Quantenstochastische Resonanz in atomaren Quantenpunkten

Roman Bedau



Quantenstochastische Resonanz in atomaren Quantenpunkten

Von der Fakultät Mathematik und Physik der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Roman Bedau

aus Neustadt an der Weinstraße

Hauptberichter: Prof. Dr. Ulrich Weiß Mitberichter: Prof. Dr. Günter Mahler

Tag der Einreichung: 29.01.2010 Tag der mündlichen Prüfung: 30.03.2010

II. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart2010

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über http://dnb.d-nb.de abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen: Cuvillier, 2010 Zugl.: Stuttgart, Univ., Diss., 2010

978-3-86955-517-1

D 93

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2010 Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen Telefon: 0551-54724-0 Telefax: 0551-54724-21 www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen. 1. Auflage, 2010 Gedruckt auf säurefreiem Papier

 $978 ext{-} 3 ext{-} 86955 ext{-} 517 ext{-} 1$

Inhaltsverzeichnis

No	otatio	ons- und Symbolverzeichnis	5
Ał	ostrad	ct	9
Kı	urzfas	ssung	11
Ei	nleitı	ing	13
1	The	oretische Grundlagen	17
	1.1	Offene Quantensysteme	17
		1.1.1 Klassische Langevin–Gleichung	17
		1.1.2 Influenz functionalmethode \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	20
	1.2	Spin–Boson–Modell	28
		1.2.1 Reduktion eines Doppelmuldenpotentials	28
		1.2.2 Präparation der Anfangszustände	30
		1.2.3 Formal exakte Lösung	37
	1.3	Getriebenes Spin–Boson–Modell	49
		1.3.1 Formal exakte Lösung	50
		1.3.2 Lineare Antwort	52
	1.4	Markov Regime	53
	1.5	Hochfrequenz Regime	54
2	Exp	erimenteller Aufbau und theoretische Beschreibung	57
	2.1	Experimenteller Aufbau	57
		2.1.1 Mögliche Potentiallandschaften für einen oder mehrere $AQP(s)$.	58
	2.2	Theoretische Beschreibung	61
		2.2.1 Phononen–induzierte Wechselwirkung zwischen zwei AQPs	61
		2.2.2 Atom–Photon Wechselwirkung	61
		2.2.3 Bose–Einstein–Kondensation	66
		2.2.4 Atomare Quantenpunkte: Grenzfall des Bose–Hubbard–Modells	69
		2.2.5 Stoßprozesse und Raman Kopplung	72
		2.2.6 Luttinger Flüssigkeitsmodell	72
3	Abb	ildungsvorschriften und Limitationen	79
	3.1	Diagonalisierung des hydrodynamischen Hamiltonoperators	79
	3.2	Effektiver Hamiltonoperator für $\hat{H}_b + \hat{H}_{ab}$	81

	3.3	Abbilo	dung auf das Spin–Boson–Modell	85	
		3.3.1	Transformation des BEK–Operators \hat{H}_a	86	
		3.3.2	Transformation der Operatoren $\hat{H}_b + \hat{H}_{ab}$	87	
		3.3.3	Bestimmung des Kondoparameters α	90	
4	Qua	ntenst	ochastische Resonanz: Theorie und Experiment	93	
	4.1	Quant	enstochastische Resonanz	93	
	4.2	QSR i	nnerhalb verschiedener Näherungsverfahren	94	
		4.2.1	NIBA — noninteracting-blip approximation	95	
		4.2.2	Kubo Formalismus	97	
		4.2.3	Exakte Lösung für $\alpha = 1/2$	101	
		4.2.4	Niedrige Frequenzen	105	
		4.2.5	Hohe Frequenzen	109	
		4.2.6	Hochtemperaturnäherung	110	
	4.3	QSR i	m Experiment	111	
		4.3.1	Lineare Antwort	112	
		4.3.2	Niedrige Frequenzen	114	
		4.3.3	Hohe Frequenzen	116	
5	Zusa	ammen	fassung und Ausblick	119	
Α	Pfac	dintegr	alformalismus	121	
В	Kub	o Forn	nalismus und Fluktuations–Dissipations–Theorem	125	
Lit	Literaturverzeichnis 1				

Notations- und Symbolverzeichnis

AQP	atomarer Quantenpunkt
BEK	Bose–Einstein–Kondensat
ВНМ	Bose–Hubbard–Modell
FDT	Fluktuations - Dissipations - Theorem
NIBA	noninteracting-blip approximation
PRD	Phasenraumdichte
QP	Quantenpunkt
QSR	quantenstochastische Resonanz
RDM	reduzierte Dichtematrix
SBM	Spin-Boson-Modell
SR	stochastische Resonanz
WW	Wechselwirkung
ZZS	Zweizustandssystem

<i>a</i> _s	s–Wellen–Streulänge
$ a\rangle, b\rangle$	Hyperfeinzustände der Kondensatatome
$\hat{b}, \hat{b}^{\dagger}$	bosonischer Erzeugungs- und Vernichtungsoperator
$ c\rangle$	Zwischenzustand im Raman–Übergang
$C_j(t)$	Gleichgewichtsautokor relation des Pauli operators $\hat{\sigma}_j$
$\mathcal{F}_{\mathrm{FV}}$	Feynman–Vernon Influenzfunktional
Н	Hamiltonfunktion
\hat{H}	Hamiltonoperator
$\hat{H}_{\rm BHM}$	Hamiltonoperator des Bose–Hubbard–Modells
\hat{H}_{eff}	effektiver Hamiltonoperator
$\hat{H}_{\rm LF}$	Hamiltonoperator der Luttinger Flüssigkeit
$\hat{H}_{\rm LL}$	Lieb-Liniger-Hamiltonoperator

$\hat{H}_{\rm QP}$	Hamiltonoperator eines Quantenpunktes
$\operatorname{Im}[\cdot]$	Imaginärteil
J	Sprungterm im BHM
$J(\omega)$	spektrale Dichte
$J_{\rm FV}$	Propagations funktion im Feynman–Vernon Modell
$J_n(z)$	Besselfunktion erster Gattung n -ten Grades
<i>k</i> _B	Boltzmann Konstante
L(t)	Bad–Korrelationsfunktion
$\hat{N}, \hat{n} \ldots $	Besetzungszahloperator
P(t)	Besetzungswahrscheinlichkeit, Population
$P^{(\mathrm{as})}(t)$	Asymptotisches Verhalten von $P(t)$
\hat{P}	Projektionsoperator
$p_{\rm F}$	Fermi–Impuls
$\operatorname{Re}[\cdot]$	Realteil
<i>r</i> _{TF}	Thomas–Fermi–Radius
$\mathcal{S}_{\mathrm{FV}}$	Influenzwirkung im Feynman–Vernon Modell
sgn	Signumfunktion
<i>U</i>	Onsite–Wechselwirkung im BHM
$ vak\rangle$	Vakuumzustand
$V_{\rm F}$	äußeres Fallenpotential
V_0	Potential des optischen Gitters
\hat{W}	Dichtematrix des Gesamtsystems
$X_{j,k}$	Blip–Sojourn Korrelation
Z	Zustandssumme

β	inverse Temperatur
$\gamma_{\rm r}$	Dämpfungsrate
$\gamma(\omega)$	frequenzabhängiger Dämpfungsparameter
δ, Δ	Verstimmungsparameter im Raman–Übergang
Δ	Tunnelmatrixelement im SBM
ε	allgemeiner Verkippungsparameter im SBM

$\epsilon(t) = \epsilon_0 + \epsilon_1(t) \ldots \ldots$	zeitabhängiger Verkippungsparameter im SBM
<i>ϵ</i> ₀	statischer Anteil von $\epsilon(t)$
$\epsilon_1(t)$	dynamischer Anteil von $\epsilon(t)$
ϵ_1	Amplitude von $\epsilon_1(t)$ bei periodischer Variation
Δ_r	renormiertes Tunnelmatrixelement
$\Delta_{\rm e}$	effektives Tunnelmatrixelement
$\Lambda_{j,k}$	Inter–Blip Korrelation des Blip–Paares $\{j,k\}$
λ_{dB}	de-Broglie-Wellenlänge
χ	lineare Suszeptibilität
$\Phi_{\rm FV}$	Influenzphase im Feynman–Vernon Modell
$ \Psi_{\rm MI}\rangle$	Mott–Isolator Zustand
$ \Psi_{ m sf} angle$	suprafluider Zustand
ω_{c}	Trennfrequenz/Cutoff Frequenz
ω_{L}	Frequenz des kohärenten Lichtfeldes
Ω_0	resonante Rabifrequenz
$\Omega^{(\text{eff})}$	effekt Rabifrequenz des Raman-Übergangs $ a\rangle \leftrightarrow b\rangle$
ab ·····	clickt. Rabillequelle des Ramail Obergaugs $ a < 7 b $
ρ	reduzierte Dichtematrix
$ \rho \qquad \qquad$	reduzierte Dichtematrix Pauli–Spinmatrizen
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	reduzierte Dichtematrix Pauli–Spinmatrizen Pauli–Spinoperatoren
$ \begin{array}{l} \rho \\ \rho \\ \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z \\ \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z \\ \Theta(t) \\ \end{array} $	reduzierte Dichtematrix Pauli–Spinmatrizen Pauli–Spinoperatoren Heaviside-/Stufenfunktion
$\rho \qquad \qquad$	reduzierte Dichtematrix Pauli–Spinmatrizen Pauli–Spinoperatoren Heaviside-/Stufenfunktion Viskositätskoeffizient
$\rho \qquad \qquad$	reduzierte Dichtematrix Pauli–Spinmatrizen Pauli–Spinoperatoren Heaviside-/Stufenfunktion Viskositätskoeffizient symmetrische Pfadkoordinate im SBM
$\rho \qquad \qquad$	reduzierte Dichtematrix Pauli–Spinmatrizen Pauli–Spinoperatoren Heaviside-/Stufenfunktion Viskositätskoeffizient symmetrische Pfadkoordinate im SBM antisymmetrische Pfadkoordinate im SBM
$\rho \qquad \qquad$	reduzierte Dichtematrix Pauli–Spinmatrizen Pauli–Spinoperatoren Heaviside-/Stufenfunktion Viskositätskoeffizient symmetrische Pfadkoordinate im SBM antisymmetrische Pfadkoordinate im SBM

$[\hat{A}, \hat{B}]$	Kommutator der Operatoren \hat{A} und \hat{B}
$[\hat{A},\hat{B}]_+$	Antikommutator der Operatoren \hat{A} und \hat{B}
$\langle \cdot angle_t$	zeitabhängiger Erwartungswert
$\langle \cdot \rangle_{\beta}$	thermischer Erwartungswert

Abstract

Due to advances in controlling and manipulating systems on an atomic level new possibilities to experimentally study fundamental questions concerning open quantum systems emerge. This thesis describes the dynamics of atomic quantum dots embedded in a quasi-one-dimensional Bose-Einstein condensate. The system dynamics is mapped onto the driven Spin-Boson model. Based on this approach it is shown that within the presented experiment the phenomena of quantum stochastic resonance can be observed for the first time.

The first chapter of this thesis gives an introduction into the theory of open quantum systems. Starting from the classical Langevin equation for Ohmic and frequency dependent damping the Feynman-Vernon influence functional is presented for different preparations of the initial state. The Spin-Boson model is explicated with regard to the experiment to be explained and its theoretical description. Due to the experimental relevance the preparation of the initial states is elucidated with respect to its consequences on the dynamics. The exact formal solution for the system dynamics is given. Based on that solution the exact expressions for the conditional propagation function, the expectation values as well as the correlation and response functions for the populations and the coherences are derived. In comparison with an general quantum master equation the expressions for the irreducible kernels of the system dynamics are identified in a self-consistent manner. The modifications to theoretically describe the driven Spin-Boson model are given based upon the theory presented so far. The system dynamic is then explained in the Markov and the high-frequency limit.

In the following chapter an experiment consisting of a Bose-Einstein condensate with one or several embedded atomic quantum dots is presented. This experiment allows us to detect certain phenomena of the driven Spin-Boson model. First, the experimental setup and its theoretical description is explained. Different potential landscapes for the implementation of one or several atomic quantum dots are discussed. Their assets and drawbacks are listed and compared. The theories explaining the experimentally controlled systems are briefly stated. Among these are light-matter interaction, Bose-Einstein condensation, the Bose-Hubbard model, scattering processes as well as Raman transitions, and the Luttinger liquid model of low-energy excitations in one-dimensional systems.

The third chapter covers the necessary transformations to map the aforementioned theoretical characterisation onto the driven Spin-Boson model. First, the Luttinger liquid Hamiltonian is diagonalized and an effective description for the occupation of the atomic quantum dot and its interaction with the condensate atoms by scattering and induced transitions is derived. Applying a unitary transformation brings the effective Hamiltonian onto a form which can be identified with the Spin-Boson model and its characteristical parameters. Using this mapping the bias ϵ and the tunneling matrix element Δ of the Spin-Boson model can be expressed in terms of the experimentally controlled parameters. Finally the damping parameter α is calculated and the range of the experimentally accessible values is discussed.

The fourth chapter has two parts. In the first part the phenomena of quantum stochastic resonance as an effect observable in a driven Spin-Boson model is analysed. Different asymptotic limits of the dynamics are highlighted and the corresponding approximations for the effective models, inter alia the noninteracting-blip approximation (NIBA), are presented. These methods of approximation permit the use of numerical simulations to study the dynamics. The so computed data exhibits all signatures of quantum stochastic resonances and thus substantiates the theoretical predictions. In the second part of this chapter the theoretical findings are applied to the experiment presented in the second chapter and its parametrical specifications.

The results of this thesis are summarized and interpreted in the fifth chapter. Further possible lines of investigations close to the treated topic are pointed out.

In the appendix short reviews about the theory of path integrals and Kubo's Linear Response theory are given.

Kurzfassung

Durch die fortschreitende Entwicklung, Systeme auf atomarer Ebene beeinflussen und kontrollieren zu können, enstehen neue Möglichkeiten, grundlegende Fragestellungen und Modelle offener Quantensysteme experimentell zu beleuchten. In dieser Arbeit wird die Dynamik von atomaren Quantenpunkten beschrieben, die in ein quasi–eindimensionales Bose–Einstein–Kondensat eingebettet sind. Die Systemdynamik wird auf das getriebene Spin–Boson–Modell abgebildet. Davon ausgehend wird gezeigt, dass das vorgestellte Experiment erstmalig die Beobachtung eines quantenstochastischen Resonanzphänomens erlaubt.

Das erste Kapitel fasst einführend die Theorie der offenen Quantensysteme zusammen. Ausgehend von der klassischen Langevin–Gleichung mit Ohm'scher und frequenzabhängiger Dämpfung wird im Anschluss auf die quantenphysikalische Influenzfunktionalmethode von Feynman und Vernon für spezielle sowie allgemeine Anfangsbedingungen eingegangen. In der Folge wird im Hinblick auf das zu beschreibende Experiment und seiner Ubertragung in ein formales theoretisches Modell das Spin–Boson–Modell behandelt. Dabei wird auch der experimentell relevante Aspekt der Anfangspräparation der Zustände und deren Integration in die theoretischen Modelle beleuchtet. Die formal exakte Lösung der Systemdynamik wird präsentiert und anhand dieser die Ausdrücke für die bedingten Propagationsfunktionen, die Erwartungswerte sowie die Korrelationen und Antwortfunktionen der Besetzungen und Kohärenzen abgeleitet. Im Vergleich mit der allgemeingültigen exakten Quantenmastergleichung lassen sich selbstkonsistent die irreduziblen Kerne der Systemdynamik identifizieren. Darauf aufbauend werden die Erweiterungen und Modifikationen dargestellt, die zur Beschreibung eines getriebenen Spin–Boson–Modells erforderlich sind. Abschließend wird die Systemdynamik im getriebenen Fall in den Grenzfällen des Markov sowie des Hochfrequenz Regimes erörtert. Im folgenden Kapitel wird ein Experiment vorgestellt, in dem atomare Quantenpunkte in ein Bose–Einstein–Kondensat eingebettet werden und welches die Beobachtung spezieller Phänomene eines getriebenen Spin-Boson-Modells erlaubt. Zunächst werden der experimentelle Aufbau und seine theoretische Beschreibung dargelegt. Mögliche Poten-

tiallandschaften zur Realisierung eines oder mehrerer atomarer Quantenpunkte sowie deren Vor- und Nachteile werden diskutiert. Anschließend werden die zur Beschreibung der experimentell manipulierten Systeme erforderlichen Theorien knapp dargestellt. Darunter befinden sich die Theorie der Wechselwirkung zwischen Atomen und kohärenten Lichtfeldern, die Physik der Bose–Einstein–Kondensation, das Bose–Hubbard–Modell, Stoßprozesse sowie Raman Kopplung und abschließend das Luttinger Flüssigkeitsmodell zur Beschreibung niederenergetischer Anregungen in eindimensionalen Systemen.

Die Transformationen der zuvor aufgestellten theoretischen Beschreibungen auf das Spin-Boson-Modell sowie deren Gültigkeitsbereich werden im dritten Kapitel ausführlich dargelegt. Als Vorarbeit wird der hydrodynamische Hamiltonoperator des Luttinger Flüssigkeitsmodells diagonalisiert und eine effektive Beschreibung für die Besetzung der Quantenpunkte sowie deren Wechselwirkung mit Kondensatatomen durch Stoßprozesse und induzierte Übergänge hergeleitet. Die nun zur Verfügung stehende effektive Beschreibung wird anschließend durch eine unitäre Transformation explizit auf das Spin–Boson–Modell abgebildet. Die experimentellen Größen können daraufhin den Basisgrößen des Spin–Boson–Modells wie dem Verkippungsparameter ϵ und dem Tunnelmatrixelement Δ zugeordnet werden. Abschließend wird der Dämpfungsparameter α identifiziert sowie die im Experiment gegebenen Möglichkeiten zur Veränderung seines Wertes untersucht.

Das vierte Kapitel untergliedert sich in zwei Teile: Im ersten Teil wird ausgehend von der im ersten Kapitel vorgestellten Theorie eines getriebenen Spin–Boson–Modells das Phänomen der quantenstochastischen Resonanz untersucht. Die Dynamik wird dabei in verschiedenen Grenzfällen betrachtet und die Näherungsmethoden der zugehörigen approximativen Beschreibungen, unter anderem die NIBA, erläutert. Diese erlauben es, die Dynamik durch numerische Simulationen zu erfassen. In den so gewonnenen Daten lassen sich die Signaturen der quantenstochastischen Resonanz aufspüren und damit die theoretisch getroffenen Aussagen untermauern. Im zweiten Teil werden die zuvor gewonnenen Erkenntnisse auf das im zweiten Kapitel vorgestellte Experiment übertragen. Es wird ausführlich analysiert, in welchem durch das Experiment vorgegebenen Parameterraum die verschiedenen Aspekte der quantenstochastischen Resonanz beobachtbar sind. Gestützt werden die Überlegungen durch Simulationen mit denen durch das Experiment vorgegebenen Parametern.

Die Ergebnisse werden im fünften Kapitel interpretiert und zusammengefasst. Weitere Fragestellungen, die thematisch an die Arbeit anknüpfen könnten, werden diskutiert. Im Anhang findet sich eine kurze Übersicht über die Theorien der Pfadintegrale und des Kubo-Formalismus.

Einleitung

Seit dem ersten experimentellen Nachweis eines Bose–Einstein–Kondensats (BEK) im Jahre 1995, der unabhängig voneinander den Gruppen um Eric A. Cornell und Carl E. Wieman in Boulder und der Gruppe um Wolfgang Ketterle am MIT gelang¹, hat sich dieses Forschungsgebiet der ultrakalten Quantengase — bosonischer wie auch fermionischer Natur — sowie der Kondensate rasant entwickelt. Davon zeugen allein die seit diesen experimentellen Pionierarbeiten mehr als 25.000 [1] erschienenen wissenschaftlichen Veröffentlichungen [siehe Tabelle in Abb. 0.1]. In den ersten Jahren galt das



Abbildung 0.1: Jährliche Anzahl der Veröffentlichungen von 1996 bis 2009, in denen in der Kurzzusammenfassung der Begriff "Bose–Einstein condensation" vorkommt.

Hauptinteresse der Untersuchungen den Eigenschaften der kohärenten Materiewellen und den damit einhergehenden Phänomenen. Unter anderem seien hier als Beispiele die Beobachtung von Interferenzen zweier überlappender Kondensate [4], der langreichweitigen Phasenkohärenz [8], der Nachweis quantisierter Wirbel und Wirbelgitter [2, 64, 67] sowie die Erzeugung molekularer Kondensate aus gebundenen Paaren von Fermionen [38, 51, 90] genannt. Die letzten Jahre sind maßgeblich durch zwei neue Entwicklungen geprägt: Zum einem durch die Möglichkeit, die Stärke der Wechselwirkung zwischen den Atomen im kalten Gas durch Feshbachresonanzen zu variieren und zum anderen durch

¹Bereits sechs Jahre später wurden diese Leistungen mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet.

