left[\sum_{i=2,3} \sigma_{ii} (R_i^\dagger - R_i) \right]$$

- Mit der Baker-Campbell-Hausdorf-Formel ergeben sich die Polaron-Hamiltonian
- Weitere Schritte:

→ Trafo ins WW-Bild und einsetzen in die von Neumann-Gleichung

→ Näherungen: Badannahme, Born- und Markoff-Näherung

→ Trafo ins Schrödinger-Bild und Zusammenfassung der Operatoren sowie einer Franck-Condon-Renormalisierung und Aussparen der Reservoirvariablen

$$X_{+,i}(t), X_{-,i}, B_{+,i}, B_{-,i}, G_+^{ij}, G_-^{ij} \quad G_+^{ij} = \cosh(\Phi^{ij}(\tau)) - 1$$

→ Definition der Phononen-Korrelationsfunktion $G_-^{ij} = \sinh(\Phi^{ij}(\tau))$

$$\Phi^{ij}(\tau) := \sum_k \frac{g_k^i g_k^j}{\omega_k^2} \left(\coth\left(\frac{\hbar\omega_k}{2K_B T}\right) \cos(\omega_k \tau) - i \sin(\omega_k \tau) \right)$$

Polaron-Mastergleichung

$$\partial_t \rho_{mn} = \sum_{i=2,3} \left(i\tilde{\Delta}_i (\rho_{mi} \delta_{ni} - \rho_{in} \delta_{mi}) + i\tilde{\Omega}_i (\rho_{mi} \delta_{n1} + \rho_{m1} \delta_{ni} - \rho_{in} \delta_{n1} - \rho_{1n} \delta_{mi}) \right) - \frac{\tilde{\Omega}^2}{\hbar^2} \sum_{i,j=2,3} \int_0^t d\tau \langle m | \chi^{ij}(\tau) | n \rangle$$

Mit

$$\begin{aligned} \langle m | \chi^{ij}(\tau) | n \rangle = & \sum_{q=1}^3 \left(\rho_{qm} \left[(G_+^{ij}(\tau) X_{+,j}^{iq}(-\tau) - iG_-^{ij}(\tau) X_{-,j}^{iq}(-\tau)) \delta_{m1} + (G_+^{ij}(\tau) X_{+,j}^{1q}(-\tau) + iG_-^{ij}(\tau) X_{-,j}^{1q}(-\tau)) \delta_{mi} \right] + \rho_{mq} \left[(G_+^{ij*}(\tau) X_{+,j}^{q1}(-\tau) - iG_-^{ij*}(\tau) X_{-,j}^{q1}(-\tau)) \delta_{ni} \right. \right. \\ & \left. \left. + (G_+^{ij*}(\tau) X_{+,j}^{qi}(-\tau) + iG_-^{ij*}(\tau) X_{-,j}^{qi}(-\tau)) \delta_{n1} \right] - \rho_{q1} \left[G_+^{ij}(\tau) X_{+,j}^{mq}(-\tau) - iG_-^{ij}(\tau) X_{-,j}^{mq}(-\tau) \right] \delta_{ni} - \rho_{qi} \left[G_+^{ij}(\tau) X_{+,j}^{mq}(-\tau) + iG_-^{ij}(\tau) X_{-,j}^{mq}(-\tau) \right] \delta_{n1} \right. \\ & \left. - \rho_{1q} \left[G_+^{ij*}(\tau) X_{+,j}^{qn}(-\tau) + iG_-^{ij*}(\tau) X_{-,j}^{qn}(-\tau) \right] \delta_{mi} - \rho_{iq} \left[G_+^{ij*}(\tau) X_{+,j}^{qm}(-\tau) - iG_-^{ij*}(\tau) X_{-,j}^{qm}(-\tau) \right] \delta_{m1} \right) \end{aligned}$$