Änderung der Dimensionalität der Kondensate bzw. Gaswolken mit Hilfe optischer Potentiale und im Speziellen der Erzeugung optischer Gitter durch periodische Potentiale. Beide Entwicklungen haben dazu geführt, Systeme kalter Quantengase auch im Regime starker Korrelationen zu betrachten. Die Physik stark korrelierter Systeme war zuvor experimentell beschränkt auf Systeme der Festkörper- bzw. Kernphysik. Gegenüber Festkörpersystemen haben die experimentellen Aufbauten mit kalten Quantengasen den Vorteil, dass die Wechselwirkungen leicht kontrolliert und variiert werden können und somit die verschiedenen Regime von schwacher zu starker Wechselwirkung zugänglich werden.

In dieser Arbeit wird ausgehend von einem experimentellen Aufbau, vorgeschlagen von Recati, Fedichev, Zwerger und von Delft [72], der Brückenschlag zu einem konzeptionell grundlegenden theoretischen Modell für offene Quantensysteme, dem Spin-Boson-Modell (SBM) vollzogen. Für diesen Übergang werden Ergebnisse aus verschiedenen Bereichen der Physik zusammenspielen und ineinandergreifen. Insbesondere wird auf Resultate aus dem theoretischen Modell der Luttinger Flüssigkeit zur Beschreibung niederenergetischer Anregungen eindimensionaler Systeme und des Bose-Hubbard-Modells, welches wechselwirkende Bosonen auf einem Gitter beschreibt, zurückgegriffen. In einem ersten Schritt werden die erforderlichen Transformationen durchgeführt. Hierbei wird besonderes Augenmerk darauf gelegt, in welchem Gültigkeitsbereich die Transformationen möglich sind und wo sich Limitationen ergeben.

Der in [72] skizzierte Aufbau besteht aus einem einzelnen atomaren Quantenpunkt (AQP), der in ein eindimensionales Bose–Einstein–Kondensat eingebettet ist und mit den Kondensatatomen in Wechselwirkung steht. Das Potential, welches den AQP formt, wird durch einen auf das Kondensat fokussierten Laserstrahl erzeugt. Das im Quantenpunkt (QP) befindliche Atom wechselwirkt über zwei Mechanismen mit den in der kondensierten Phase verbleibenden Atomen: Zum einen werden mit Hilfe eines Lasers Zwei–Photonen Übergänge (sog. Ramanübergänge) induziert, zum anderen erfolgen Stoßprozesse. Der beim Ramanübergang involvierte energetisch weit entfernte elektrische Zustand wird mit verstimmten Lasern angeregt. Durch diese Verstimmung werden spontane Emissionsprozesse unterdrückt. Die Atome in der kondensierten Phase besitzen in ihrem Grundzustand zwei durch ihre Hyperfeinstruktur unterscheidbare Subniveaus a und b. Die Kondensatatome befinden sich im Zustand a und werden durch ein schwaches äußeres Fallenpotential eingefangen; das Potential des QPs hingegen ist nur sensitiv für Atome im Zustand b.

Desweiteren gilt es zu garantieren, dass der AQP nicht mehrfach besetzt wird. Dieser im Englischen *collisional blockade limit* genannte Grenzfall kann erreicht werden, indem die Abstoßungsenergie für zwei Atome im Zustand *b* im Potential des QPs hinreichend groß gewählt wird, sodass nur ein nicht bzw. einfach besetzter QP zur Dynamik des Gesamtsystems beiträgt und eine Mehrfachbesetzung energetisch defavorisiert wird. Es stellt sich nun als experimentell schwierig heraus, die Position des Laserfokus zeitlich ausreichend lange konstant zu halten und auch die für die Abstoßungsenergie erforderliche Steilheit der Potentialflanken zu gewährleisten, die eine mehrfache Besetzung des QPs ausschließt. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit die Möglichkeit studiert, ein AQP–Gitter zu implementieren, welches die zuvor genannten Nachteile nicht aufweist. Um dies zu erreichen, ist ein zusätzliches Laserpaar notwendig, dessen gegeneinander gerichtete Laserstrahlen ein periodisches Gitter innerhalb des Kondensats erzeugen. Dieser modifizierte Versuchsaufbau erlaubt robuste experimentelle Bedingungen und garantiert gleichzeitig die erforderliche Steilheit des Potentialverlaufs für das AQP-Gitter. Theoretisch ähnelt diese Situation dem Mott–Isolator Regime des Bose–Hubbard–Modells. Jedoch besteht ein Nachteil des AQP-Gitters darin, dass benachbarten QP eine durch Phononen induzierte Wechselwirkung widerfährt, wodurch die Energieniveaus der QP verschoben werden. Dies führt dazu, dass der Gültigkeitsbereichs der Abbildung auf das SBM reduziert würde. Die Analyse der durch Phononen induzierten Wechselwirkung zeigt, dass die charakteristische Längenskala dieser Wechselwirkung von gleicher Größenordnung wie die Kohärenzlänge des Kondensats ist (engl. *healing length*). Um zu vermeiden, dass sich die Energieniveaus der AQP verschieben, ist somit eine Gitterkonstante erforderlich, die größer als die Kohärenzlänge ist. Alternativ lässt sich entweder die Wahrscheinlichkeit für einen Ramanübergang durch ein weiteres Verstimmen der verwendeten Laser verringern, wodurch die Gesamtzahl an besetzen QP im Gitter reduziert wird, oder eine lineare Rampe zum optischen Potential hinzufügen. Dadurch wird erreicht, dass ein einzelnes Minimum der periodischen Potentiallandschaft in Resonanz bleibt, während die anderen Minima sich energetisch in nichtresonante Bereiche verschieben. Neueste Entwicklungen [88] zeigen auch Fortschritte beim Versuch, gezielt einzelne Gitterplätze zu laden — eine Technik, die in der Literatur mit dem Stichwort "Einzelplatz-Adressierbarkeit" bezeichnet wird (engl. *single-site addressability*). In einem nächsten erweiternden Schritt wird die Möglichkeit ausgelotet, die Systemdynamik unter Hinzunahme einer externen treibenden Kraft zu studieren. Experimentell könnte dies durch ein zeitliches Variieren der Verstimmung im Ramanübergang erreicht werden. Zunächst wird geklärt, inwiefern eine solche experimentelle Erweiterung die Transformationen beeinflusst und eine Abbildung auf das getriebene SBM zulässt. Im Falle des periodisch getriebenen SBM sind in einem geeigneten Parameterbereich quantenstochastische Resonanzphänomene möglich. Unter stochastischer Resonanz (SR) versteht man die Verstärkung der Antwort eines bistabilen Systems auf ein von außen ansetzendes periodisches Signal bei einer gleichzeitig vorhandenen Rauschamplitude von optimaler Stärke. Dieser Effekt entsteht erst im Zusammenspiel von Dämpfung, Rauschen und periodischem Treiben an einem System, welches durch zwei stabile Zustände charakterisiert ist. Dieses in der klassischen Physik bereits wohlbekannte Phänomen ist im Quantenregime experimentell noch unerforscht. Die theoretischen Betrachtungen zeigen, dass im tiefen Quantenregime qualitativ unterschiedliche und neuartige Signaturen zu erwarten sind. Die hierzu angestellten theoretischen Überlegungen knüpfen an die Arbeiten von Grifoni, Sassetti, Hänggi und Weiß [41] an und erweitern diese, um dem betrachteten experimentellen Aufbau und dessen theoretischer Beschreibung gerecht zu werden. In der vorliegenden Arbeit wird ausgehend von den experimentell möglichen Parametern des vorgeschlagenen Versuchsaufbaus ein sinnvoller Bereich bestimmt und analysiert, innerhalb dessen sich die Phänomene der quantenstochastischen Resonanz (QSR) beobachten lassen. Es zeigt sich, dass sowohl die Detektion nichtlinearer als auch linearer QSR Phänomene realistisch erscheint. Als Beispiel für nichtlineare QSR zeigt sich innerhalb des experimentell Möglichen die rauschinduzierte Unterdrückung

höherer Harmonischer. Darüberhinaus wird in dieser Arbeit das Einschwingverhalten der Systemantwort und die charakteristische Übergangszeit in den stationären Zustand berechnet. Diese ist deutlich kürzer als die Lebensdauer des Kondensats, und somit wird das experimentelle Zeitfenster nur geringfügig verkürzt. Gestützt werden die theoretischen Ergebnisse durch umfangreiche numerische Simulationen der die Systemdynamik bestimmenden Gleichungen im Parameterbereich der QSR. In den numerischen Daten lassen sich unter Berücksichtigung der experimentell kontrollierbaren Parameter eindeutig die Signaturen für sowohl lineare als auch nichtlineare QSR Phänomene auffinden. Zusammenfassend scheint der vorgeschlagene experimentelle Aufbau mit den genannten Modifikationen sowie Verbesserungen in besonderem Maße geeignet, das SBM in einem weiten Parameterbereich zu analysieren und im getriebenen Fall die Phänomene der SR im tiefen Quantenregime erstmalig experimentell zu erforschen.

1 Theoretische Grundlagen

1.1 Offene Quantensysteme

Die Herangehensweise bei der Modellbildung in der Physik liegt häufig in einer Reduktion bzw. Vereinfachung und Idealisierung des betrachteten Problems. Dadurch lässt sich der wesentlich physikalische Charakter des beschriebenen Systems erschließen. Erst bei detaillierten Studien werden anfänglich gemachte vereinfachende Annahmen wieder fallen gelassen und komplexere Randbedingungen mitberücksichtigt. Oftmals besteht eine Idealisierung zum Beispiel in der Abgeschlossenheit des Systems. Abgeschlossene Systeme zeichnen sich unter anderem dadurch aus, dass bestimmte Erhaltungsgrößen existieren. So ist beispielsweise die Gesamtenergie eines abgeschlossenen Systems ohne äußere Einwirkungen zeitlich konstant.

Möchte man offene Quantensysteme beschreiben, ist es also zunächst naheliegend, das offene Quantensystem um seine Umgebung zu erweitern, sodass beide zusammen (System plus Umgebung) wieder ein konservatives Gesamtsystem bilden. Das für offene Systeme typische Phänomen der Dissipation entsteht bei dieser Beschreibung durch Energietransfer vom System auf die Umgebung. Wenn man davon ausgeht, dass die Anzahl der Freiheitsgrade der Umgebung unendlich groß ist, kehrt die vom System an die Umgebung abgegebene Energie auf einer endlichen Zeitskala nicht wieder zurück. Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass die Poincaré'sche Wiederkehrzeit dann gegen unendlich tendiert. Ein Modell zur Beschreibung von offenen Quantensystemen, die Dissipation erfahren, ist das Caldeira–Leggett–Modell [11]. Es zeichnet sich dadurch aus, dass die Bewegungsgleichungen der interessierenden Systemfreiheitsgrade durch Ausintegrieren der Umgebungsfreiheitsgrade hergeleitet werden können. Im klassischen Grenzfall reduziert sich die Bewegungsgleichung auf die Form einer Langevin–Gleichung. Über die Influenzfunktionalmethode, die auf dem Pfadintegralzugang der Quantenmechanik beruht, lässt sich die nicht-klassische Dynamik des Systems ableiten. Die grundlegenden Eigenschaften und Aussagen dieses Modells sollen in der Folge dargelegt werden.

1.1.1 Klassische Langevin–Gleichung

Eine allgemeine Form der Hamiltonfunktion des Gesamtsystems kann durch

$$H = H_{\rm S} + H_{\rm B} + H_{\rm I} \tag{1.1}$$

beschrieben werden. Hierbei stellt

$$H_{\rm S} = H_{\rm S}(q, p) = \frac{p^2}{2M} + V(q)$$
(1.2)

die Hamiltonfunktion des relevanten Systems mit generalisierter Koordinate q dar. Die Umgebung wird durch ein Bad harmonischer Oszillatoren modelliert mit

$$H_{\rm B} = H_{\rm B}\left(\{x_{\alpha}\}, \{p_{\alpha}\}\right) = \sum_{\alpha} \left(\frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2}m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2\right).$$
(1.3)

Die Summe erstreckt sich über alle Badoszillatoren, die jeweils durch die Masse m_{α} und die Frequenz ω_{α} beschrieben werden. Die Wechselwirkung zwischen System und Bad sei linearer Art. Dann lautet die entsprechende Hamiltonfunktion

$$H_{\rm I} = H_{\rm I}\left(q, \{x_\alpha\}\right) = -\sum_{\alpha} c_\alpha q x_\alpha + \sum_{\alpha} \frac{c_\alpha^2}{2m_\alpha \omega_\alpha^2} q^2.$$
(1.4)

Der Renormierung des Potentials wird durch den zweiten Term auf der rechten Seite von Gleichung (1.4) entgegengewirkt, sodass das Bad ausschließlich Dissipation beschreibt. Somit hat die Hamiltonfunktion des Gesamtsystems (1.1) die Form

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(q) + \sum_{\alpha} \left\{ \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2}m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 \left(x_{\alpha} - \frac{c_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2}q\right)^2 \right\}.$$
 (1.5)

Aus den kanonischen Gleichungen können nun die klassischen Bewegungsgleichungen hergeleitet werden. Nach einigen Umformungen (siehe [86]) lässt sich die Bewegungsgleichung der Systemkoordinate aufstellen

$$M\ddot{q}(t) + M \int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \,\gamma \left(t - t'\right) \dot{q}\left(t'\right) + \frac{\partial V}{\partial q} = \xi(t) \,. \tag{1.6}$$

Sie hat die Form einer verallgemeinerten Langevin-Gleichung mit dem Dämpfungskern

$$\gamma(t-t') = \Theta(t-t') \frac{1}{M} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} \cos\left[\omega_{\alpha}(t-t')\right]$$
(1.7)

und der stochastischen Rauschkraft

$$\xi(t) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \left(x_{\alpha}(0) \cos(\omega_{\alpha} t) + \frac{p_{\alpha}(0)}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}} \sin(\omega_{\alpha} t) \right) - M\gamma(t)q(0).$$
(1.8)

Bei der stochastischen Rauschkraft $\xi(t)$ handelt es sich um ein farbiges Rauschen mit verschwindendem Mittelwert. Die zugehörigen stochastischen Charakteristika sind demnach gegeben durch

$$\langle \xi(t) \rangle = 0$$
, und $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = Mk_{\rm B}T\gamma(t-t')$. (1.9)

Die zweite Relation, die die Zweizeiten-Korrelationsfunktion mit dem Dämpfungskern in Beziehung setzt, entspricht dem klassischen Fluktuations-Dissipations-Theorem. Für beide Mittelwertbildungen muss jedoch eine verschobene kanonische Gleichgewichtsdichteverteilung verwendet werden [57]. Bildet man die Fouriertransformierte des Dämpfungskernes

$$\tilde{\gamma}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \,\gamma(t) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} = \lim_{\epsilon \to 0^+} -\mathrm{i}\frac{\omega}{M} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} \frac{1}{\omega_{\alpha}^2 - \omega^2 - \mathrm{i}\,\epsilon\,\mathrm{sgn}(\omega)} \tag{1.10}$$

erkennt man, dass sich eine spektrale Dichte der Form

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \delta(\omega - \omega_{\alpha})$$
(1.11)

einführen lässt. Diese kann als gerade Funktion in ω angesehen werden. Im Grenzfall unendlich vieler Badmoden geht die Summe in Gleichung (1.11) in ein Integral über. Damit wird auch die Summe in (1.10) zu einem Integral

$$\tilde{\gamma}(\omega) = \lim_{\epsilon \to 0^+} -i \frac{\omega}{M} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'} \frac{1}{\omega'^2 - \omega^2 - i\epsilon \operatorname{sgn}(\omega)} .$$
(1.12)

Um zu gewährleisten, dass sich die Pole der Ausdrücke (1.10) und (1.12) in der unteren Hälfte der komplexen Zahlenebene befinden und somit die Kausalität gesichert ist, wurde der Nenner dieser beiden Darstellungen jeweils um den Term i $\epsilon \operatorname{sgn}(\omega)$ erweitert. Vorteil dieser Formulierung ist, dass alle das Bad beschreibenden Größen in die spektrale Dichte eingehen. Umgekehrt bedeutet dies auch, dass es völlig ausreicht, die spektrale Dichte des Bades zu kennen, was ohnehin der wahrscheinlichere Fall sein dürfte, da die Größen m_{α} und ω_{α} für ein experimentell realisiertes Bad mit nahezu unendlich vielen Freiheitsgraden nur schwerlich oder gar nicht zu ermitteln sind. Der Dämpfungskern im Zeitraum und die spektrale Dichte sind über die Kosinustransformation

$$\gamma(t) = \Theta(t) \frac{1}{M} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \, \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega t) \tag{1.13}$$

miteinander verknüpft. Der Ausdruck

$$J(\omega) = M\omega \int_0^\infty \mathrm{d}t \,\gamma(t) \cos(\omega t) \,. \tag{1.14}$$

bildet die dazu entsprechende Rücktransformation.

1.1.1.1 Ohm'sche und frequenzabhängige Dämpfung

Unter Ohm'scher Dämpfung versteht man den Fall einer frequenzunabhängigen Dämpfungskonstanten

$$\gamma(\omega) = \gamma \,. \tag{1.15}$$

Dies entspricht im Zeitregime einer lokalen (gedächtnislosen) Dämpfung $\gamma(t) = 2\gamma\delta(t)$. Die diesbezügliche spektrale Dichte hat dann gemäß der Relation (1.14) die Gestalt

$$J(\omega) = M\gamma\omega = \eta\omega, \qquad (1.16)$$

wobei η der gewöhnliche Viskositätskoeffizient ist. Da jedoch die für die Dissipation verantwortlichen Vorgänge nicht instantan ablaufen, sondern endliche Zeitspannen benötigen, findet man in realen physikalischen Systemen eine zeitlich nichtlokale und demnach frequenzabhängige Dämpfung. Folglich muss eine solche spektrale Dichte im Limes großer Frequenzen verschwinden. Für den niederfrequenten Anteil der spektralen Dichte, $J_{nf}(\omega)$, wird gängigerweise ein Potenzgesetz der Form

$$J_{\rm nf}(\omega) = \eta_s \frac{\omega^s}{\tilde{\omega}^{s-1}} \tag{1.17}$$

angesetzt, in der $\tilde{\omega}$ eine für das beschriebene System charakteristische Referenzfrequenz darstellt. Je nach Wert von *s* unterscheidet man subohmsche (s < 1) von superohmscher (s > 1) Dämpfung. Mit s = 1 ergibt sich wieder der ohmsche Fall [vgl. (1.16)]. Wie bereits angedeutet, muss die spektrale Dichte für große Frequenzen verschwinden. Dies erreicht man, indem man den Ausdruck (1.17) um eine Cutoff–Funktion ergänzt. Einen einfachen Cutoff kann mit der Exponentialfunktion konstruiert werden, sodass man schließlich den Ausdruck

$$J_{\rm nf}(\omega) = \eta_s \frac{\omega^s}{\tilde{\omega}^{s-1}} \exp\left\{-\frac{\omega}{\omega_c}\right\}$$
(1.18)

erhält. Zur Übersicht wird nachstehend die Aufspaltung der spektralen Dichte $J(\omega)$ nach niederfrequentem $J_{nf}(\omega)$ und hochfrequentem Anteil $J_{hf}(\omega)$ aufgelistet,

$$J(\omega) = J_{\rm nf} + J_{\rm hf}, \qquad (1.19)$$

$$J_{\rm nf}(\omega) = J(\omega)f(\omega/\omega_c), \qquad (1.20)$$

$$J_{\rm hf}(\omega) = J(\omega) \left[1 - f(\omega/\omega_c)\right]. \tag{1.21}$$

Hierin bezeichnet $f(\omega/\omega_c)$ eine allgemein gehaltene Cutoff-Funktion, die sich dadurch auszeichnet, dass der hochfrequente Anteil $J_{\rm hf}(\omega)$ für $\omega \ll \omega_c$ und der niederfrequente Beitrag $J_{\rm nf}(\omega)$ für $\omega \gg \omega_c$ vernachlässigbar klein wird.

1.1.2 Influenzfunktionalmethode

Nach der klassischen Herangehensweise soll nun die quantenphysikalische Behandlung in Form des Caldeira–Leggett–Modells im Mittelpunkt stehen. Die von Feynman und Vernon entwickelte Influenzfunktionalmethode [26] erlaubt eine reduzierte Beschreibung der Dynamik eines dissipativen Systems, in der die Freiheitsgrade der Umgebung nicht mehr vorkommen. Grundlage hierfür ist das in Anhang A behandelte Pfadintegralbild der Quantenmechanik.

Ausgangspunkt der Betrachtungen ist die formale Lösung der von-Neumann-Gleichung für die Dichtematrix des Gesamtsystems

$$\hat{W}(t) = \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t\right\}\hat{W}(0)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t\right\}.$$
(1.22)

Hierin ist \hat{H} der Hamiltonoperator, der aus der im vorherigen Abschnitt aufgestellten Hamiltonfunktion (1.5) gemäß dem Korrespondenzprinzip (siehe [83]) hervorgeht. Die Matrixelemente in der Ortsdarstellung von $\hat{W}(t)$ in Gleichung (1.22) lauten

$$\left\langle q_{\mathrm{f}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}} \left| \hat{W}(t) \right| q_{\mathrm{f}}', \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}' \right\rangle = \int \mathrm{d}q_{\mathrm{i}} \,\mathrm{d}q_{\mathrm{i}}' \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}} \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}' \,K\left(q_{\mathrm{f}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, t; q_{\mathrm{i}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}, 0\right) \\ \times \left\langle q_{\mathrm{i}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}} \left| \hat{W}(0) \right| q_{\mathrm{i}}', \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}' \right\rangle K^{*}\left(q_{\mathrm{f}}', \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}', t; q_{\mathrm{i}}', \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}', 0\right) ,$$
(1.23)

wobei der Vektor \boldsymbol{x}_i für $(x_{i,1}, \ldots, x_{i,N})$ steht. K ist die Ortsdarstellung des Zeitentwicklungsoperators

$$K\left(q_{\mathrm{f}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, t; q_{\mathrm{i}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}, 0\right) = \left\langle q_{\mathrm{f}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}} \left| \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar} \right| q_{\mathrm{i}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}} \right\rangle,$$
(1.24)

der auch als Pfadintegral geschrieben werden kann

$$K(q_{\rm f}, \boldsymbol{x}_{\rm f}, t; q_{\rm i}, \boldsymbol{x}_{\rm i}, 0) = \int \mathcal{D}q \,\mathcal{D}\boldsymbol{x} \,\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\left[q, \boldsymbol{x}\right]\right\}.$$
(1.25)

Die Funktionalintegration erstreckt sich dabei über Pfade mit den Randwerten

$$q(0) = q_{\rm i}, \quad q(t) = q_{\rm f}; \qquad q'(0) = q'_{\rm i}, \quad q'(t) = q'_{\rm f}, \qquad (1.26)$$

und

$$\boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_{i}, \quad \boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{x}_{f}; \qquad \boldsymbol{x}'(0) = \boldsymbol{x}'_{i}, \quad \boldsymbol{x}'(t) = \boldsymbol{x}'_{f}.$$
 (1.27)

Die Wirkung des Gesamtsystems in Gleichung (1.25) lässt sich in Anlehnung an die Hamiltonfunktion (1.2) in die drei Anteile

$$S[q, \boldsymbol{x}] = S_{\rm S}[q] + S_{\rm B}[\boldsymbol{x}] + S_{\rm I}[q, \boldsymbol{x}]$$
(1.28)

zerlegen.

Gleichung (1.23) beschreibt die Dynamik des Gesamtsystems. In der Regel interessiert man sich jedoch für Observable des Einzelsystems, deren Erwartungswerte durch Spuroperation mit der reduzierten Dichtematrix

$$\rho\left(q_{\mathrm{f}}, q_{\mathrm{f}}'; t\right) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}} \left\langle q_{\mathrm{f}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}} \left| \hat{W}(t) \right| q_{\mathrm{f}}', \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}} \right\rangle \\
= \int \mathrm{d}q_{\mathrm{i}} \,\mathrm{d}q_{\mathrm{i}}' \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}} \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}' \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}} \,K\left(q_{\mathrm{f}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, t; q_{\mathrm{i}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}, 0\right) \\
\times \left\langle q_{\mathrm{i}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}} \left| \hat{W}(0) \right| q_{\mathrm{i}}', \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}' \right\rangle K^{*}\left(q_{\mathrm{f}}', \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}', t; q_{\mathrm{i}}', \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}', 0\right) \tag{1.29}$$

gewonnen werden. Die reduzierte Dichtematrix erhält man ihrerseits durch Spurbildung über die Badfreiheitsgrade der Dichtematrix des Gesamtsystems (1.23).

1.1.2.1 Die Feynman–Vernon Methode für faktorisierende Anfangsbedingungen

Unter der Annahme, dass zum Anfangszeitpunkt t = 0 das relevante System in einem bestimmten präparierten Zustand, das Bad im thermodynamischen Gleichgewicht und beide voneinander entkoppelt vorliegen, kann man den Dichteoperator des Gesamtsystems zu diesem Zeitpunkt als direktes Produkt schreiben,

$$\hat{W}(0) = \hat{\rho}_{\rm S}(0) \otimes \hat{W}_{\rm B}(0) = \hat{\rho}_{\rm S}(0) \otimes \frac{\exp(-\beta \hat{H}_{\rm B})}{Z_{\rm B}}.$$
 (1.30)

Man spricht in diesem Fall auch von faktorisierenden Anfangsbedingungen. In der Darstellung (1.30) ist $\hat{\rho}_{\rm S}$ der Dichteoperator des relevanten Teilsystems und $\hat{W}_{\rm B}$ derjenige des Bades. Setzt man dies in (1.29) ein, so erhält man einen Ausdruck für die zeitliche Dynamik der reduzierten Dichtematrix

$$\rho(q_{\rm f}, q_{\rm f}'; t) = \int \mathrm{d}q_{\rm i} \,\mathrm{d}q_{\rm i}' \,J_{\rm FV}(q_{\rm f}, q_{\rm f}', t; q_{\rm i}, q_{\rm i}', 0) \,\rho_{\rm S}(q_{\rm i}, q_{\rm i}'; 0) \,, \tag{1.31}$$

in dem die Badkoordinaten nicht mehr explizit auftreten. Die darin enthaltene propagierende Funktion hat die Form

$$J_{\rm FV}(q_{\rm f}, q_{\rm f}', t; q_{\rm i}, q_{\rm i}', 0) = \int d\boldsymbol{x}_{\rm i} d\boldsymbol{x}_{\rm f}' d\boldsymbol{x}_{\rm f} K(q_{\rm f}, \boldsymbol{x}_{\rm f}, t; q_{\rm i}, \boldsymbol{x}_{\rm i}, 0) \times \left\langle \boldsymbol{x}_{\rm i} \left| \hat{W}_{\rm B} \right| \boldsymbol{x}_{\rm i}' \right\rangle K^{*}(q_{\rm f}', \boldsymbol{x}_{\rm f}, t; q_{\rm i}', \boldsymbol{x}_{\rm i}', 0).$$

$$(1.32)$$

Mit den Ausdrücken für die Funktionen K bzw. K^* [vgl. (1.25)] lässt sich die propagierende Funktion als doppeltes Pfadintegral schreiben,

$$J_{\rm FV}(q_{\rm f}, q'_{\rm f}, t; q_{\rm i}, q'_{\rm i}, 0) = \int \mathcal{D}q \,\mathcal{D}q' \,\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left(S_{\rm S}[q] - S_{\rm S}[q']\right)\right\} \mathcal{F}_{\rm FV}[q, q'].$$
(1.33)

Das hierin verwendete sogenannte Feynman-Vernon-Influenzfunktional

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\rm FV}[q(\cdot),q'(\cdot)] &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\rm i} \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\rm f} \,\left\langle \boldsymbol{x}_{\rm i} \left| \hat{W}_{\rm B} \right| \boldsymbol{x}_{\rm i}' \right\rangle \int \mathcal{D}\boldsymbol{x} \,\int \mathcal{D}\boldsymbol{x}' \\ &\times \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \Big(S_{\rm B}[\boldsymbol{x}] + S_{\rm I}[q(\cdot),\boldsymbol{x}] - S_{\rm B}[\boldsymbol{x}'] - S_{\rm I}[q'(\cdot),\boldsymbol{x}'] \Big) \right\} \end{aligned} \tag{1.34}$$

beinhaltet vollständig den Einfluss des Bades auf die Dynamik des Teilsystems, wobei über solche Pfade integriert wird, die den Randbedingungen

$$\boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_{i}, \quad \boldsymbol{x}'(0) = \boldsymbol{x}'_{i} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{x}'(t) = \boldsymbol{x}_{f}$$
 (1.35)

genügen. Das Influenzfunktional (1.34) lässt sich ebenso in der Form

$$\mathcal{F}_{\rm FV}[q(\cdot), q'(\cdot)] = \int \mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\rm i} \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\rm f} \,\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\rm f} \,\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{$$

darstellen unter Verwendung des Realzeitpfadintegrals

$$F(q(\cdot); \boldsymbol{x}_{\mathrm{f}}, \boldsymbol{x}_{\mathrm{i}}) = \int \mathcal{D}\boldsymbol{x} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left(S_{\mathrm{B}}[\boldsymbol{x}] + S_{\mathrm{I}}[q(\cdot), \boldsymbol{x}]\right)\right\}, \qquad (1.37)$$

welches sich über Pfade $\boldsymbol{x}(t')$ mit den Randpunkten $\boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_{i}$ und $\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{x}_{f}$ erstreckt. Für das durch die Hamiltonfunktion (1.5) beschriebene System zerfallen sowohl das Matrixelement der kanonischen Dichtematrix $W_{\rm B}$ als auch das Realzeitpfadintegral Fin ein Produkt aus den voneinander unabhängigen Beiträgen der einzelnen Oszillatoren

$$W_{\rm B}(\boldsymbol{x}_{\rm i}, \boldsymbol{x}_{\rm i}') = \prod_{\alpha=1}^{N} W_{\rm B}^{(\alpha)}(\boldsymbol{x}_{{\rm i},\alpha}, \boldsymbol{x}_{{\rm i},\alpha}'),$$

$$F(q; \boldsymbol{x}_{\rm f}, \boldsymbol{x}_{\rm i}) = \prod_{\alpha=1}^{N} F^{(\alpha)}(q; \boldsymbol{x}_{{\rm f},\alpha}, \boldsymbol{x}_{{\rm i},\alpha}).$$
(1.38)

Hierbei beschreibt $W_{\rm B}^{(\alpha)}$ das Matrixelement der kanonischen Dichtematrix des α -ten Oszillators, und $F^{(\alpha)}$ steht für den Propagator dieses Oszillators unter Einfluss der äußeren Kraft $c_{\alpha}q(t)$. Deren Darstellungen lassen sich mittels Standardberechnungen gewinnen [26, 34] und führen eingesetzt in (1.34) auf einfache Gauss'sche Integrale, deren Integrationsgrenzen durch die Endpunkte der Pfade vorgegeben sind. Man erhält schließlich den Ausdruck

$$\mathcal{F}_{\rm FV}[q(\cdot), q'(\cdot)] = \exp\left\{-\mathcal{S}_{\rm FV}\left[q(\cdot), q'(\cdot)\right]/\hbar\right\}$$
(1.39)

mit der Influenzwirkung

$$S_{\rm FV}[q,q'] = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \left[q(t') - q'(t') \right] \left[L(t' - t'')q(t'') - L^*(t' - t'')q'(t'') \right] + i \frac{\mu}{2\hbar} \int_0^t dt' \left[q^2(t') - q'^2(t') \right].$$
(1.40)

Die Größe μ ist mit dem in Gleichung (1.13) definierten Dämpfungskern über die Relation

$$\mu = \lim_{t \to 0^+} M\gamma(t) = M\gamma(0^+)$$

verknüpft, und der komplexwertige Integrationskern L(t) besitzt die Darstellung

$$L(t) \equiv L'(t) + iL''(t)$$

= $\frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \Big[\coth(\hbar\beta\omega/2)\cos(\omega t) - i\sin(\omega t) \Big],$ (1.41)

mit dem Real- bzw. Imaginärteil

$$L'(t) = \operatorname{Re}\left[L(t)\right] = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \, J(\omega) \coth(\hbar\beta\omega/2) \cos(\omega t) \tag{1.42}$$

23

und

$$L''(t) = \operatorname{Im}\left[L(t)\right] = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}\omega \, J(\omega) \sin(\omega t). \tag{1.43}$$

Gleichung (1.40) besagt, dass sich der Einfluss des Bades auf die Dynamik des interessierenden Systems in einer zeitlich nichtlokalen Kopplung zwischen den Pfaden q und q'widerspiegelt. Die graphische Darstellung der zur Influenzphase $\Phi_{\rm FV}[q,q']$ beitragenden Anteile sind in den Diagrammen der Abbildung 1.1 skizziert. In den beiden linken



Abbildung 1.1: Graphische Darstellung der vier Beiträge zur Influenzphase $\Phi_{\text{FV}}[q,q']$: Im ersten und dritten Diagramm repräsentiert die gestrichelte Linie die Wirkung des Propagators L(t' - t''), im zweiten und vierten Diagramm stellt sie die Wirkung des komplex konjugierten Propagators $L^*(t' - t'')$ dar.

Diagrammen wird die Selbstwechselwirkung innerhalb der Pfade q bzw. q' dargestellt. Die Wechselwirkung zwischen beiden Pfaden wird anhand der zwei rechten Diagramme veranschaulicht. Da $\Phi_{\rm FV}[q,q']$ exponentiell in den Ausdruck $\mathcal{F}_{\rm FV}[q,q']$ eingeht, tragen zum Influenzfunktional alle reduziblen und irreduziblen Wechselwirkungslinien zwischen und innerhalb der Pfade q und q' bei, die sich durch Kombination der vier dargestellten grundlegenden Diagramme konstruieren lassen. Im Vergleich von Gleichung (1.43) mit dem Ausdruck (1.14) erkennt man die Relation

$$L''(t) = \frac{M}{2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \gamma(t), \qquad (1.44)$$

die den Imaginärteil des Feynman-Vernon-Integralkerns L''(t) mit dem Dämpfungskern $\gamma(t)$ der klassischen Bewegungsgleichung in Beziehung setzt. Für die weiteren Betrachtungen ist die Einführung von symmetrischen und antisymmetrischen Koordinaten

$$r(t) = \frac{1}{2} (q(t) + q'(t))$$
 und $y(t) = q(t) - q'(t)$

sinnvoll. Die Größe y(t) ist ein Maß dafür, wie weit entfernt sich der Pfad (q, q') von den Diagonalzuständen befindet, dahingegen misst der Pfad r(t) die Propagation entlang der Diagonalen der Dichtematrix und wird aus diesem Grund auch quasiklassischer Pfad genannt. Mittels dieser Koordinaten und unter Verwendung der Gleichung (1.44) kann die Influenzwirkung (1.40) nach partieller Integration ihres Imaginärteils auf folgende Form gebracht werden,

$$\mathcal{S}_{\mathrm{FV}}[q,q'] = \mathcal{S}^{(\mathrm{N})}[y] + \mathrm{i} \,\mathcal{S}^{(\mathrm{F})}[r,y]$$

mit

$$S^{(N)}[y] = \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' y(t') L'(t' - t'') y(t'')$$
(1.45)

und

$$S^{(F)}[r,y] = \frac{M}{\hbar} \int_0^t dt' \left(\int_0^{t'} dt'' y(t') \gamma(t'-t'') \dot{r}(t'') + r(0) \gamma(t') y(t') \right).$$

Hierin bezeichnet $S^{(N)}$ die Rauschwirkung (engl. noise action) und $S^{(F)}$ die Reibungswirkung (engl. friction action). In dieser Darstellung erkennt man, dass die Kopplung des Systems an die Umgebung sich in zwei verschiedenen Effekten äußert: Einerseits führt die Influenzwirkung $S^{(F)}$ zu Reibung, da sie in den Bewegungsgleichungen des quasiklassischen Pfades r(t) einen dämpfenden Kraftterm $\int_0^t dt' \gamma(t-t')\dot{r}(t')$ verursacht. Andererseits bewirkt der Rauschanteil $S^{(N)}[y]$ ein zufälliges Hin- und Herverschieben an Energie zwischen System und Bad und ist somit maßgeblich für den Kohärenzverlust verantwortlich.

Die möglicherweise aufgesammelte Phasendifferenz φ der Übergangsamplituden steht in direktem Bezug zum Phänomen der Quanteninterferenz. Die quadrierten Amplitudenausdrücke weisen einen Phasenfaktor $e^{\pm i\varphi}$ auf, dessen Argument φ bei vorhandener Badankopplung fluktuiert. Daher ist die relevante Größe der statistische Mittelwert des Phasenfaktors, $\langle e^{\pm i\varphi} \rangle$, welcher ein Maß für die Dekohärenz bzw. die Auslöschung der Quantenkohärenz zweier Pfade q(t) und q(t') ist und durch den Wirkungsterm des Rauschens, $S^{(N)}[y]$, beschrieben wird,

$$\langle e^{\pm i\varphi} \rangle = e^{-\delta^{(N)}[y]/\hbar}.$$
(1.46)

Dieser Ausdruck (1.46) ist unabhängig vom quasiklassischen Pfad r(t). Das Rauschfunktional $S^{(N)}[y]$ wirkt demnach wie ein Gauss'sches Filter, welches nebendiagonale Quantenfluktuationen ausblendet. Physikalisch betrachtet, misst die Umgebung permanent die Position des Systems. Wegen dieses stetigen Messprozesses wird die Quanteninterferenz zwischen Positionseigenzuständen unterdrückt, was dazu führt, dass sich die Systemdynamik in eher klassischer Weise verhält.

1.1.2.2 Allgemeine Anfangsbedingungen

Für faktorisierende Anfangsbedingungen liegt zum Zeitpunkt t = 0 keine Korrelation zwischen Bad und System vor. Solche Anfangsbedingungen sind zwar vorteilhaft bei numerischen Simulationen, jedoch sind diese, vom experimentellen Standpunkt aus gesehen, schwer zu verwirklichen, da in den meisten Fällen die Wechselwirkung zwischen System und Bad nicht kontrolliert werden kann. In der Folge werden die grundlegenden Ideen erläutert werden, um allgemeinere Anfangsbedingungen zu berücksichtigen, die experimentell-physikalischen Problemstellungen gerecht werden. Eine Vielzahl an Anfangsbedingungen geht aus einer linearen Transformation der Dichtematrix des Gesamtsystems im thermischen Gleichgewicht hervor,

$$\hat{W}_{\beta} = \exp\{-\beta \hat{H}/Z\},\$$

wobei \hat{H} aus Gleichung (1.5) ist. In der Ortsdarstellung lässt sich nun schreiben [34]

$$\left\langle q_{\mathbf{i}}, \boldsymbol{x}_{\mathbf{i}} \left| \hat{W}(0) \right| q_{\mathbf{i}}', \boldsymbol{x}_{\mathbf{i}}' \right\rangle = \int \mathrm{d}\bar{q} \,\mathrm{d}\bar{q}' \,\lambda\left(q_{\mathbf{i}}, q_{\mathbf{i}}'; \bar{q}, \bar{q}'\right) \left\langle \bar{q}, \boldsymbol{x}_{\mathbf{i}} \left| \hat{W}_{\beta} \right| \bar{q}', \boldsymbol{x}_{\mathbf{i}}' \right\rangle, \tag{1.47}$$

wobei die Präparationsfunktion $\lambda(q_i, q'_i; \bar{q}, \bar{q}')$ die jeweiligen Anfangsbedingungen generiert. So werden beispielsweise thermische Anfangsbedingungen, $\hat{W}(0) = \hat{W}_{\beta}$, durch die Funktion $\lambda_{\beta}(q_i, q'_i; \bar{q}, \bar{q}') = \delta(q_i - \bar{q})\delta(q'_i - \bar{q}')$ gewonnen.

Der Fall, dass sich das Gesamtsystem im thermodynamischen Gleichgewicht befindet, und zur Zeit t' = 0 die Messung einer Observablen des Teilsystems vorgenommen wird, führt zu einer Reduktion der Dichtematrix. Mit dem Operator \hat{P} , der die Projektion auf die entsprechende Messgröße ausführt, kann dies in der Form

$$\hat{W}(0) = \hat{P} \ \hat{W}_{\beta}\hat{P}$$

geschrieben werden. Demnach ist durch $\lambda(q_i, q'_i; \bar{q}, \bar{q}') = \langle q_i | \hat{P} | \bar{q} \rangle \langle \bar{q}' | \hat{P} | q'_i \rangle$ die zugehörige Präparationsfunktion gegeben. Ebenso sind die Berechnungen von Korrelationsfunktionen durch den Ansatz (1.47) möglich [57]. So kann z. B. die Ortskorrelationsfunktion $C_q(t) = \langle q(t)q(0) \rangle_\beta$ durch die Vorschrift $\lambda(q_i, q'_i; \bar{q}, \bar{q}') = q_i \lambda_\beta(q_i, q'_i; \bar{q}, \bar{q}')$ behandelt werden.