- Ergebnis hat ein hohes Potential für eine numerische Auswertung

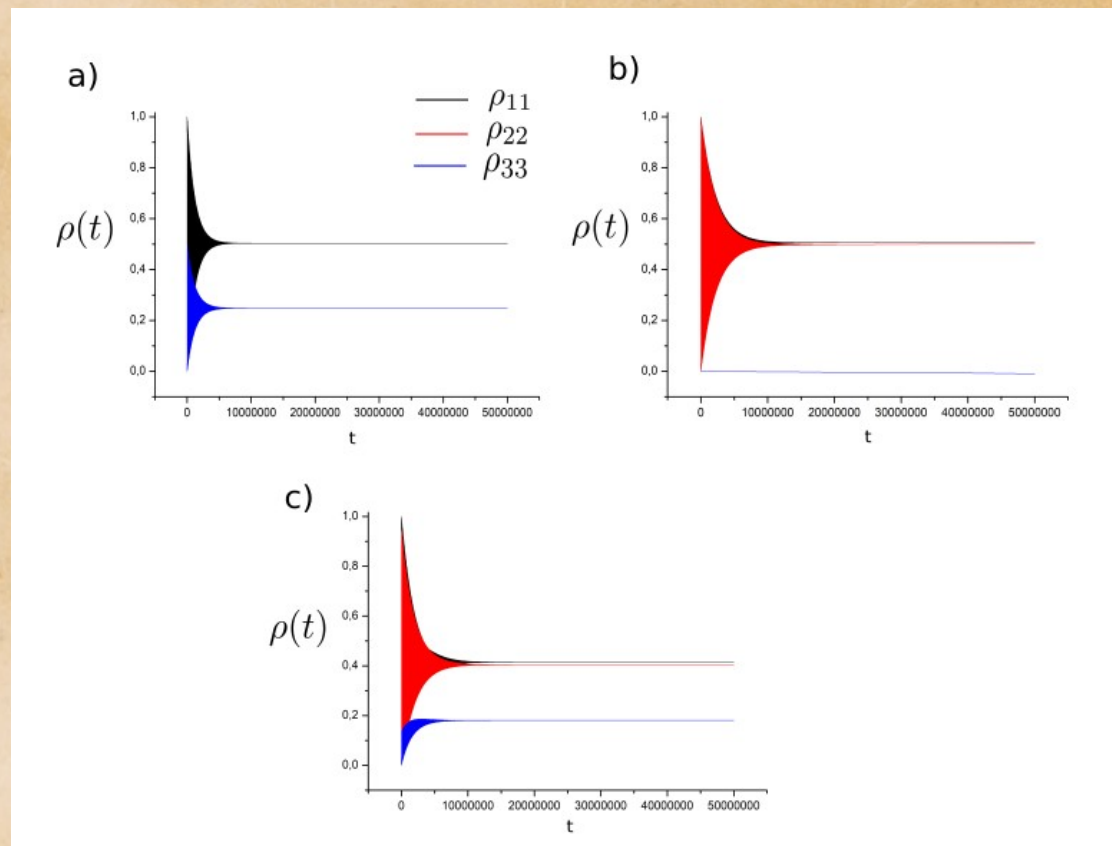
Quelle: *Unidirectional quantum transport in optically driven V-type quantum dot chains*
 Oliver Kaestle, Emil Vosmar Denning, Jesper Mork, Andreas Knorr
Physical Review B 103 (2021)

Gliederung

- Offene Quantensysteme
- Die Dichtematrix-Theorie (von Neumann Gleichung)
- Mastergleichungen (Redfield, Lindblad)
- Motivation der Polaron-Mastergleichung für ein 3-Niveau-System (V-System)
- Auswertung der Polaron-Mastergleichung

Auswertung Polaron

- a)
Oszillierendes Verhalten der Zustände, Zustand 1 bei 0.4, Zustände 2 und 3 bei 0.3
- b)
Zustand 3 bleibt unbesetzt
- c)
Übergang in ein stationäres Verhalten



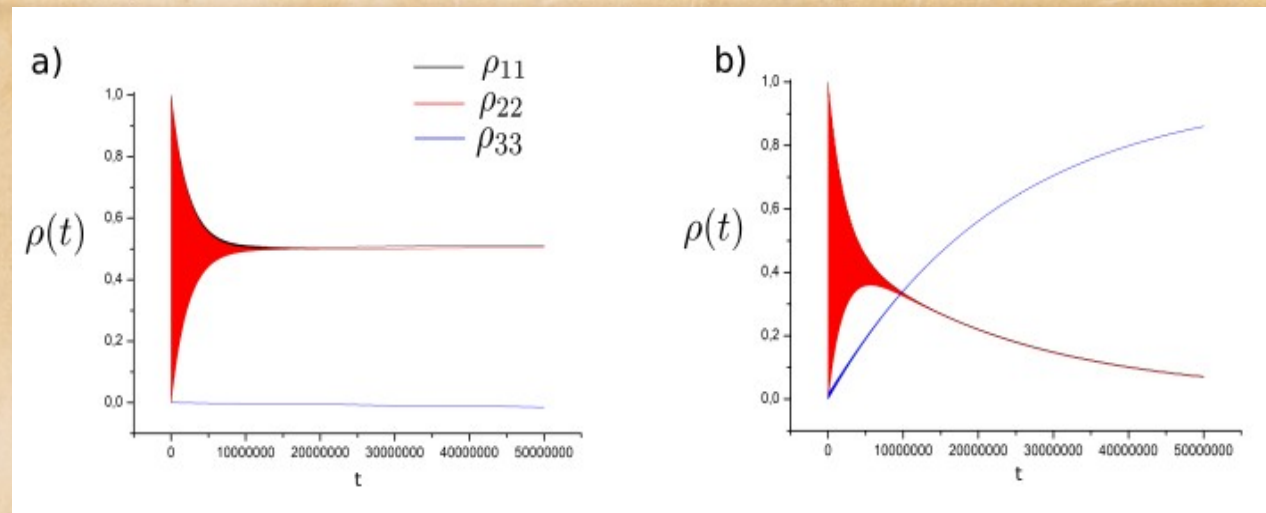
*Besetzungsdynamik für die Polaron-Mastergleichung bei $T = 4K$ mit positiver Energieverstimmung
a) 0 eV, b) 5.00 eV, c) 0.3 eV*

Auswertung Polaron

a)
Ähnlichkeiten zu einem
2-Niveau-System

b)
Nahe 0 erreicht der 3. Zustand
eine vollständige Besetzung.

- Energiedissipation in die Umgebung
- Gedächtniseffekte führen zu einem Informationsrückfluss vom Reservoir ins System



*Besetzungsdynamik für die Polaron-Mastergleichung
bei $T = 4K$ mit negativer Energieverstimung
a) -1 eV, b) -0.1 eV*

Im Allgemeinen beschreiben die nicht-Markoffschen Mastergleichungen die Gedächtniseffekte besser!



Danke für Ihre Aufmerksamkeit!