Die Dynamik der reduzierten Dichtematrix gewinnt man, indem man Gleichung (1.47) in den Ausdruck (1.29) einsetzt. Man erhält auf diese Weise die Darstellung

$$\rho(q_{\rm f}, q_{\rm f}'; t) = \int dq_{\rm i} dq_{\rm i}' d\bar{q} d\bar{q}' J_{\rm FV}(q_{\rm f}, q_{\rm f}', t; q_{\rm i}, q_{\rm i}', \bar{q}, \bar{q}') \lambda(q_{\rm i}, q_{\rm i}'; \bar{q}, \bar{q}')$$

in der die propagierende Funktion durch

$$J_{\rm FV}(q_{\rm f}, q'_{\rm f}, t; q_{\rm i}, q'_{\rm i}, \bar{q}, \bar{q}') = \int d\boldsymbol{x}_{\rm i} d\boldsymbol{x}_{\rm i}' d\boldsymbol{x}_{\rm f} K(q_{\rm f}, \boldsymbol{x}_{\rm f}, t; q_{\rm i}, \boldsymbol{x}_{\rm i}, 0) \times \left\langle \bar{q}, \boldsymbol{x}_{\rm i} \left| \hat{W}_{\beta} \right| \bar{q}', \boldsymbol{x}'_{\rm i} \right\rangle K^{*}(q'_{\rm f}, \boldsymbol{x}_{\rm f}, t; q'_{\rm i}, \boldsymbol{x}'_{\rm i}, 0)$$
(1.48)

gegeben ist. Die weitere Berechnung der Dynamik der reduzierten Dichtematrix beruht nun darauf, dass ein ergodisches System, unabhängig von seiner Anfangspräparation, im Langzeitlimes dem thermodynamischen Gleichgewichtszustand entgegenstrebt, soweit dieser existiert. Der Anfangszustand des Gesamtsystems liegt also zu einem Zeitpunkt $t_0 < 0$ in der faktorisierenden Form $\hat{W}(t_0) = \hat{\rho}_{\rm S}(t_0) \otimes Z_{\rm B}^{-1} \exp\{-\beta \hat{H}_{\rm B}\}$ vor. Für Zeiten $t > t_0$ evoluiert das System unbeeinflusst gemäß dem Hamiltonoperator (1.5). Im Grenzfall $t_0 \to -\infty$ wird das Gesamtsystem zur Zeit t' = 0 durch das kanonische Dichtematrixelement

$$\left\langle \bar{q}, \boldsymbol{x}_{i} \left| \hat{W}_{\beta} \right| \bar{q}', \boldsymbol{x}_{i}' \right\rangle = \lim_{t_{0} \to -\infty} \int d\bar{q} d\bar{q}' d\boldsymbol{x}_{0} d\boldsymbol{x}_{0}' K(\bar{q}, \boldsymbol{x}_{i}, 0; q_{0}, \boldsymbol{x}_{0}, t_{0}) \times \rho_{S}(q_{0}, q_{0}'; t_{0}) \left\langle \boldsymbol{x}_{0} \left| \hat{W}_{B} \right| \boldsymbol{x}_{0}' \right\rangle K^{*}(\bar{q}', \boldsymbol{x}_{i}', 0; q_{0}', \boldsymbol{x}_{0}', t_{0})$$

$$(1.49)$$

beschrieben, wodurch die Rückführung des Falls korrelierter Anfangszustände auf denjenigen faktorisierender Anfangsbedingungen ermöglicht wird. Gleichung (1.49) eingesetzt in (1.48) ergibt für die propagierende Funktion ein zweifaches Realzeitpfadintegral,

$$J(q_{\rm f}, q'_{\rm f}, t; q_{\rm i}, q'_{\rm i}, \bar{q}, \bar{q}') = \lim_{t_0 \to -\infty} J(q_{\rm f}, q'_{\rm f}, t; q_{\rm i}, q'_{\rm i}, 0^+; \bar{q}, \bar{q}', 0^-; q_0, q'_0, t_0)$$

$$= \lim_{t_0 \to -\infty} \int dq_0 \, dq'_0 \, \rho_{\rm S}(q_0, q'_0, t_0)$$

$$\times \int \mathcal{D}q \, \mathcal{D}q' \, \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left(S_{\rm S}[q] - S_{\rm S}[q']\right)\right\} \mathcal{F}[q, q'], \qquad (1.50)$$

mit den zeitlichen Randbedingungen an die Pfade

$$\begin{array}{ll} q(t_0) = q_0 \,, & q(0^-) = \bar{q} \,, & q(0^+) = q_{\rm i} \,, & q(t) = q_{\rm f} \,, \\ q(t_0') = q_0' \,, & q'(0^-) = \bar{q}' \,, & q'(0^+) = q_{\rm i}' \,, & q'(t) = q_{\rm f}' \,. \end{array}$$

Diese Pfade können für den Zeitpunkt t' = 0 Unstetigkeiten aufweisen. In Gleichung (1.50) hat das Influenzfunktional die Form

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[q(\cdot),q'(\cdot)] &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}} \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{i}} \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{o}} \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{o}}' \,\left\langle \boldsymbol{x}_{0} \left| \hat{W}_{\mathrm{B}} \right| \boldsymbol{x}_{0}' \right\rangle \int \mathcal{D}\boldsymbol{x} \,\mathcal{D}\boldsymbol{x}' \\ &\times \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \Big(S_{\mathrm{B}}[\boldsymbol{x}] + S_{\mathrm{I}}[q(\cdot),\boldsymbol{x}] - S_{\mathrm{B}}[\boldsymbol{x}'] - S_{\mathrm{I}}[q'(\cdot),\boldsymbol{x}'] \Big) \right\}, \end{aligned} \tag{1.51}$$

wobei die Integrationen über Pfade laufen, die den Bedingungen genügen:

$$egin{aligned} & m{x}(t_0) = m{x}_0, & m{x}(0) = m{x}_{
m i}, & m{x}(t) = m{x}_{
m fr}, \ & m{x}'(t_0) = m{x}'_0, & m{x}'(0) = m{x}'_{
m i}, & m{x}'(t) = m{x}_{
m fr}. \end{aligned}$$

Man erkennt, dass der Ausdruck (1.51) mit dem Feynman–Vernon–Influenzfunktional (1.34) aufgrund der Integration über \boldsymbol{x}_i und \boldsymbol{x}'_i übereinstimmt, indem der Zeitpunkt der Präparation t' = 0 durch $t' = t_0$ ersetzt wird. Wie im Fall faktorisierender Anfangsbedingungen lässt sich nun auch hier das Influenzfunktional durch den Ausdruck

$$\mathcal{F}[q(\cdot), q'(\cdot)] = \exp\left\{-\mathcal{S}[q(\cdot), q'(\cdot)]/\hbar\right\}$$

darstellen, mit der darin enthaltenen Influenzwirkung

$$\begin{split} \mathcal{S}[q,q'] &= \int_{t_0}^t \mathrm{d}t' \int_{t_0}^{t'} \mathrm{d}t'' \left[q(t') - q'(t') \right] \left[L(t' - t'') q(t'') - L^*(t' - t'') q'(t'') \right] \\ &+ \mathrm{i} \frac{\mu}{2\hbar} \int_{t_0}^t \mathrm{d}t' \left[q^2(t') - q'^2(t') \right]. \end{split}$$
(1.52)

Hier zeigt sich die im Anfangszustand vorhandene Korrelation zwischen System und Bad durch Wechselwirkungslinien zwischen den Pfaden q und q', die negative und positive Zeitpunkte verbinden.

Abschließend kann zusammengefasst werden, dass sowohl im allgemeinen Fall korrelierter Anfangsbedingungen sowie bei faktorisierenden Anfangszuständen der Einfluss des Bades auf das interessierende System sich komplett im sog. Feynman–Vernon–Influenzfunktional widerspiegelt.

1.2 Spin-Boson-Modell

In einer Vielzahl von Fällen können die dynamischen Eigenschaften eines mikroskopischen Systems durch eine effektive Beschreibung in einem zweidimensionalen Hilbertraum erklärt werden. Ein isoliertes Spin–1/2–Teilchen stellt ein System dar, welches bereits intrinsisch nur aus zwei Zuständen besteht. Es gibt aber auch Systeme, deren Hilbertraum zwar höherdimensional ist, deren Dynamik jedoch in bestimmten Parameterregionen defacto auf zwei verschiedene Zustände beschränkt bleibt. Diese letztgenannte Situation kann auch vorkommen, falls der Potentialverlauf des entsprechenden Systemfreiheitsgrades die Gestalt einer Doppelmulde besitzt und darüberhinaus die weiteren Bedingungen derart sind, dass in beiden Mulden nur der energetisch niedrigste Zustand besetzt werden kann.

1.2.1 Reduktion eines Doppelmuldenpotentials

Gegeben sei das in Abb. 1.2 dargestellte Doppelmuldenpotential, dessen beide Minima durch eine Barriere der Höhe $V_{\rm b}$ voneinander getrennt sind und dessen Mulden einen Abstand q_0 voneinander aufweisen. Die Energiedifferenz der jeweils niedrigsten Energieniveaus in beiden Mulden betrage $\hbar\epsilon$. Diese Differenz wird auch häufig Verkippung (engl. *bias*) genannt. Des Weiteren seien in harmonischer Näherung in beiden Minima Oszillationen mit der Frequenz ω_0 möglich. Unter der Annahme, dass $V_{\rm b} \gg \hbar\omega_0$ gilt, besitzt jede Mulde diskrete Zustände, deren Energieniveaus jeweils um $\hbar\omega_0$ voneinander abweichen. Bei tiefen Temperaturen sind von diesen Niveaus lediglich die energetisch am tiefsten gelegenen besetzt. Zwischen diesen beiden lokalisierten Zuständen ist Tun-



Abbildung 1.2: Darstellung eines Doppelmuldenpotentials mit Barrierenhöhe $V_{\rm b}$, Muldenabstand q_0 und Verkippung $\hbar \epsilon$.

neln möglich. Das zugehörige Tunnelmatrix
element Δ_0 kann bei genauer Kenntnis der Potentialform über Instanton–Techniken [53, 85] berechnet werden. Man findet folgende Proportionalität

$$\Delta_0 \propto \omega_0 \sqrt{\frac{V_{\rm b}}{\hbar\omega_0}} \exp\left\{-c\frac{V_{\rm b}}{\hbar\omega_0}\right\},\tag{1.53}$$

wobei c eine numerische Konstante ist, deren Wert von der vorliegenden Potentialform abhängt. Da $\hbar\Delta_0$ exponentiell klein gegen den Niveauabstand $\hbar\omega_0$ ist, können durch den Tunnelprozess keine Vermischungen der Grundzustände mit angeregten Zuständen auftreten. Damit die letzte Aussage auch für asymmetrische Potentialformen gilt (d.h. $\epsilon \neq 0$), muss zusätzlich gefordert werden, dass der Bias ϵ klein gegenüber dem Niveauabstand ω_0 ist. Somit lauten alle in diesem Abschnitt geforderten Annahmen zusammengefasst:

$$k_{\rm B}T, \,\hbar \left|\epsilon\right|, \,\hbar\Delta_0 \ll \hbar\omega_0 \ll V_{\rm b}\,.$$
 (1.54)

Sind diese Bedingungen erfüllt, ist der Hilbertraum des Systems effektiv auf die beiden niedrigsten Zustände in den zwei Minima des Potentials beschränkt. In diesem Fall kann das System durch den Hamiltonoperator eines Zweizustandssystems (ZZS) beschrieben werden und auf eine Form in Pseudospin–Schreibweise

$$\hat{H}_{\text{ZZS}} = -\frac{\hbar}{2} \left(\Delta_0 \hat{\sigma}_x + \epsilon \hat{\sigma}_z \right)$$
(1.55)

gebracht werden. Hierin bezeichnet $\hat{\sigma}_i$ die Paulimatrizen, die sich in der Basis der lokalisierten Zustände $|\mathbf{R}\rangle$ (rechts) und $|\mathbf{L}\rangle$ (links) durch die Ausdrücke

$$\hat{\sigma}_z = |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}| - |\mathbf{L}\rangle \langle \mathbf{L}|$$
 bzw. $\hat{\sigma}_x = |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{L}| + |\mathbf{L}\rangle \langle \mathbf{R}|$

formulieren lassen. Die Paulimatrix $\hat{\sigma}_z$ kann mit dem Positionsoperator \hat{q} über die Relation

$$\hat{q} = \hat{\sigma}_z \frac{q_0}{2}$$

in Beziehung gesetzt werden, wobe
i q_0 den Abstand zwischen den beiden Minima bezeichnet.

Das Zweizustandssystem ist das einfachste System, welches die Phänomene der konstruktiven und destruktiven Interferenz zeigt. Präpariert man ein solches System in einem bestimmten Zustand zum Zeitpunkt $t = t_0$, so oszilliert die Wahrscheinlichkeit, es wieder in diesem Anfangszustand zu Zeiten $t > t_0$ vorzufinden, zwischen den Werten null und eins. Ein bekanntes Beispiel dieses Effekts ist das Ammoniakmolekül NH₃:

Das Stickstoffatom unterliegt dem Potential der umliegenden drei Wasserstoffatome, die in einer Ebene auf den Ecken eines Dreiecks um das Stickstoffatom platziert sind. Aufgrund der Symmetrie der Anordnung hängt das Potential nur vom Abstand des Stickstoffatoms von dieser Ebene ab und besitzt als Funktion dieses Abstandes die Form einer Doppelmulde. Die beiden Minima liegen symmetrisch zu dieser Ebene. Die Oszillation zwischen diesen beiden möglichen Konfigurationen kann spektroskopisch nachgewiesen werden. Sollen dissipative Effekte eines Zweizustandssystems mitberücksichtigt werden, muss die Reduktion des nun dissipativen Doppelmuldenpotentials abgeändert werden. Auf diese Modifikationen soll hier nicht eingegangen werden, jedoch sind sie ausführlich z. B. in [11, 57, 86] dargelegt. Der wesentliche Unterschied liegt darin, die Moden des Bades anhand einer zunächst willkürlich gewählten Cutoff–Frequenz ω_c in schnelle, hochfrequente Anteile (hf) mit $\omega > \omega_c$ und langsame, niederfrequente Anteile (nf) mit $\omega < \omega_c$ einzuteilen. Im Gesamthamiltonoperator tritt nun ein modifiziertes Bad auf, welches nur Moden bis zur gewählten Cutoff–Frequenz ω_c beschreiben kann. Den hochfrequenten Moden wird durch die Renormierung des Tunnelmatrixelements Δ_0 und des Niveauabstands ω_0 Rechnung getragen.¹ Diese modifizierte Reduktionsvorschrift führt auf den sog. Spin–Boson–Hamiltonoperator:

$$\hat{H}_{\text{SBM}} = -\frac{\hbar}{2} \left(\Delta \hat{\sigma}_x + \epsilon \hat{\sigma}_z \right) - \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \sum_{\vartheta \in \text{nf}} \hbar \lambda_\vartheta (\hat{b}_\vartheta + \hat{b}_\vartheta^\dagger) + \sum_{\vartheta \in \text{nf}} \hbar \omega_\vartheta \hat{b}_\vartheta^\dagger \hat{b}_\vartheta \,. \tag{1.56}$$

Hierin bezeichnet $\Delta = \Delta(\omega_c)$ das renormierte Tunnelmatrixelement. Eine Vielzahl der Badoszillatoren in Gleichung (1.56) ist selbst nach dem oben skizzierten Reduktionsprozess noch groß gegen die charakteristische Frequenz Δ des Zweizustandssystems. Dies legt nahe, diese Frequenzanteile durch eine adiabatische (Born–Oppenheimer) Näherung zu eliminieren. In einem iterativen Verfahren führt dies im Fall Ohm'scher Dämpfung und im Bereich des Kopplungsparameters $\alpha < 1$ zu einer renormierten Frequenzskala

$$\Delta_{\rm r} = \Delta \left(\frac{\Delta}{\omega_{\rm c}}\right)^{\frac{\alpha}{1-\alpha}} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{q_0^2 \eta}{2\pi\hbar}. \tag{1.57}$$

Da Δ in Abhängigkeit von ω_c die Proportionalität $\Delta \propto \omega_c^{\alpha}$ zeigt [84], ist der Ausdruck (1.57) unabhängig von der unphysikalischen Cutoff-Frequenz ω_c . Dieses Verhalten entspricht der Erwartung, weil die Frequenz ω_c in willkürlicher Weise in die physikalische Problemstellung eingeführt worden ist.

1.2.2 Präparation der Anfangszustände

Wie bereits im Abschnitt 1.1.2 bezüglich der Influenzfunktionalmethode sollen nun auch die Auswirkungen unterschiedlicher Anfangspräparationen auf die Dynamik des Zweizustandssystem diskutiert werden. Dies ist vor allem für das Verständnis experimenteller Systeme von Bedeutung.

$$\hbar\Delta(\omega_{\rm c}) \ll \hbar\omega_{\rm c} \ll \hbar\omega_{\rm r}(\omega_{\rm c})$$

erfüllt wird.

¹Die renormierten Größen sollen mit Δ und ω_r bezeichnet werden. Die Cutoff–Frequenz ist nun so zu wählen, dass die Ungleichung

1.2.2.1 Anfangszustand in Produktform

Gegeben sei der Dichteoperator eines Gesamtsystems, dessen Zustand zum Zeitpunkt t = 0 in ein Produkt aus System- mal Badzustand faktorisiert [vgl. Gleichung (1.30)],

$$\hat{W}_{\rm fc}(t=0,\bar{\sigma}) = |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}| \otimes \exp\left\{-\beta \left[\hat{H}_{\rm Res} - \bar{\sigma} \mathfrak{E}(t=0)\right]\right\} / Z_{\rm Res} \,. \tag{1.58}$$

Das Zweizustandssystem befindet sich im Eigenzustand $\sigma = +1$ der Paulimatrix σ_z , was einer Anfangsbesetzung der rechten Potentialmulde entspricht. Das Bad bzw. das Reservoir wird durch eine kanonische Verteilung beschrieben, die um den Term $\beta \bar{\sigma} \mathfrak{E}$ verschoben ist. Hierbei ist \hat{H}_{Res} der Hamiltonoperator des Bades, $\mathfrak{E}(t) = \frac{q_0}{2} \sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha}(t)$ steht für die kollektive Badmode. $\bar{\sigma}$ stellt einen Kontrollparameter für die Verschiebung des Anfangszustandes des Bades zum Zeitpunkt t = 0 dar, bei dem das Bad in Wechselwirkung mit dem Zweizustandssystem tritt. Das an diesen Anfangszustand (1.58) angepasste Influenzfunktional kann in der bereits erwähnten Gestalt des Feynman– Vernon Influenzfunktionals (1.34) dargestellt werden, in welchem das System und das Bad zu einem Zeitpunkt $t_0 \leq 0$ aneinander koppeln. Berücksichtigt man, dass der letzte Term in Gleichung (1.52) wegen $\sigma^2(t) = \sigma'^2(t) = 1$ nicht zum Funktional beiträgt, ergibt sich

$$\mathcal{F}[\sigma,\sigma';t_0] = \exp\left\{-\frac{1}{4}\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \left[\sigma(t') - \sigma'(t')\right] \left[\mathcal{L}(t'-t'')\sigma(t'') - \mathcal{L}^*(t'-t'')\sigma'(t'')\right]\right\}.$$
(1.59)

Zur einfacheren Schreibweise wird hier die Größe $\mathcal{L}(t) \equiv \frac{q_0^2}{\hbar}L(t)$, mit dem Integrationskern L(t) aus Gl. (1.41), definiert, die über die Relation $\ddot{Q}(t) = \mathcal{L}(t)$ mit der Badkorrelationsfunktion Q(t) in Beziehung steht. Es lassen sich nun zwei Präparationsklassen unterscheiden, die in der Folge als Klasse A und B bezeichnet werden.

Präparationsklasse A: Es wird angenommen, dass sich das Bad im kanonischen Gleichgewicht des reinen Bad-Hamiltonoperators (1.3) befindet. Das System wird zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ im Zustand $\sigma = +1$ präpariert und auch erst zu diesem Zeitpunkt in Kontakt mit dem Bad gebracht. Dies entspricht einer Wahl des Kontrollparameters $\bar{\sigma} = 0$ in Gleichung (1.58). Das System entwickelt sich demnach aus einem Zustand des Gesamtsystems, in welchem das Bad nicht in die veränderte thermische Gleichgewichtsverteilung zum Präparationszeitpunkt relaxiert ist. Abkürzend schreibt man

$$\mathfrak{F}_{\bar{\sigma}=0}[\sigma,\sigma'] = \mathfrak{F}[\sigma,\sigma';t_0=0]. \tag{1.60}$$

Präparationsklasse B: Wählt man in Gleichung (1.58) den Kontrollparameter $\bar{\sigma} = +1$, so entspricht dies dem Fall, dass der Anfangszustand für einen langen Zeitraum im Zustand $\sigma = +1$ gehalten wurde. Dies bewirkt, dass sich das mit dem System in Wechselwirkung stehende Bad wieder im thermischen Gleichgewicht befindet. Erreichen lässt sich dies zum Beispiel durch Aufzwingen eines stark negativen Bias, $-\hbar\epsilon\Theta(-t)$ mit $\epsilon \gg \Delta$, für alle Zeiten t < 0. Dies erzwingt, dass sich das System in dieser Zeitspanne stets im Zustand $\sigma = +1$ befindet. Zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ wird dieser

Zwangsbias aufgehoben, so dass sich daraufhin das Gesamtsystem gemäß dem Spin-Boson-Hamiltonoperator (1.56) entwickelt. Analog zu (1.60) führt man die Schreibweise,

$$\mathcal{F}_{\bar{\sigma}=+1}[\sigma,\sigma'] = \mathcal{F}[\sigma,\sigma';t_0 \to -\infty], \qquad (1.61)$$

ein. In diesem Ausdruck werden die Pfade $\sigma(t')$ und $\sigma'(t')$ für alle Zeiten t' < 0 im Zustand $\sigma = \sigma' = \bar{\sigma}$ gehalten.

Die beiden Präparationsklassen sind über die Relation

$$\mathcal{F}_{\bar{\sigma}}[\sigma,\sigma'] = \mathcal{F}_{\bar{\sigma}=0}[\sigma,\sigma'] \exp\left\{i\frac{\bar{\sigma}}{2}\int_0^t dt' \left[\sigma(t') - \sigma'(t')\right]\dot{Q}''(t')\right\}$$
(1.62)

miteinander verknüpft, wobei $\dot{Q}''(t)$ die Zeitableitung des imaginären Anteils der komplexen Badkorrelationsfunktion Q(t) = Q'(t) + iQ''(t) bezeichnet, die im Kontext von Gleichung (1.59) eingeführt wurde. Man erkennt am Ausdruck (1.62), dass die Auswirkungen der Präparationsklasse A auf Ebene des Hamiltonoperators (1.56) durch Hinzufügen eines zusätzlichen zeitabhängigen Biasterms, $\epsilon(t) = \bar{\sigma}Q''(t)$, beschrieben werden können. Weiterhin sieht man, dass im Falle eines rein Ohm'schen Bades, d.h. $\omega_c \to \infty$ und $Q''(t) \propto \delta(t)$, der Integralausdruck im Exponenten der Gleichung (1.62) verschwindet. Somit hat die Präparationsart im Falle eines Ohm'schen Bades keinen Einfluss auf die Systemdynamik. Im allgemeinen Fall verschwinden die Effekte, die durch die unterschiedliche Präparation hervorgerufen werden, auf einer Zeitskala der Größe $1/\omega_c$ und sind daher nur im adiabatischen Grenzfall, also $\omega_c \leq \Delta$, von Bedeutung. Die Dynamik des Zweizustandssystems zu Zeiten $t \geq 0$ ist vollends durch die reduzierte Dichtematrix bestimmt. Die Besetzungswahrscheinlichkeit der beiden Zustände ist durch die Diagonalelemente des Dichteoperators $\rho_{1,1} = \langle \mathbf{R} | \hat{\rho} | \mathbf{R} \rangle$ und $\rho_{-1,-1} = \langle \mathbf{L} | \hat{\rho} | \mathbf{L} \rangle$ gegeben, die Kohärenzen sind die Nebendiagonalelemente $\rho_{-1,1} = \langle L|\hat{\rho}|R\rangle$ und $\rho_{1,-1} = \rho^*_{-1,1}$. Da die Paulimatrizen zusammen mit der Einheitsmatrix eine vollständige Basis im zweidimensionalen Hilbertraum bilden, lässt sich die reduzierte Dichtematrix als deren Linearkombination darstellen,

$$\hat{\rho}(t) = \frac{1}{2} \left[1 + \sum_{j=x,y,z} \langle \sigma_j \rangle_t \hat{\sigma}_j \right], \qquad (1.63)$$

mit den Erwartungswerten der Paulimatrizen

$$\langle \sigma_j \rangle_t \equiv \operatorname{tr}_{\operatorname{Res}} \left\{ \exp[-\beta \hat{H}_{\operatorname{Res}} + \bar{\sigma} \beta \mathfrak{E}(0)] \langle \operatorname{R} | \hat{\sigma}_j(t) | \operatorname{R} \rangle \right\} / Z_{\operatorname{Res}}.$$
 (1.64)

Die zeitabhängigen Operatoren $\hat{\sigma}_j(t)$ sind im Heisenberg–Bild definiert,

$$\hat{\sigma}_j(t) = \hat{U}^{\dagger}(t)\,\hat{\sigma}_j\,\hat{U}(t)\,,\tag{1.65}$$

mit dem unitären Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t) = \exp\{-i\hat{H}t/\hbar\}$ und dem Hamiltonoperator des Gesamtsystems (1.56).

Die Erwartungswerte der Paulimatrizen lassen sich durch die Matrixelemente des Dichteoperators ausdrücken

$$\langle \sigma_x \rangle_t = \rho_{1,-1} + \rho_{-1,1}(t) , \langle \sigma_y \rangle_t = i\rho_{1,-1}(t) - i\rho_{-1,1}(t) ,$$
 (1.66)

$$\langle \sigma_z \rangle_t = \rho_{1,1}(t) - \rho_{-1,-1}(t) .$$

In der Folge gilt zum Zeitpunkt t = 0 die Anfangsbedingung $\rho_{\sigma,\sigma'}(t=0) = \delta_{1,\sigma}\delta_{1,\sigma'}$. Da die Basis so gewählt ist, dass der Operator $\hat{\sigma}_z$ in Matrixdarstellung Diagonalgestalt besitzt, beschreibt der zugehörige Erwartungswert $\langle \sigma_z \rangle_t$ die Zeitentwicklung der Differenz in der Besetzung der beiden lokalisierten Zustände bezogen auf die Anfangspopulation im rechten Zustand; es gilt also $\langle \sigma_z \rangle_{t=0} = 1$. Diese Größe $\langle \sigma_z \rangle_t$ ist somit direkt ein Maß für die Tunneldynamik des Zweizustandssystems. Die Verwendung von Gleichung (1.65) sowie der Kommutatorrelation $[\hat{H}, \hat{\sigma}_z] = i\hbar\Delta\hat{\sigma}_x$ führt auf die Beziehung

$$\langle \sigma_y \rangle_t = -\frac{1}{\Delta} \frac{\mathrm{d} \langle \sigma_z \rangle_t}{\mathrm{d}t} \,.$$
 (1.67)

Die Gleichung (1.67) zeigt, dass der Erwartungswert der Kohärenz $\langle \sigma_y \rangle_t$ proportional zum Tunnelstrom ist.

Die Ausdrücke (1.66) im Falle eines isolierten Zweizustandssystems lassen sich einfach ausrechnen (vgl. [13]). Dazu setzt man den Ausdruck (1.63) für den Dichteoperator in die Bewegungsgleichung i $\hbar \dot{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$. Man erhält hierdurch ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem erster Ordnung für die Erwartungswerte $\langle \sigma_j \rangle_t$,

$$\frac{\mathrm{d}\langle \sigma_x \rangle_t}{\mathrm{d}t} = \epsilon \langle \sigma_y \rangle_t,
\frac{\mathrm{d}\langle \sigma_y \rangle_t}{\mathrm{d}t} = -\epsilon \langle \sigma_x \rangle_t + \Delta \langle \sigma_z \rangle_t,
\frac{\mathrm{d}\langle \sigma_z \rangle_t}{\mathrm{d}t} = -\Delta \langle \sigma_y \rangle_t,$$
(1.68)

deren Darstellung mit der in Gleichung (1.67) ausgedrückten Abhängigkeit übereinstimmt. Dieses System hat unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen die Lösungen

$$\langle \sigma_x \rangle_t^{(0)} = \frac{\epsilon \Delta}{\Delta_b^2} [1 - \cos(\Delta_b t)] .$$

$$\langle \sigma_y \rangle_t^{(0)} = \frac{\Delta}{\Delta_b} \sin(\Delta_b t) ,$$

$$\langle \sigma_z \rangle_t^{(0)} = \frac{\epsilon^2}{\Delta_b^2} + \frac{\Delta^2}{\Delta_b^2} \cos(\Delta_b t) .$$

$$(1.69)$$

Der Ausdruck für $\langle \hat{\sigma}_z \rangle_{t}^{(0)}$ wird in der Literatur auch als Rabi–Formel bezeichnet. Er weist Oszillationen der Übergangsfrequenz $\Delta_{\rm b} = \sqrt{\Delta^2 + \epsilon^2}$ auf und verdeutlicht dadurch die Phasenkohärenz der beiden Zustände. Für ein symmetrisches System mit verschwindendem Bias, $\epsilon = 0$, gilt $[\hat{H}, \hat{\sigma}_x] = 0$ und damit auch $\hat{\sigma}_x(t) = \hat{\sigma}_x(0)$. In diesem Fall ist $\hat{\sigma}_x$ eine Konstante der Bewegung. Deshalb verharrt der zugehörige Erwartungswert für alle Zeiten in seinem Startwert, d. h. $\langle \sigma_x \rangle_t^{(0)} |_{\epsilon=0} = 0$.

Die Erwartungswerte $\langle \sigma_j \rangle_t$, (j = x, y, z), des dissipativen Zweizustandssystems lassen sich in geeigneter Weise durch die durch zwei Zeitpunkte bedingte Feynman–Vernon Propagationsfunktion $J(\zeta, t; \zeta_0, t_0)$ ausdrücken, die im Abschnitt 1.1.2.1 in den Gleichungen (1.31) sowie (1.32) eingeführt wurde. Hierin bezeichnet ζ einen der vier möglichen Zustände der reduzierten Dichtematrix (vgl. Abb. 1.3). Die beiden Diagonalzustände



Abbildung 1.3: Graphische Darstellung der vier möglichen Zustände $\xi = \pm 1$ und $\eta = \pm 1$ der reduzierten Dichtematrix.

(LL), (RR) sowie die zwei Kohärenzen bzw. Nichtdiagonalzustände (LR), (RL) der reduzierten Dichtematrix werden abkürzend mit

$$\zeta = \begin{cases} (\eta, 0) = \eta & \text{für (LL), (RR)}, \\ (0, \xi) = \xi & \text{für (LR), (RL)}, \end{cases}$$
(1.70)

notiert. Die Diagonalzustände (RR) und (LL) werden auch als "Sojourn" bezeichnet. Für sie gilt $\eta = \pm 1$ und $\xi = 0$. Die Zustände (RL) und (LR), in denen sich das System außerhalb der Diagonalen aufhält, werden hingegen "Blip" genannt. Befindet sich das System in einem von diesen, nehmen die Relativ- und Schwerpunktskoordinate die Werte $\xi = \pm 1$ bzw. $\eta = 0$ an. In der Folge wird nun angenommen, dass das Zweizustandssystem zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ aus dem Diagonalzustand $\eta_0 = 1$ heraus startet und dass der Anfangszustand des Bades entweder der Präparationsklasse A oder B zuzuordnen ist. Die Entwicklung der reduzierten Dichtematrix unter Einfluss des Gesamthamiltonoperators lässt sich dann in diesem Fall durch den Ausdruck

$$\rho_{\zeta}(t) = J(\zeta, t; \eta_0 = 1, 0) \tag{1.71}$$
beschreiben. In gleicher Weise übersetzt sich dies für die gefundenen Terme der Erwartungswerte

$$\langle \sigma_x \rangle_t = \sum_{\xi=\pm 1} J(\xi, t; \eta_0 = 1, 0), \qquad (1.72)$$

$$\langle \sigma_y \rangle_t = i \sum_{\xi=\pm 1} \xi J(\xi, t; \eta_0 = 1, 0), \qquad (1.73)$$

$$\langle \sigma_z \rangle_t = \sum_{\eta = \pm 1} \eta J(\eta, t; \eta_0 = 1, 0) .$$
 (1.74)

1.2.2.2 Thermischer Anfangszustand

,

Häufig begegnet man in experimentellen Realisierungen des Spin-Boson-Modells anderen Anfangsbedingungen. Bevor eine Messung stattfindet, ist das dem Zweizustandssystem entsprechende experimentelle Teilsystem bereits in den thermischen Gleichgewichtszustand relaxiert, der mit der Umgebung verschränkt ist. Die Präparation des Experiments erfolgt durch Messung einer geeigneten Observablen zum Zeitpunkt t_0 . Die Messung der selben Observablen zu einem späteren Zeitpunkt t lässt direkt Schlüsse auf die Autokorrelationsfunktion der gemessenen Observablen im thermischen Gleichgewicht zu. Für ein Zweizustandssystem haben die Gleichgewichtsautokorrelationen die Gestalt

$$C_{j}(t) \equiv \langle \sigma_{j}(t)\sigma_{j}(0)\rangle_{\beta} - \langle \sigma_{j}\rangle_{\infty}^{2} = \operatorname{tr}\left\{ e^{-\beta\hat{H}}\hat{\sigma}_{j}(t)\hat{\sigma}_{j}(0)\right\} / Z - \langle \sigma_{j}\rangle_{\infty}^{2}, \qquad (1.76)$$

wobei der Index j für eine der drei Raumdimensionen x, y oder z steht und der zeitabhängige Operator $\hat{\sigma}_j(t)$ in Gleichung (1.65) definiert ist. Das Quadrat des Gleichgewichtsmittelwerts $\langle \sigma_j \rangle_{\infty}$ wird abgezogen, um zu gewährleisten, dass der Ausdruck (1.76) im Limes $t \to \infty$ gegen Null konvergiert und damit die Fouriertransfomierte von $C_j(t)$ wohldefiniert ist.

Analog zur Herleitung von Gleichung (1.67) lässt sich auch der Zusammenhang

$$C_y(t-t') = \frac{\partial^2}{\partial t \partial t'} \frac{C_z(t-t')}{\Delta^2}$$
(1.77)

zeigen, der ebenso auf der Kommutatorrelation $[\hat{H}, \hat{\sigma}_z] = i\hbar\hat{\sigma}_y$ basiert. Aus Gleichung (1.67) geht auch hervor, dass $\langle \sigma_y \rangle_{\infty} = 0$ gilt. Die Kenntnis von $C_x(t)$ sowie $C_z(t)$ ist demnach ausreichend. Der Realteil von $C_j(t)$ entspricht der symmetrischen Autokorrelationsfunktion des Spinoperators $\hat{\sigma}_j$ im thermischen Gleichgewicht, während der Imaginärteil von $C_j(t)$ mit der linearen Suszeptibilität $\chi_j(t)$ bzw. der linearen Antwort auf eine an $\hat{\sigma}_j$ koppelnde, externe Kraft übereinstimmt. Es gilt

$$S_{j}(t) \equiv \operatorname{Re}\left[C_{j}(t)\right] = \frac{1}{2} \left\langle \left[\hat{\sigma}_{j}(t), \hat{\sigma}_{j}(0)\right]_{+} \right\rangle_{\beta} - \left\langle \hat{\sigma}_{j} \right\rangle_{\infty}^{2}, \qquad (1.78)$$

$$\chi_j(t) \equiv -\frac{2}{\hbar} \Theta(t) \operatorname{Im} \left[C_j(t) \right] = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \Theta(t) \left\langle \left[\hat{\sigma}_j(t), \hat{\sigma}_j(0) \right] \right\rangle_\beta.$$
(1.79)

Lässt man für den Moment die Mittelung über die Freiheitsgrade des Bades außer acht, erhält man die Darstellungen

$$C_{z}(t) = \left\{ \langle \mathbf{R} | \mathbf{e}^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R} \rangle \langle \mathbf{R} | \hat{\sigma}_{z}(t) | \mathbf{R} \rangle - \langle \mathbf{L} | \mathbf{e}^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{L} \rangle \langle \mathbf{L} | \hat{\sigma}_{z}(t) | \mathbf{L} \rangle + \langle \mathbf{R} | \mathbf{e}^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{L} \rangle \langle \mathbf{L} | \hat{\sigma}_{z}(t) | \mathbf{R} \rangle - \langle \mathbf{L} | \mathbf{e}^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R} \rangle \langle \mathbf{R} | \hat{\sigma}_{z}(t) | \mathbf{L} \rangle \right\} / Z - \langle \hat{\sigma}_{z} \rangle_{\infty}^{2},$$

$$(1.80)$$

und

$$C_{x}(t) = \left\{ \langle \mathbf{R} | \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R} \rangle \langle \mathbf{R} | \hat{\sigma}_{x}(t) | \mathbf{L} \rangle + \langle \mathbf{L} | \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{L} \rangle \langle \mathbf{L} | \hat{\sigma}_{x}(t) | \mathbf{R} \rangle + \langle \mathbf{R} | \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{L} \rangle \langle \mathbf{L} | \hat{\sigma}_{x}(t) | \mathbf{L} \rangle - \langle \mathbf{L} | \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R} \rangle \langle \mathbf{R} | \hat{\sigma}_{x}(t) | \mathbf{R} \rangle \right\} / Z - \langle \hat{\sigma}_{x} \rangle_{\infty}^{2}.$$

$$(1.81)$$

In einem nächsten Schritt muss nun der Tatsache Rechnung getragen werden, dass das Zweizustandssystem zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ der ersten Messung mit der Umgebung verschränkt ist. Es wird angenommen, dass sich das System zu einem früheren Zeitpunkt $t_p < t_0$ aus einem Zustand ξ_p der reduzierten Dichtematrix gemäß dem Gesamthamiltonoperator entwickelt. Zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ wird das System im Zustand ξ_0 gemessen. Eine eventuelle Messung zu einem späteren Zeitpunkt t liefert den Systemzustand ξ . Die Notation für die damit bedingte Propagationsfunktion sei $J(\xi, t; \xi_0, t_0; \xi_p, t_p)$. Die Korrelationen einer dynamischen Variablen zur Zeit t mit sich selbst oder einer weiteren dynamischen Größe zum Zeitpunkt t_0 hängen für ein ergodisches System nicht von einem speziellen Anfangszustand ab, falls der zugehörige Anfangszeitpunkt t_p unendlich weit in der Vergangenheit zurückliegt. Daher kann der Anfangszustand ξ_p in der unendlich weit zurückliegenden Vergangenheit als Produktzustand festgelegt werden, in dem das Bad im thermischen Gleichgewicht und das System in einem Diagonalzustand $\eta_p = +1$ vorliegt. Das Zweizustandssystem ist dann bereits vor der ersten noch zu erfolgenden Messung einer seiner Observablen in ein modifiziertes Gleichgewicht mit seiner Umgebung gelangt, in dem sich System und Bad in einem verschränkten kanonischen Zustand befinden. Mit Hilfe dieser Vorüberlegungen können nun die Autokorrelationsfunktionen dargestellt werden:

$$C_{z}(t) = \lim_{t_{p} \to -\infty} \left[\sum_{\eta=\pm 1} \sum_{\eta_{0}=\pm 1} \eta \eta_{0} J(\eta, t; \eta_{0}, t_{0}; \eta_{p}, t_{p}) - \langle \hat{\sigma}_{z} \rangle_{\infty}^{2} + \sum_{\eta=\pm 1} \sum_{\xi_{0}=\pm 1} \eta \xi_{0} J(\eta, t; \xi_{0}, t_{0}; \eta_{p}, t_{p}) \right],$$
(1.82)

$$S_{z}(t) = \lim_{t_{p} \to -\infty} \sum_{\eta = \pm 1} \sum_{\eta_{0} = \pm 1} \eta \eta_{0} J(\eta, t; \eta_{0}, t_{0}; \eta_{p}, t_{p}) - \langle \sigma_{z} \rangle_{\infty}^{2}, \qquad (1.83)$$

$$\chi_{z}(t) = \lim_{t_{p} \to -\infty} i \frac{2}{\hbar} \Theta(t) \sum_{\eta = \pm 1} \sum_{\xi_{0} = \pm 1} \eta \xi_{0} J(\eta, t; \xi_{0}, t_{0}; \eta_{p}, t_{p}) .$$
(1.84)

Für die Autokorrelationsfunktion der Population, also des Paulioperators $\hat{\sigma}_z(t)$, welcher sich zum Zeitpunkt der zweiten Messung in einem Diagonalzustand der reduzierten Dichtematrix aufhält, gilt, dass dessen Realteil bzw. symmetrischer Anteil sich zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ ebenfalls in einem Diagonalzustand befindet. Hingegen zeigt sich im Ausdruck für den Imaginärteil bzw. antisymmetrischen Anteil, dass sich das System zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ in einem Nichtdiagonalzustand aufhält.

Bei der Autokorrelationsfunktion des Operators $\hat{\sigma}_x(t)$ gilt zu beachten, dass dieser Operator zum Zeitpunkt t_0 das System aus einem Sojourn in einen Blip oder umgekehrt überführt. Dies führt dazu, dass in den nachstehenden Ausdrücken (1.85), (1.86) und (1.87) für C_x , S_x sowie χ_x die Propagationsfunktion an vier Zeitpunkte und deren zugehörige Zustände geknüpft ist. Damit lässt sich auch die zuvor genannte Zustandsänderung zum Zeitpunkt t_0 von einem Sojourn in einen Blip, $J(\ldots;\xi_+,t_{0_+};\eta_-,t_{0_-};\ldots)$ bzw. der umgekehrt verlaufende Übergang, $J(\ldots;\eta_+,t_{0_+};\xi_-,t_{0_-};\ldots)$, von einem Blip in einen Sojourn beschreiben. Die Ausdrücke lauten

$$C_{x}(t) = \lim_{t_{p} \to -\infty} \sum_{\xi=\pm 1} \left[\sum_{\xi_{+},\eta_{-}=\pm 1} J(\xi,t;\xi_{+},t_{0_{+}};\eta_{-},t_{0_{-}};\eta_{p},t_{p}) + \sum_{\eta_{+},\xi_{-}=\pm 1} J(\xi,t;\eta_{+},t_{0_{+}};\xi_{-},t_{0_{-}};\eta_{p},t_{p}) \right] - \langle \hat{\sigma}_{x} \rangle_{\infty}^{2}, \qquad (1.85)$$

$$S_{x}(t) = \lim_{t_{p} \to -\infty} \frac{1}{2} \Big[\sum_{\xi, \xi_{+}, \eta_{-} = \pm 1} J(\xi, t; \xi_{+}, t_{0_{+}}; \eta_{-}, t_{0_{-}}; \eta_{p}, t_{p}) \\ + \sum_{\xi, \eta_{+}, \xi_{-} = \pm 1} J(\xi, t; \eta_{+}, t_{0_{+}}; \xi_{-}, t_{0_{-}}; \eta_{p}, t_{p}) \Big] - \langle \hat{\sigma}_{x} \rangle_{\infty}^{2}, \qquad (1.86)$$

$$\chi_{x}(t) = \lim_{t_{p} \to -\infty} i \frac{\Theta(t)}{\hbar} \Big[\sum_{\xi, \xi_{+}, \eta_{-} = \pm 1} \xi_{+} \eta_{-} J(\xi, t; \xi_{+}, t_{0_{+}}; \eta_{-}, t_{0_{-}}; \eta_{p}, t_{p}) \\ + \sum_{\xi, \eta_{+}, \xi_{-} = \pm 1} \eta_{+} \xi_{-} J(\xi, t; \eta_{+}, t_{0_{+}}; \xi_{-}, t_{0_{-}}; \eta_{p}, t_{p}) .$$
(1.87)

Eine präzise Herleitung dieser Ausdrücke findet sich in den Referenzen [58, 76].

1.2.3 Formal exakte Lösung

Um die Dynamik eines dissipativen Zweizustandssystems zu analysieren, wird nun das Spin-Boson-Modell im Rahmen der Realzeit-Pfadintegralmethodik behandelt. Wie bereits gezeigt wurde, lässt sich die Propagation der reduzierten Dichtematrix formal als doppeltes Pfadintegral

$$\int \mathcal{D}\sigma(\cdot) \int \mathcal{D}\sigma'(\cdot) \mathcal{A}[\sigma(\cdot)] \mathcal{A}^*[\sigma'(\cdot)] \mathcal{F}[\sigma(\cdot), \sigma'(\cdot)]$$
(1.88)

darstellen [vgl. (1.33)]. Hierbei laufen die Integrationen über solche Pfade, die den vorgegebenen Randbedingungen genügen. Die Amplitude $\mathcal{A}[\sigma(\cdot)] = \exp \{iS_{\rm S}[\sigma(\cdot)]/\hbar\}$ beschreibt die Wahrscheinlichkeit des freien Systems, entlang des Pfades $\sigma(t)$ zu propagieren, während das Feynman–Vernon Influenzfunktional den Einfluss des Bades auf das System beinhaltet. Im Falle eines Zweizustandssystems können die Pfade σ und σ' jeweils nur zwischen den diskreten Zuständen ± 1 hin- und herspringen. Für die weiteren Betrachtungen ist es sinnvoll, die normierten Schwerpunkts- und Relativkoordinaten

$$\eta(t) = \frac{\sigma(t) + \sigma'(t)}{2} \quad \text{und} \quad \xi(t) = \frac{\sigma(t) - \sigma'(t)}{2}$$
(1.89)

einzuführen. Die Abbildung 1.4 zeigt, dass die Pfade $\eta(t)$ und $\xi(t)$ stückweise konstant sind und die Relation $\eta(t)\xi(t) = 0$ erfüllen. Assoziiert man — in Anlehnung an ein Doppelmuldenpotential — die Zustände σ , $\sigma' = +1$ mit $|R\rangle$ (lokalisierter Zustand in der rechten Mulde) und σ , $\sigma' = -1$ mit $|L\rangle$ (lokalisierter Zustand in der linken Mulde), so kann der Doppelpfad (σ, σ') eines Zweizustandssystems auch als einfacher Pfad über die vier Zustände (RR), (LL), (RL) und (LR) angesehen werden. Die in Abbildung 1.4 dargestellten Pfade für σ und σ' lassen sich dieser Symbolik folgend in der Schreibweise

$$(\sigma, \sigma'): (RL) \to (LL) \to (LR) \to (RR) \to (RL) \to (LL) \to \dots$$
 (1.90)

zusammenfassen, wobei nur Propagationen entlang der Kanten des in Abbildung 1.3 skizzierten Vierecks möglich sind. Die Gestalt der Funktionen $\eta(t)$ und $\xi(t)$ erlaubt, diese als einfache Summe darzustellen, deren Summenglieder sich aus den gewichteten



Abbildung 1.4: Graphische Darstellung der Propagation der Pfade $\xi(t)$ und $\eta(t)$ bei gegebenem Verlauf von $\sigma(t)$ und $\sigma'(t)$.

Differenztermen von Sprungfunktionen zusammensetzen. Ein allgemeiner Pfad, der zwei Sojourns verbindet und dazwischen 2n Sprünge zu den Zeiten $t_j, j \in \{1, \ldots, 2n\}$, vollbringt, kann in der Form

$$\eta^{(n)}(t') = \sum_{j=0}^{n} \eta_j \left[\Theta\left(t' - t_{2j}\right) - \Theta\left(t' - t_{2j+1}\right)\right], \qquad (1.91)$$

$$\xi^{(n)}(t') = \sum_{j=1}^{n} \xi_j \left[\Theta\left(t' - t_{2j-1}\right) - \Theta\left(t' - t_{2j}\right)\right], \qquad (1.92)$$

parametrisiert werden. Die Präparation des Systems findet zum Zeitpunkt t_0 statt, und es gilt $t_{2n+1} = t$. Die Dauer des Sojourns j beträgt $\tau_j = t_{2j} - t_{2j-1}$, die Zeitspanne des vorangehenden Blips j währt $s_j = t_{2j+1} - t_{2j}$.

Verwendet man nun im Ausdruck für die Influenzphase (1.40) die Definitionen (1.89)und führt zweimal eine partielle Integration durch, führt dies auf die Darstellung

$$\mathcal{F}_{\rm FV} = \exp\left\{\int_{t_0}^t \mathrm{d}t' \int_{t_0}^{t'} \mathrm{d}t'' \left[\dot{\xi}(t')Q'(t'-t'')\dot{\xi}(t'') + \mathrm{i}\,\dot{\xi}(t')Q''(t'-t'')\dot{\eta}(t'')\right]\right\}.$$
 (1.93)

In diesem Ausdruck wurden mögliche Randterme vernachlässigt, da sie nur konstante Beiträge liefern. Die Badkorrelationsfunktion Q(t) = Q'(t) + iQ''(t) ist über die Differentialrelation

$$\ddot{Q}(t) = \frac{q_0^2}{\hbar} L(t) \tag{1.94}$$

mit dem Integrationskern L(t) aus Gleichung (1.41) verknüpft. Eine wichtige Darstellung von Q(t) findet sich im sog. Skalenlimes (engl. *scaling limit*). In diesem Grenzfall gilt [86]

$$Q(t) = 2\alpha \ln\left[\frac{\hbar\beta\omega_{\rm c}}{\pi}\sinh\left(\frac{\pi|t|}{\hbar\beta}\right)\right] + i\alpha\pi\mathrm{sgn}(t), \qquad (1.95)$$

unter der Bedingung, dass die spektrale Dichte $J(\omega)$ ohmsch und $\hbar\omega_c$ die größte Energie des offenen Systems ist. Dynamische Wechselwirkungseffekte bleiben dabei für Zeiten $\tau \leq 1/\omega_c$ unberücksichtigt. Setzt man nun die parametrisierten Pfade aus den Gleichungen (1.91) und (1.92) in die Darstellung (1.93) ein, erhält man

$$\mathcal{F}_{FV}^{(n)} = G_n H_n,$$

$$G_n \equiv \exp\left[-\sum_{j=1}^n Q'_{2j,2j-1}\right] \exp\left[-\sum_{j=2}^n \sum_{k=1}^{j-1} \xi_j \xi_k \Lambda_{j,k}\right],$$

$$H_n \equiv \exp\left[i\sum_{j=1}^n \sum_{k=0}^{j-1} \xi_j X_{j,k} \eta_k\right] = \exp\left[i\sum_{k=0}^{n-1} \sum_{j=k+1}^n \xi_j X_{j,k} \eta_k\right].$$
(1.96)

In diesen Gleichungen stehen unter Verwendung der Kurzschreibweise $Q_{j,k} \equiv Q(t_j - t_k)$ die definierten Ausdrücke für die Korrelationen $\Lambda_{j,k}$ zwischen dem Blip–Paar $\{j, k\}$ sowie die Blip–Sojourn–Korrelationen $X_{j,k}$ zwischen dem Sojourn k und einem späteren Blip j

$$\Lambda_{j,k} \equiv Q'_{2j,2k-1} + Q'_{2j-1,2k} - Q'_{2j,2k} - Q'_{2j-1,2k-1}, \qquad (1.97)$$

$$X_{j,k} \equiv Q_{2j,2k+1}'' + Q_{2j-1,2k}'' - Q_{2j,2k}'' - Q_{2j-1,2k+1}''$$
 (1.98)

Die Ausdrücke (1.96) lassen eine Interpretation in einem Ladungsbild zu. Der Doppelpfad bestehend aus den Einzelpfaden (1.91) und (1.92) lässt sich auch als eine Abfolge von Blip- und Sojourn-Dipolen verstehen, die mit ξ_j bzw. η_j bezeichnet seien. Dies ist möglich, da sich das System nach genau zwei Übergängen wieder in einem Blip oder Sojourn befindet. Dem Blip-Dipol ξ_j ist die Zeitspanne $t_{2j} - t_{2j-1}$ zuzuschreiben, während der Sojourn-Dipol η_j für die Dauer $t_{2j+1} - t_{2j}$ besteht. Die Werte $\eta_j = +1$ und $\xi_j = +1$ entsprechen dann Dipolen der Ladungsverteilung (+, -), hingegen stellen die Werte $\eta_j = -1$ und $\xi_j = -1$ Dipole der Ladungsverteilung (-, +) dar. Die Terme $Q'(\tau)$ und $Q''(\tau)$ beschreiben nun im Sinne des Ladungsbildes die Wechselwirkung zwischen zwei Blip-Ladungen bzw. zwischen Blip- und Sojourn-Ladung im Abstand τ für jedes Paar gleichen Vorzeichens. Somit beschreiben die Funktionen $\Lambda_{j,k}$ und $X_{j,k}$ Inter-Dipol-Wechselwirkungen zwischen zwei Blip-Dipolen gleichen Typs bzw. zwischen einem Sojourn-Dipol und einem nachfolgenden Blip-Dipol ebenfalls gleichen Typs. Die reellwertige Funktion G_n umfasst die Blip-Wechselwirkungen. Im Argument der

Die reeliwertige Funktion G_n umfasst die Blip-Wechselwirkungen. Im Argument der vorderen Exponentialfunktion stehen die Intrablip- bzw. Intradipol-Wechselwirkungen, während der zweite Exponentialfaktor die Interblip-Wechselwirkungen, also die Korrelationen zwischen den Blips, widerspiegelt. Der Phasenfaktor H_n beinhaltet die Wechselwirkungen zwischen Sojourns und allen nachfolgenden Blip-Zuständen. Man erkennt, dass die Funktion G_n als Filter wirkt, der langdauernde Blipzustände des Systems unterdrückt. Somit hält sich das System bevorzugt in einem Sojourn-Zustand auf. Physikalisch betrachtet misst das Bad kontinuierlich den Zustand des Pointeroperators $\hat{\sigma}_z$ und unterdrückt dadurch die Besetzungen von Nichtdiagonalzuständen. Gleichzeitig führt dies dazu, dass die ursprünglich feste Phasenbeziehung der Eigenzustände von $\hat{\sigma}_z$ verloren geht und damit jedwede Quanteninterferenz.

Das Amplitudenprodukt $\mathcal{A}[\sigma]\mathcal{A}^*[\sigma']$ des Zweizustandssystems oder auch des Spin-Hamiltonoperators (1.55) zerfällt in verschiedene Gewichtungsfaktoren. Der Beitrag pro Zeiteinheit von einem Diagonal-, η , in einen Nichtdiagonalzustand, ξ , bzw. umgekehrt zu wechseln, beträgt

$$-i \xi \eta \frac{\Delta}{2}. \tag{1.99}$$

Es ergeben sich damit also für Übergänge der Art (RL) \Leftrightarrow (RR) sowie (LL) \Leftrightarrow (LR) ein Gewichtungsfaktor $-i\Delta/2$ und für die Übergänge (RL) \Leftrightarrow (LL) sowie (RR) \Leftrightarrow (LR) ein Faktor $i\Delta/2$. Der Beitrag zur Amplitude für den Aufenthalt in einem Sojourn beträgt den Wert Eins, während dem Verweilen im *j*-ten Blip ξ_j für die Dauer τ_j durch den Faktor $\exp(i\epsilon\xi_j\tau_j)$ Rechnung getragen wird. Der Blip–Faktor für *n* Blipzustände wird gesamtheitlich im sog. Biasfaktor

$$B_n = \exp\left\{i\epsilon \sum_{j=1}^n \xi_j \tau_j\right\}$$
(1.100)

zusammengefasst [41–43, 57, 60, 61, 79, 86].

Die Vorschrift, über alle möglichen Pfade entlang der Kanten des skizzierten Quadrats in Abbildung 1.4 zu summieren, bedeutet nun dreierlei:

1. die Summation über alle möglichen intermediären Sojourn- und Blip–Zustände, die die Pfade bei gegebener Anzahl an Übergängen einnehmen können,

- 2. die Integration über die chronologisch geordneten Sprungzeiten dieser Pfade sowie
- 3. die Summation über die Anzahl aller möglichen Übergänge, die das System vollführen kann.

Symbolisch entspricht dies

$$\sum_{\text{alle Pfade}} \dots \rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\eta_j = \pm 1} \sum_{\xi_j = \pm 1} \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t_n \int_{t_i}^{t_n} \mathrm{d}t_{n-1} \dots \int_{t_i}^{t_2} \mathrm{d}t_1 \dots$$
(1.101)

Hierbei bezeichnet t_i den Anfangs- und t_f den Endzeitpunkt. Wie bereits zuvor in Abschnitt 1.2.2 diskutiert, ist es für korrelierte Anfangszustände des System-Bad Komplexes zum Zeitpunkt t_0 erforderlich, die Entwicklung des Gesamtsystems bereits ab einem fiktiven früheren Zeitpunkt t_p zu verfolgen, zu welchem dieses Gesamtsystem in einem faktorisierenden Anfangszustand präpariert ist, und ggf. diesen Zeitpunkt t_p unendlich weit in die Vergangenheit zu verschieben. Um dem gerecht zu werden, werden die Integrationen über die zeitgeordneten Sprungzeiten $\{t_j\}$ in einen negativen und einen positiven Zeitast unterteilt,

$$\int_{t_{\rm p}}^{t} \mathcal{D}_{k,l}\{t_j\} \times \ldots \equiv \int_{0}^{t} \mathrm{d}t_{l+k} \dots \int_{0}^{t_{l+2}} \mathrm{d}t_{l+1} \int_{t_{\rm p}}^{0} \mathrm{d}t_l \dots \int_{t_{\rm p}}^{t_2} \mathrm{d}t_1 \,\Delta^{k+l} \times \dots \quad (1.102)$$

Hierbei bezeichnet l die Anzahl der Sprünge im negativen Zeitast $t_p < t' < 0$ und k diejenige im positiven Zeitast 0 < t' < t. Zur abkürzenden Schreibweise wurde noch der Faktor, bestehend aus dem potenzierten Tunnelmatrixelement Δ , in der Definition (1.102) berücksichtigt.

1.2.3.1 Bedingte Propagationsfunktionen

Die relevanten Erwartungswerte und Autokorrelationsfunktionen im Gleichgewicht lassen sich, wie zuvor in Abschnitt 1.2.2 behandelt, durch bedingte Zwei-, Drei- sowie Vierzeiten–Propagationsfunktionen ausdrücken.

Falls die Erwartungswerte $\langle \hat{\sigma}_j \rangle_t$, $j \in \{x, y, z\}$, von einem faktorisierenden Anfangszustand zum Zeitpunkt t_0 abhängen, können sie durch die bedingte Zweizeiten–Propagationsfunktion $J(\xi, t; \eta_0, t_0)$ ausgedrückt werden. Hier sei der Anfangszustand des Systems ein Sojournzustand η_0 , und die Präparation des Reservoirs sei entweder gemäß der schon beschriebenen Klasse A oder B erfolgt. Liegt im Endzustand wieder ein Sojourn vor, hat das System insgesamt eine gerade Anzahl an Übergängen vollführt. Es befindet sich hingegen in einem Blipzustand nach einer ungeraden Übergangsanzahl.

Mit den Vorarbeiten zu den verschiedenen Gewichtungsfaktoren im vorherigen Abschnitt erhält man nun für die Zweizeiten–Propagationsfunktion im Falle eines Sojourn als Endzustand die Reihendarstellung

$$J(\eta, t; \eta_0, 0) = \delta_{\eta, \eta_0} + \eta \eta_0 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{2^{2m}} \int_0^t \mathcal{D}_{2m,0}\{t_j\} \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}} G_m B_m \sum_{\{\eta_j = \pm 1\}'} H_m,$$
(1.103)

während im Falle eines Blips als Endzustand die Reihe folgende Gestalt aufweist

$$J(\xi, t; \eta_0, 0) = -i\xi\eta_0 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1}}{2^{2m-1}} \int_0^t \mathcal{D}_{2m-1,0}\{t_j\} \sum_{\{\xi_j=\pm 1\}'} G_m B_m \sum_{\{\eta_j=\pm 1\}'} H_m.$$
(1.104)

Hierbei kennzeichnet der Apostroph bei den Summationen über die Übergangszustände $\{\xi_j = \pm 1\}'$ und $\{\eta_j = \pm 1\}'$, dass der anfängliche Sojourn- und der abschließende Sojourn- bzw. Blipzustand fixiert sind, wie bereits durch die Angabe als Argument in der propagierenden Funktion angedeutet wird.

Analog lässt sich die bedingte Dreizeiten–Propagationsfunktion aufstellen, die sowohl zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ als auch t den Aufenthalt des Systems in einem Sojournzustand vorgibt,

$$J(\eta, t; \eta_{0}, 0; \eta_{p}, t_{p}) = \delta_{\eta, \eta_{0}} \delta_{\eta_{0}, \eta_{p}} + \delta_{\eta, \eta_{0}} \eta_{0} \eta_{p} \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{4} \right)^{n} \int_{t_{p}}^{t} \mathcal{D}_{0, 2n} \{t_{j}\} \sum_{\{\xi_{j}=\pm 1\}} G_{n} B_{n} \sum_{\{\eta_{j}=\pm 1\}'} H_{n} + \delta_{\eta, \eta_{p}} \eta \eta_{0} \sum_{m=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{4} \right)^{m} \int_{t_{p}}^{t} \mathcal{D}_{2m, 0} \{t_{j}\} \sum_{\{\xi_{j}=\pm 1\}} G_{m} B_{m} \sum_{\{\eta_{j}=\pm 1\}'} H_{m} + \eta \eta_{p} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{4} \right)^{m+n} \int_{t_{p}}^{t} \mathcal{D}_{2m, 2n} \{t_{j}\} \sum_{\{\xi_{j}=\pm 1\}} G_{m+n} B_{m+n} \sum_{\{\eta_{j}=\pm 1\}'} H_{m+n} .$$
(1.105)

Die Summationen über die intermediären Blip- und Sojournzustände erfolgt über alle möglichen Werte ± 1 . Dabei ereignen sich 2n Übergänge im Zeitintervall $t_p < t' < 0$ und 2m Übergänge im Intervall des positiven Zeitastes 0 < t' < t. Auch hier deutet der Apostroph beim Summationsindex $\{\eta_j\}'$ wieder auf die vorgegebenen, durch die Angabe im Argument der Propagationsfunktion gekennzeichneten, Sojournzustände zu den Zeitpunkten t_p , 0 und t hin. Entsprechend ergibt sich der Ausdruck, falls das System zum Zeitpunkt 0 einen Blipzustand einnimmt

$$J(\eta, t; \xi_0, 0; \eta_{\rm p}, t_{\rm p}) = \eta \eta_{\rm p} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{4} \right)^{n+m-1} \int_{t_p}^{t} \mathcal{D}_{2m-1,2n-1}\{t_j\} \times \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}'} G_{m+n-1} B_{m+n-1} \sum_{\{\eta_j = \pm 1\}'} H_{m+n-1}, \qquad (1.106)$$

wobei die Summen über die Abfolge von Blip- und Sojournzuständen in Übereinstimmung mit denen im Argument der Propagationsfunktion stehenden Vorgaben zu verstehen sind.

1.2.3.2 Die Erwartungswerte $\langle \sigma_j \rangle_t$ $j \in \{x, y, z\}$

Fügt man die Reihendarstellung (1.103) für die bedingte Zweizeiten-Propagationsfunktion in Gleichung (1.74) ein und führt die Summation über die intermediären Sojournzustände, $\{\eta_j=\pm1\}',$ aus, erhält man die exakte Reihendarstellung für die Population

$$\langle \sigma_z \rangle_t = 1 + \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \int_0^t \mathcal{D}_{2m,0}\{t_j\} \frac{1}{2^m} \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}} \left(F_m^{(+)} B_m^{(s)} - F_m^{(-)} B_m^{(a)} \right) .$$
 (1.107)

Hierbei wurde der vom Bias abhängige Beitrag in einer den symmetrischen und einer den antisymmetrischen Anteil beschreibenden Funktion zusammengefasst,

$$B_m^{(s)} = \cos\left(\epsilon \sum_{j=1}^m \xi_j \tau_j\right), \qquad B_m^{(a)} = \sin\left(\epsilon \sum_{j=1}^m \xi_j \tau_j\right).$$
(1.108)

Der Einfluss der Umgebung findet sich in den Influenzfunktionen

$$F_m^{(+)} = G_m \prod_{k=0}^{m-1} \cos(\phi_{k,m}) \quad \text{und} \quad F_m^{(-)} = G_m \sin(\phi_{0,m}) \prod_{k=1}^{m-1} \cos(\phi_{k,m}) \tag{1.109}$$

wieder. Hierin beschreibt G_m sowohl die Intra- als auch die Inter-Blip Korrelationen. Die weiteren Faktoren umfassen die Korrelationen der Phase. Die Badkorrelationen zwischen dem k-ten Sojourn und den m - k nachfolgenden Blips werden in der Phase

$$\phi_{k,m} = \sum_{j=k+1}^{m} \xi_j X_{j,k} \tag{1.110}$$

kombiniert. Die gewichteten Blipmarken $\{\xi_j\}$ werden hierbei über alle Zustände der Zwischenübergänge, $\{\xi_j = \pm 1\}$, summiert.

Die nachstehende Definition erweist sich in der Folge als hilfreich:

$$\langle \sigma_z \rangle_t \equiv P(t) = P_{\rm R}(t) - P_{\rm L}(t) = 2P_{\rm R}(t) - 1.$$
 (1.111)

Hierbei steht $P_{\rm R/L}(t)$ für die Besetzungswahrscheinlichkeit der rechten bzw. linken Mulde im Doppelmulden-Bild. Gemäß der Startbedingung des betrachteten Systems gilt P(0) = 1, d.h. das System ist zum Zeitpunkt t = 0 nur in der rechten Mulde besetzt. Die Funktion P(t) kann nun in Anteile aufgespalten werden, die symmetrisch [Abk. (s)] bzw. antisymmetrisch [Abk. (a)] unter Spiegelung der Verkippung ($\epsilon \rightarrow -\epsilon$) sind,

$$P(t) = P_{\rm s}(t) + P_{\rm a}(t). \qquad (1.112)$$

Wenn die Dämpfung des Systems über alle Zeiten $(t \to \infty)$ bestehen bleibt, handelt es sich um ein ergodisches System, welches in den thermischen Gleichgewichtszustand relaxiert. In diesem Fall tendiert für $t \to \infty$ der bzgl. der Verkippung ϵ gerade Anteil $P_{\rm s}(t)$ gegen Null, während der bzgl. der Verkippung ungerade Anteil $P_{\rm a}(t)$ sich dem Gleichgewichtswert annähert, i.e. $P(t \to \infty) \equiv P_{\infty} = \langle \sigma_z \rangle_{\infty} = \langle \sigma_z \rangle^{(\rm eq)}$ mit

$$\langle \sigma_z \rangle_{\infty} = P_{\infty} = \lim_{t \to \infty} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \int_0^t \mathcal{D}_{2m,0}\{t_j\} \frac{1}{2^m} \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}} F_m^{(-)} B_m^{(a)}.$$
 (1.113)

Damit wird die Berechnung der Gleichgewichtsverteilung auf die Erwartungswerte dynamischer Größen im Langzeitlimes zurückgeführt. Andererseits kann die Gleichgewichtsverteilung P_{∞} auch auf Grundlage rein thermodynamischer Größen aufgestellt werden. Hier sind diese Größen die Zustandssummen $Z_{\rm R}$ sowie $Z_{\rm L}$ des rechten bzw. linken Zustands. Dies führt auf den Ausdruck

$$\langle \sigma_z \rangle_{\infty} = \langle \sigma_z \rangle^{(eq)} = \frac{Z_{\rm R} - Z_{\rm L}}{Z_{\rm R} + Z_{\rm L}}.$$
 (1.114)

Falls es sich um ein ergodisches System handelt, stimmen die beiden Ausdrücke (1.113) und (1.114) überein.

In gleicher Weise wie für die Population (1.107) können die Reihendarstellungen für die Kohärenzen $\langle \sigma_x \rangle_t$ und für $\langle \sigma_y \rangle_t$ unter Zuhilfenahme des Ausdrucks (1.104) und der Relationen (1.72) sowie (1.73) abgeleitet werden:

$$\langle \sigma_x \rangle_t = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \int_0^t \mathcal{D}_{2m-1,0}\{t_j\} \frac{1}{2^m} \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}} \xi_m \left(F_m^{(+)} B_m^{(a)} + F_m^{(-)} B_m^{(s)} \right) , \quad (1.115)$$

$$\left\langle \sigma_y \right\rangle_t = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \int_0^t \mathcal{D}_{2m-1,0}\{t_j\} \frac{1}{2^m} \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}} \left(F_m^{(+)} B_m^{(s)} - F_m^{(-)} B_m^{(a)} \right) .$$
(1.116)

Die Darstellungen (1.107), (1.115) und (1.116) sind die exakten formalen Ausdrücke für die Zeitentwicklung der reduzierten Dichtematrix via der Gleichung (1.63). Auch hier ist die Relation (1.67) der Ausdrücke (1.107) und (1.116) erfüllt.

Die Unterschiede zwischen den Präparationsklassen A und B in den Ausdrücken (1.107), (1.115) und (1.116) liegen in den Korrelationen der Blipzustände mit dem anfänglichen Sojourn, wie anhand von Gleichung (1.62) zusammen mit (1.89) ersichtlich wird. Diese Korrelationen werden durch die Funktionen $X_{j,0}$ [siehe Gl. (1.98)] beschrieben. Im Fall der Präparationsklasse A beginnt der Anfangssojourn zum Zeitpunkt $t_0 = 0$. Daher ergibt sich $X_{j,0}^{(A)} = Q_{2j,1}'' + Q_{2j-1,0}'' - Q_{2j,0}'' - Q_{2j-1,1}''$. Falls das System gemäß Klasse B präpariert wurde, dauert der erste Sojourn in der Systemdynamik unendlich lange. Für den Ausdruck $X_{j,0}$ bedeutet dieser Grenzfall, dass sich der zweite und dritte Term gegenseitig aufheben. Es gilt somit $X_{j,0}^{(B)} = Q_{2j,1}'' - Q_{2j-1,1}''$. Lässt sich das Bad durch eine ohmsche spektrale Dichte beschreiben und betrachtet

Lässt sich das Bad durch eine ohmsche spektrale Dichte beschreiben und betrachtet man gleichzeitig den Skalen–Limes, stimmen die Präparationsklassen A und B überein und damit auch $X_{j,0}^{(A)} = X_{j,0}^{(B)}$. Setzt man den Ausdruck $Q''(t) = \pi K \operatorname{sgn}(t)$ in Gleichung (1.109) ein, vereinfachen sich die Influenzfunktionen zu

$$F_m^{(+)} = \left[\cos(\pi K)\right]^m G_m \quad \text{und} \quad F_m^{(-)} = \xi_1 \sin(\pi K) \left[\cos(\pi K)\right]^{m-1} G_m \,. \tag{1.117}$$

1.2.3.3 Korrelation und Antwortfunktion der Besetzungen

Setzt man die Reihendarstellung (1.105) in Gleichung (1.83) und summiert erneut über die Zwischen-Sojournzustände, erhält man die symmetrische Korrelationsfunktion

$$S_z(t) = S_z^{(\text{unc})}(t) + R(t), \qquad (1.118)$$

$$S_z^{(\text{unc})}(t) = P_s(t) + P_\infty \left(P_a(t) - P_\infty \right) .$$
 (1.119)

In diesem Ausdruck steht $S_z^{(\text{unc})}(t)$ für den unkorrelierten Anteil von $S_z(t)$, in welchem die Verschränkung des Systems mit dem Bad zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ ausgenommen ist. Formal entspricht dies der Nichtberücksichtigung aller Badkorrelationen $Q(\tau)$ zwischen negativem und positivem Zeitast des kompletten Pfades des Zweizustandssystems. Für einen Anfangszustand des System-Bad-Ensembles zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ in Produktform würde bereits allein Gleichung (1.119) die symmetrische Autokorrelationsfunktion für $\hat{\sigma}_z$ darstellen. Der zusätzliche Term R(t) in Gleichung (1.118) berücksichtigt alle dynamischen Effekte, die von der System-Bad-Korrelation im Anfangszustand zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ herrühren. Man erhält für diesen

$$R(t) = \lim_{t_{p} \to -\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{m+n-1} \int_{t_{p}}^{t} \mathcal{D}_{2m,2n} \{t_{j}\} \\ \times \frac{1}{2^{m+n}} \sum_{\{\xi_{j}=\pm 1\}} \left[F_{m,n} B_{m}^{(s)} B_{n}^{(s)} - \left(F_{m,n} - F_{m}^{(-)} F_{n}^{(-)}\right) B_{m}^{(a)} B_{n}^{(a)} \right],$$
(1.120)

 mit

$$F_{m,n} \equiv G_{m+n} \sin(\phi_{n,m+n}) \sin(\phi_{0,m+n}) \prod_{\substack{k=1\\k \neq n}}^{m+n-1} \cos(\phi_{k,m+n}) .$$
(1.121)

Erwartungsgemäß sollte der Korrelationsanteil R(t) erst bei tiefen Temperaturen und für lange Zeiten entscheidende Beiträge liefern. Im Skalen–Limes vereinfacht sich (1.121) zu

$$F_{m,n} = \xi_1 \xi_{n+1} \left[\sin(\pi K) \right]^2 \left[\cos(\pi K) \right]^{m+n-2} G_{m+n} \,. \tag{1.122}$$

In gleicher Weise findet man die Antwortfunktion (1.84) mit Hilfe der Dreizeiten-Propagationsfunktion (1.106)

$$\chi_{z}(t) = \lim_{t_{p} \to -\infty} \frac{4}{\hbar} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n}}{2^{m+n}} \int_{t_{p}}^{t} \mathcal{D}_{2m-1,2n-1}\{t_{j}\} \sum_{\{\xi_{j}=\pm1\}} \xi_{n} F_{m+n-1}^{(-)} B_{m+n-1}^{(s)},$$
(1.123)

wobei t > 0 gilt und die Funktion $F_m^{(-)}$ in Gleichung (1.109) definiert ist. Hierin wird berücksichtigt, dass sich das Zweizustandssystem zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ in einem Blip befindet.

Die statische nichtlineare Suszeptibilität ist definiert über das Integral

$$\bar{\chi}_z \equiv \tilde{\chi}_z(\omega=0) = \int_0^\infty \mathrm{d}t \,\chi_z(t) \,. \tag{1.124}$$

Nun lässt sich in Gleichung (1.124) die Funktion $\chi_z(t)$ durch die rechte Seite des Ausdrucks (1.123) ersetzen. Beachtet man darüberhinaus, dass das letzte Intervall zu negativen Zeiten, ($\tau_n^- = -t_{2n-1}$), und das erste Intervall zu positiven Zeiten, ($\tau_n^+ = t_{2n}$), von der Form

$$\int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}\tau_{n}^{-} \,\mathrm{d}\tau_{n}^{+} f(\tau_{n}^{-} + \tau_{n}^{+}) = \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}\tau_{n} \,\tau_{n} f(\tau_{n})$$
(1.125)

ist, wobei $\tau_n = \tau_n^- + \tau_n^+$ die volle Bliplänge bezeichnet, führt dies nach Umsortieren der Doppelsumme auf die Reihendarstellung

$$\bar{\chi}_z = \lim_{t \to \infty} \frac{2}{\hbar} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \int_0^t \mathcal{D}_{2m,0}\{t_j\} \frac{1}{2^m} \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}} F_m^{(-)} B_m^{(s)} \left(\sum_{n=1}^m \xi_n \tau_n\right) .$$
(1.126)

Die statische Suszeptibilität wird demnach durch das asymptotische Langzeitverhalten einer dynamischen Größe ausgedrückt. Vergleicht man nun die Reihen (1.126) und (1.113) miteinander, lässt sich die Verknüpfung

$$\bar{\chi}_z = \frac{2}{\hbar} \frac{\partial \langle \hat{\sigma}_z \rangle_{\infty}}{\partial \epsilon} \tag{1.127}$$

ableiten, welche auch durch einen rein thermodynamischen Ansatz gefunden werden kann.

1.2.3.4 Korrelation und Antwortfunktion der Kohärenzen

In der Folge werden der Einfachheit halber ein ohmsches Bad und der Skalen-Limes angenommen. Die Behandlung der Korrelationsfunktionen der Kohärenzen gestaltet sich schwieriger als die der Besetzungen im vorangehenden Abschnitt. Dies liegt zum einen daran, dass das System zum Zeitpunkt t = 0 einen zusätzlichen Übergang durchführt. Dieser Übergang beinhaltet jedoch keine zusätzliche Dynamik, sondern ist nur der Wirkung des Operators $\hat{\sigma}_x$ geschuldet. Zum anderen endet die betrachtete Systemdynamik in einem Nebendiagonalzustand zur Zeit t. Dieser Zustand führt zu einem Randterm im Influenzfunktional, welcher sich in einem zusätzlichen Sprung zum Zeitpunkt t zurück in einen Diagonalzustand bemerkbar macht. Diese beiden Besonderheiten führen zu einem Faktor $(\Delta_r/\Delta)^2 = (\Delta_r/\omega_c)^2$ in der Reihendarstellung für die Korrelationsfunktion $C_x(t)$. Sie besitzt daher keinen universellen Charakter und verschwindet im Skalen-Limes [47]. Ein universeller Ausdruck kann jedoch wieder gewonnen werden, indem die adiabatische Dynamik der Badmoden beim Tunneln des Systems von einem lokalisierten Zustand in den anderen mit in die Berechnung einbezogen wird. Die so gewonnene Korrelationsfunktion $C_x^{(pd)}(t)$,

$$C_x^{(\text{pd})} \equiv \operatorname{tr}\left\{ \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} \,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar} \hat{\tilde{\sigma}}_x \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar} \hat{\tilde{\sigma}}_x \right\} / Z - \left[\operatorname{tr}\left\{ \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} \hat{\tilde{\sigma}}_x \right\} \right]^2 \,, \qquad (1.128)$$

unterscheidet sich von Gleichung (1.76) durch Verwendung des sog. Polaron-bekleideten (engl. polaron-dressed) Tunneloperators $\hat{\sigma}_x \equiv |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{L}| e^{-i\omega} + \mathbf{h}$.c. respektive seiner Entsprechung im Heisenberg-Bild, $\hat{\sigma}_x(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\sigma}_x(0)e^{-i\hat{H}t/\hbar}$. Dadurch, dass der bekleidete Operator $\hat{\sigma}_x$ im Hilbertraum des gesamten Systems — also Bad und Zweizustandssystem — wirkt und der korrelierte Anfangszustand eine bestimmte Präparation des Bades voraussetzt, führt dies bei der Elimination der Badfreiheitsgrade zu einem gegenüber der bisherigen Größen modifizierten Vorgehen. Die technischen Details dieser Berechnungen können in [59] gefunden werden. Das darin aufgestellte modifizierte Influenzfunktional kann wieder auf die ursprüngliche Form gebracht werden, indem die Systempfade entsprechend abgewandelt werden. Die Ergebnisse zeigen, dass einerseits die Terme in den Gleichungen (1.86) sowie (1.87) mit $\xi = -\xi_+ = \eta_-$ für die Gruppe A bzw. mit $\xi = -\eta_+ = \xi_-$ für die Gruppe B im Skalen-Limes verschwinden. Andererseits ergibt sich, dass in den verbleibenden Termen mit $\xi = \xi_+$ für Gruppe A bzw. $\xi = \eta_+$ für Gruppe B die Systemsprünge zu den Zeitpunkten 0 und t keine Badkorrelationen im Influenzfunktional bewirken. Im gleichwertigen Ladungsbild werden die entsprechenden Ladungen durch die Polarontransformation beseitigt, was in seiner Bedeutung der Universalität dieser Ausdrücke gleichkommt.

Wegen des zusätzlichen Übergangs, welcher das System vollzieht und der ohne den Faktor Δ auskommt, ist es sinnvoll, ein im Vergleich zu (1.102) modifiziertes Integrationssymbol einzuführen:

$$\int_{t_{p}}^{t} \tilde{\mathcal{D}}_{k,l}\{t_{j}\} \times \dots = \int_{0}^{t} dt_{l+k+1} \dots \int_{0}^{t_{l+3}} dt_{l+2} \int_{t_{p}}^{0} dt_{l} \dots \int_{t_{p}}^{t_{2}} dt_{1} \Delta^{k+l} \times \dots \quad (1.129)$$

Der zusätzliche Schritt findet zum Zeitpunkt $t_{l+1} = 0$ statt. Die Systemdynamik endet für beide Übergangsgruppen in einem Blipzustand. Die symmetrische Korrelationsfunktion $S_x(t) = \operatorname{Re}[C_x^{\operatorname{pd}}]$ lässt sich aufteilen in $S_x(t) = S_x^{\operatorname{A}}(t) + S_x^{\operatorname{B}}(t)$, wobei

$$S_x^{\mathcal{A}}(t) = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \left(-\frac{\cos(\pi K)}{2} \right)^{m-1} \int_{-\infty}^t \tilde{\mathcal{D}}_{2m-2,0}\{t_j\} \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}_{\mathcal{A}}} G_m^{\mathcal{A}} G_m^{(s)}$$
(1.130)

und

$$S_{x}^{A}(t) = -\sum_{m=2}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\cos(\pi K)}{2} \right)^{n+m-1} \sin^{2}(\pi K) \int_{-\infty}^{t} \tilde{\mathcal{D}}_{2m-1,2n-1}\{t_{j}\} \times \sum_{\substack{\{\xi_{j}=\pm 1\}\\\xi_{n}=\xi_{n+1}=-\xi_{m+n}}} \xi_{m+n} \xi_{1} G_{m+n}^{B} B_{m+n}^{(s)}$$
(1.131)

ist. Analog zerfällt die Antwortfunktion $\chi_x(t) = -(2/\hbar)\Theta(t) \operatorname{Im}\{C_x^{(\mathrm{pd})}(t)\}$ in die Beiträge

$$\chi_{x}^{A}(t) = \hbar^{-1} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\cos(\pi K)}{2} \right)^{m+n-1} \tan(\pi K) \int_{-\infty}^{t} \tilde{\mathcal{D}}_{2m-2,2n} \{t_{j}\} \times \sum_{\{\xi_{j}=\pm 1\}_{A}} \xi_{m+n} \xi_{1} G_{m+n}^{A} B_{m+n}^{(s)}, \qquad (1.132)$$

$$\chi_x^{\rm B}(t) = \hbar^{-1} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\cos(\pi K)}{2} \right)^{m+n-1} \tan(\pi K) \int_{-\infty}^t \tilde{\mathcal{D}}_{2m-1,2n-1} \{t_j\} \\ \times \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}_{\rm B}} \left[\sin^2(\pi K) \xi_{n+1} + \cos^2(\pi K) \xi_{n+m} \right] \xi_1 G_{m+n}^{\rm B} B_{m+n}^{(\rm s)} .$$
(1.133)

Hierin ist die Summation über die Sojournzustände bereits durchgeführt. Die Indizes $\{\ldots\}_A$ und $\{\ldots\}_B$ weisen darauf hin, dass die Bedingungen an die Blips je nach Gruppenzugehörigkeit

$$\xi_{m+n} = \xi_{n+1} \quad (\text{Gruppe A}), \qquad \xi_{m+n} = -\xi_n \quad (\text{Gruppe B}) \tag{1.134}$$

erfüllt werden. Die die Wechselwirkung beinhaltenden Faktoren G_{m+n}^{A} und G_{m+n}^{B} unterscheiden sich von den Ausdrücken G_{m+n} in Gleichung (1.96) durch Weglassung der Ladung am Ursprung, t' = 0, sowie am Endpunkt, t' = t. Daher liefern die verbleibenden 2m + 2n - 2 Blipladungen den universellen Faktor $\Delta_{\rm r}^{(2-2K)(m+n-1)}$ ohne zusätzliche Abhängigkeit von Δ und $\omega_{\rm c}$.

1.2.3.5 Allgemeine exakte Mastergleichung

Die formal exakten Ausdrücke für die Erwartungswerte $\langle \sigma_j \rangle_t$ haben gezeigt, dass die Zustandsübergänge des Systems miteinander über die Influenzfunktionen $F^{(\pm)}(\{t_j\})$ korreliert sind. Dennoch kann die Dynamik der bedingten Populationen P(i, t; j, 0) für ein beliebiges N-Zustandssystem im Rahmen einer exakten verallgemeinerten Mastergleichung beschrieben werden (siehe [86]). Für ein Zweizustandssystem erhält man

$$\dot{P}(i,t;j,0) = -\sum_{k \in \{-1,+1\}} \int_0^t \mathrm{d}t' \, K(i,t;k,t') P(k,t';j,0) \quad t > 0 \,. \tag{1.135}$$

Da die Summe über alle Populationen konstant Eins ist, $\sum_i P(i,t; j,t') = 1$, folgt, dass $\sum_i \dot{P}(i,t; j,t') = 0$ und somit für die Kerne $\sum_i K(i,t; j,t') = 0$ gilt. Im Fall eines Zweizustandssystems gilt $P(\pm 1,t; 1,0) = \frac{1}{2}[1 \pm \langle \sigma_z \rangle_t]$. Benutzt man nun die Summenregel für die Kerne und führt bzgl. der Verkippung gerade bzw. ungerade Linearkombinationen ein, $K_z^{(s/a)}(t,t') = K(-1,t;-1,t') \pm K(1,t;1,t')$, so lässt sich eine verallgemeinerte Mastergleichung für $\langle \sigma_z \rangle_t$ mit einem Produktanfangszustand zum Zeitpunkt Null aufstellen

$$\frac{\mathrm{d}\langle \sigma_z \rangle_t}{\mathrm{d}t} = \int_0^t \mathrm{d}t' \left[K_z^{(\mathrm{a})}(t,t') - K_z^{(\mathrm{s})}(t,t') \langle \sigma_z \rangle_{t'} \right] . \tag{1.136}$$

Die exakte Integralgleichung

$$\langle \sigma_x \rangle_t = \int_0^t \mathrm{d}t' \left[K_x^{(\mathrm{s})}(t,t') - K_x^{(\mathrm{a})}(t,t') \langle \sigma_z \rangle_{t'} \right],$$
 (1.137)

verknüpft die Kohärenz $\langle \sigma_x \rangle_t$ mit $\langle \sigma_z \rangle_t$.

1.2.3.6 Irreduzible Kerne

Die Kerne $K^{s/a}(t, t')$ in Gleichung (1.136) entsprechen definitionsgemäß nur den irreduziblen Komponenten innerhalb der exakten Reihendarstellung (1.107). Die Irreduzibilität der Kerne besteht darin, dass sie an einem Übergangssojourn nicht weiter in unkorrelierte Beiträge untergliedert werden können, ohne dass dazu Badkorrelationen, die sich über diesen Übergangssojourn erstrecken, aufgehoben werden müssen. Die irreduziblen Influenzcluster $\tilde{F}_n^{(\pm)}$ können nun durch die Vorschrift definiert werden, dass von der ursprünglichen Influenzfunktion $F_n^{(\pm)}$ alle deren reduziblen Anteile, die in Produktform vorliegen, subtrahiert werden. Da der Verkippungsfaktor gleichermaßen innerhalb der vorgesehenen Subtraktionen faktorisiert, ist es sinnvoll, diese Vorschrift an dem Produkt $F_n^{(\pm)}B_n^{(s/a)}$ auszuführen. Für einen Pfad mit *n* Blips findet man

$$\tilde{F}_{n}^{(\pm)}B_{n}^{(s/a)} \equiv F_{n}^{(\pm)}B_{n}^{(s/a)}
-\sum_{j=2}^{n} (-1)^{n} \sum_{m_{1},\dots,m_{j}} F_{m_{1}}^{(+)}B_{m_{1}}^{(s)} F_{m_{2}}^{(+)}B_{m_{2}}^{(s)} \dots F_{m_{j}}^{(\pm)}B_{m_{j}}^{(s/a)}\delta_{m_{1}+\dots+m_{j},n},$$
(1.138)

worin die Terme so angeordnet sind, dass sie von rechts nach links einer aufsteigenden Zeitenabfolge entsprechen. Die inneren Summationsindizes $\{m_1, \ldots, m_j\}$ sind alle positive ganze Zahlen. Die über die Summenvorschrift konstruierten Subtraktionsglieder stellen alle möglichen Faktorisierungen der Influenzfunktion in Cluster dar. So ergibt sich beispielsweise für n = 3 der irreduzible Term

$$\tilde{F}_{3}^{(\pm)}B_{3}^{(s/a)} = F_{3}^{(\pm)}B_{3}^{(s/a)} - F_{2}^{(+)}B_{2}^{(s)}F_{1}^{(\pm)}B_{1}^{(s/a)} - F_{1}^{(+)}B_{1}^{(s)}F_{2}^{(\pm)}B_{2}^{(s/a)}
+ F_{1}^{(+)}B_{1}^{(s)}F_{1}^{(+)}B_{1}^{(s)}F_{1}^{(\pm)}B_{1}^{(s/a)}.$$
(1.139)

Somit ist es nun möglich, die formal exakten Reihendarstellungen der Kerne $K_z^{(s/a)}(t,t')$ in der generalisierten Mastergleichung anzugeben. Die Kerne werden dahingehend konstruiert, dass sie in gleichzeitiger Übereinstimmung mit der iterativen Lösung von Gleichung (1.136) sowie der Reihendarstellung (1.107) stehen.

$$K_{z}^{(s/a)}(t,t') = \Delta^{2} F_{1}^{(\pm)}(t,t') B_{1}^{(s/a)}(t,t') + \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^{n-1} \frac{\Delta^{2n}}{2^{n}} \int_{t'}^{t} dt_{2n-1} \dots \int_{t'}^{t_{3}} dt_{2} \sum_{\{\xi_{j}=\pm 1\}} \tilde{F}_{n}^{(\pm)} B_{n}^{(s/a)}$$
(1.140)

Insgesamt hängt das Produkt $\tilde{F}_n^{(\pm)} B_n^{(s/a)}$ von 2n Sprungzeiten ab, von denen der erste Übergang zum Zeitpunkt $t_1 = t'$ und der letzte zur Zeit $t_{2n} = t$ erfolgt. Die dazwischen stattfindenden Übergänge werden ausintegriert.

1.3 Getriebenes Spin–Boson–Modell

Der Hamiltonoperator (1.56) des Gesamtsystems kann verallgemeinert werden, indem Kopplungen an externe zeitabhängige Felder berücksichtigt werden. Es wird angenommen, dass diese Felder an die Operatoren $\hat{\sigma}_z$ und $\hat{\sigma}_x$ koppeln und keinen direkten Einfluss auf das Bad ausüben. Die Kopplung an $\hat{\sigma}_z$ führt zu einer zeitlichen Modulation der Verkippung ϵ . Auf Ebene des Hamiltonoperators kann dies einfach durch die Ersetzung

$$\epsilon \implies \epsilon(t) = \epsilon_0 + \epsilon_1(t) \tag{1.141}$$

erreicht werden. Hierin steht ϵ_0 für die zur statischen Verkippung gehörende Frequenz und $\epsilon_1(t)$ bezeichnet die zeitliche Veränderung der Verkippung aufgrund der von außen angelegten zeitabhängigen Kraft. Die Veränderung der zugehörigen Energie führt zu einer veränderten Phase der Verkippung. Die entlang eines Pfades bestehend aus m Blips aufsummierte Phase ergibt sich nun als

$$\Phi_m = \sum_{j=1}^m \xi_j \vartheta(t_{2j}, t_{2j-1}) \quad \text{mit} \quad \vartheta(t_{n+1}, t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathrm{d}t' \,\epsilon(t') \,. \tag{1.142}$$

Damit lassen sich auch die Verkippungsfaktoren in Gleichung (1.108) verallgemeinert durch die Phasen (1.142) ausdrücken,

$$B_m^{(s)} = \cos(\Phi_m), \qquad B_m^{(a)} = \sin(\Phi_m).$$
 (1.143)

Darüber hinaus ist auch eine zeitliche Variation des Tunnelmatrixelements möglich. Dieses kann jedoch keine negativen Werte annehmen. Eine zeitliche Variation der Tunnelbarriere könnte dann z. B. durch ein exponentielles Pulsieren erreicht werden,

$$\Delta \implies \Delta(t) = \Delta \exp\left[\mu \cos(\nu t)\right], \qquad (1.144)$$

mit der Kreisfrequenz ν und einer geeigneten dimensionslosen Amplitude μ .

1.3.1 Formal exakte Lösung

Die zuvor genannte Möglichkeit eines zeitlich veränderbaren Tunnelmatrixelements lässt sich in den formal exakten Reihendarstellungen aus Abschnitt 1.2.3 durch die Substitution

$$\Delta^m \implies \Delta_m(\{t_j\}) = \prod_{j=1}^m \Delta(t_j), \qquad (1.145)$$

in der Definition (1.102) berücksichtigen. Die Laplacetransformation der Mastergleichung (1.136) für $P(t) = \langle \sigma_z \rangle_t$ nimmt die Gestalt

$$\widehat{P}(\lambda) = \frac{1}{\lambda} \left(1 + \int_0^\infty \mathrm{d}t \,\mathrm{e}^{-\lambda t} \left[\widehat{K}_{z,\lambda}^{(\mathrm{a})}(t) - \widehat{K}_{z,\lambda}^{(\mathrm{s})}(t) P(t) \right] \right)$$
(1.146)

an mit den Integrationskernen $\widehat{K}_{z,\lambda}^{(s/a)}(t) = \int_0^\infty d\tau \, e^{-\lambda \tau} K_z^{(s/a)}(t+\tau,t)$. In gleicher Weise erhält man für $P_x(t) = \langle \sigma_x \rangle_t$

$$\widehat{P}_{x}(\lambda) = \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t \,\mathrm{e}^{-\lambda t} \left[\widehat{K}_{x,\lambda}^{(\mathrm{s})}(t) + \widehat{K}_{x,\lambda}^{(\mathrm{a})}(t) \langle \sigma_{z} \rangle_{t} \right]$$
(1.147)

mit $\widehat{K}_{x,\lambda}^{(s/a)}(t) = \int_0^\infty d\tau \, e^{-\lambda \tau} K_x^{(s/a)}(t+\tau,t)$. Betrachtet man nun periodische Veränderungen der Verkippung mit einer Periode $\Im = 2\pi/\omega$,

$$\epsilon(t) = \epsilon(t + \mathcal{T}), \qquad (1.148)$$

dann werden auch die Integrationskerne $\widehat{K}^{(\rm s/a)}_{z,\lambda}(t)$ diese Periodizität aufweisen. Sie können dann in der Gestalt

$$\widehat{K}_{z,\lambda}^{(s/a)}(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} k_m^{(s/a)}(\lambda) e^{-im\omega t}$$
(1.149)

als Fourierreihe entwickelt werden. Setzt man nun den Ausdruck aus Gleichung (1.149) in die Laplace-transformierte Mastergleichung (1.146) ein, lässt sich diese nun in rekursiver Form lösen [41]. Die Population besteht aus einem das Einschwingen beschreibenden und einem oszillierenden Anteil. Die Zeitskala des Einschwingverhaltens wird durch die Nullstellen der charakteristischen Gleichung

$$\lambda + \mathrm{i}m\omega + k_0^{(\mathrm{s})}(\lambda + \mathrm{i}m\omega) = 0 \qquad (1.150)$$

bestimmt. Die Lösungen der Gleichung (1.150) für m = 0 seien λ_0 . Die charakteristische Zeitskala, auf der das Einschwingverhalten abklingt und sich der rein oszillatorische Anteil durchsetzt, wird durch das Inverse des kleinsten negativen Realteils der Lösungen λ_0 festgelegt. Die weiteren Lösungen von Gleichung (1.150) für $m = \pm 1, \pm 2, \ldots$ können durch mehrfaches Verschieben in imaginärer Richtung um die treibende Frequenz ω aus λ_0 abgeleitet werden, $\lambda_m = \lambda_0 - im\omega$. Die zugehörigen Beiträge am Einschwingverhalten klingen daher auf der selben Zeitskala ab wie die entsprechende Übergangsdynamik der primären Lösung λ_0 , da sie sich nur im Imaginärteil unterscheiden. Nach Ausklingen des Übergangsverhaltens oszilliert P(t) mit der Periode \mathcal{T} . Dieses asymptotische Verhalten der Systemdynamik lässt sich ebenfalls in eine Fourierreihe entwickeln [41, 42]

$$\lim_{t \to \infty} P(t) = P^{(as)}(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} p_m e^{-im\omega t}.$$
 (1.151)

Das Residuum des Pols von $\widehat{P}(\lambda)$ an der Stelle $\lambda = -im\omega$ legt den Koeffizienten p_m fest. Man erhält somit für die Koeffizienten ein gekoppeltes Gleichungssystem

$$p_0 = \frac{k_0^{(a)}(0)}{k_0^{(s)}(0)} - \sum_{m \neq 0} \frac{k_m^{(s)}(0)}{k_0^{(s)}(0)} p_{-m}, \qquad (1.152)$$

$$p_m = \frac{1}{-\mathrm{i}m\omega} \left(k_m^{(\mathrm{a})}(-\mathrm{i}m\omega) - \sum_n k_{m-n}^{(\mathrm{s})}(-\mathrm{i}m\omega) p_n \right) \quad \text{für } m \neq 0.$$
 (1.153)

Die Gleichungen (1.152) und (1.153) lassen sich in eine einzelne Integro-Differentialgleichung umformen,

$$\dot{P}_{\rm as}(t) = \mathfrak{F}(t) - \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \mathrm{d}t' \, P_{\rm as}(t') \mathcal{L}(t', t - t') \,, \qquad (1.154)$$

welche das asymptotische Verhalten der Besetzungswahrscheinlichkeit innerhalb einer Periode beschreibt. Hierin wurden die Funktionen

$$\mathcal{F}(t) \equiv \sum_{n} e^{-in\omega t} k_{n}^{(a)}(-in\omega) ,$$

$$\mathcal{L}(t,t') \equiv \sum_{m,n} e^{-im\omega t} e^{-in\omega t'} k_{m}^{(s)}(-in\omega)$$
(1.155)

51

definiert. Die Gleichung (1.154) verdeutlicht, dass die asymptotische Dynamik des getriebenen Systems nicht markovsch ist.

Im Fall einer externen monochromatischen treibenden Kraft,

$$\epsilon(t) = \epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(\omega t), \qquad (1.156)$$

verschwinden die Koeffizienten $k_{2m}^{(s)}$ und $k_{2m+1}^{(a)}$ der Integrationskerne, falls die mittlere Verkippung $\bar{\epsilon}$ bzw. die statische Verkippung ϵ_0 Null ist. Mit jener Eigenschaft lässt sich in diesem Spezialfall aus den Gleichungen (1.152) und (1.153) die Auswahlregel

$$p_{2m} = 0 (1.157)$$

ableiten. Gleiches gilt wegen der Relation (1.67) auch für $\langle \sigma_y \rangle_t^{(as)}$. Somit tragen nur ungeradzahlige Vielfache der Grundfrequenz zum asymptotischen Verhalten der Besetzung $P^{(as)}(t)$ bei. Im allgemeinen Fall lassen sich die Integrationskerne $k_m^{(s/a)}(\lambda)$ als Potenzreihenentwicklungen im quadrierten Tunnelmatrixelement Δ^2 darstellen. In der NIBA nehmen diese die einfache Form

$$k_m^{(s)}(\lambda) = \Delta^2 \int_0^\infty d\tau \, e^{-\lambda\tau} e^{-Q'(\tau)} \cos\left(Q''(\tau)\right) A_m^{(s)}(\tau) \,, \qquad (1.158)$$

$$k_m^{(a)}(\lambda) = \Delta^2 \int_0^\infty d\tau \, e^{-\lambda\tau} e^{-Q'(\tau)} \sin(Q''(\tau)) A_m^{(a)}(\tau)$$
(1.159)

an. Hierin wurden die abkürzenden Schreibweisen

$$A_{2m}^{(s)}(\tau) = (-1)^m e^{-im\omega\tau} \cos(\epsilon_0 \tau) J_{2m} \left(\frac{2\epsilon_1}{\omega} \sin(\omega\tau/2)\right), \qquad (1.160)$$

$$A_{2m}^{(a)}(\tau) = (-1)^m e^{-im\omega\tau} \sin(\epsilon_0 \tau) J_{2m} \left(\frac{2\epsilon_1}{\omega} \sin(\omega\tau/2)\right), \qquad (1.161)$$

$$A_{2m+1}^{(s)}(\tau) = (-1)^{m+1} e^{-i(m+1/2)\omega\tau} \cos(\epsilon_0 \tau) J_{|2m+1|} \left(\frac{2\epsilon_1}{\omega} \sin(\omega\tau/2)\right), \qquad (1.162)$$

$$A_{2m+1}^{(a)}(\tau) = (-1)^m e^{-i(m+1/2)\omega\tau} \sin(\epsilon_0 \tau) J_{|2m+1|} \left(\frac{2\epsilon_1}{\omega} \sin(\omega\tau/2)\right)$$
(1.163)

eingeführt. $J_n(z)$ bezeichnet dabei eine Besselfunktion der ersten Gattung *n*-ten Grades [65]. Man erkennt an diesen Ausdrücken, dass durch die periodisch modulierte Verkippung lang andauernde Blipzustände unterdrückt werden [41]. Daher eignet sich die NIBA in den Fällen, in denen sie die Dynamik von Systemen ohne oszillierende äußere Felder korrekt beschreibt, auch in gesteigertem Maße für solche mit äußerer treibender Kraft. Ferner sind diese Ausdrücke einer numerischen Auswertung zugänglich und dienen der Berechnung der Dynamik von P(t) innerhalb der NIBA.

1.3.2 Lineare Antwort

Falls die Amplitude des äußeren Feldes klein gegenüber der zugehörigen treibenden Frequenz ist, $\epsilon_1 < \omega$, können die Integralkerne (1.158, 1.159) als Potenzreihen in ϵ_1 entwickelt werden. Innerhalb der Gültigkeit der Linearen–Antwort–Theorie sind die wesentlichen Integralkerne von der Ordnung $\mathcal{O}(1)$ bzw. $\mathcal{O}(\epsilon_1)$. Für die Fourierreihen (1.151) sind dann nur die Glieder mit $m \in \{-1, 0, 1\}$ von Bedeutung. Der Term $k_0^{(s/a)}(\lambda)$ ist unabhängig von ϵ_1 und $k_{\pm 1}^{(s/a)}(\lambda) = \mathcal{O}(\epsilon_1)$. Daraus folgt das Verhalten

$$P^{(as)}(t) = P_{\infty} + \frac{\hbar\epsilon_1}{4} \left(\tilde{\chi}(\omega) e^{-i\omega t} + \tilde{\chi}(-\omega) e^{i\omega t} \right) , \qquad (1.164)$$

mit $P_{\infty} = \lim_{\epsilon_1 \to 0} k_0^{(a)}(0) / k_0^{(s)}(0)$ und der linearen Suszeptibilität im Frequenzraum

$$\tilde{\chi}(\omega) = \lim_{\epsilon_1 \to 0} \frac{4}{\hbar \epsilon_1 [-i\omega + k_0^{(s)}(-i\omega)]} \left(k_1^{(a)}(-i\omega) - P_\infty k_1^{(s)}(-i\omega) \right) .$$
(1.165)

1.4 Markov Regime

Falls die charakteristische Bewegungsdynamik des Systems langsam im Vergleich zur Zeitskala τ ist, auf der die Kerne $K_z^{(s/a)}(t, t - \tau)$ abfallen, lässt sich die inkohärente Dynamik für lange Zeiten durch eine zeitlich lokale Mastergleichung beschreiben. Die allgemeine Mastergleichung vereinfacht sich dann mit $\mathcal{M}_z^{(s/a)}(t) = \int_0^\infty d\tau K_z^{(s/a)}(t, t - \tau)$ zu

$$\dot{P}(t) = \mathcal{M}_{z}^{(a)}(t) - \mathcal{M}_{z}^{(s)}(t)P(t). \qquad (1.166)$$

Die Integralausdrücke $\mathcal{M}_z^{(s/a)}(t)$ haben innerhalb der NIBA die explizite Form

$$\mathcal{M}_{z}^{(s)}(t) = \Delta^{2} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}\tau \,\mathrm{e}^{-Q'(\tau)} \cos[Q''(\tau)] \cos[\vartheta(t,t-\tau)], \qquad (1.167)$$

$$\mathcal{M}_{z}^{(a)}(t) = \Delta^{2} \int_{0}^{\infty} d\tau \, e^{-Q'(\tau)} \sin[Q''(\tau)] \sin[\vartheta(t, t - \tau)], \qquad (1.168)$$

in denen die akkumulierte Phase ϑ in Gleichung (1.142) definiert ist. Gleichung (1.166) lässt sich einfach integrieren und man erhält als Lösung

$$P(t) = \exp\left\{-\int_0^t dt' \mathcal{M}_z^{(s)}(t')\right\} + \int_0^t dt' \mathcal{M}_z^{(a)}(t') \exp\left\{-\int_{t'}^t dt'' \mathcal{M}_z^{(s)}(t'')\right\}.$$
 (1.169)

Der adiabatische Grenzfall besteht in der zusätzlichen Näherung $\vartheta(t, t - \tau) = \epsilon(t)\tau$. Verwendet man diese Form in den Gleichungen (1.167) und (1.168), führt dies auf

$$\mathcal{M}_{z}^{(s/a)}(t) = k^{+}[\epsilon(t)] \pm k^{-}[\epsilon(t)]. \qquad (1.170)$$

Darin basieren die Raten k^{\pm} auf Fermis Goldener Regel (siehe z.B. [75]) und die Zeitabhängigkeit rührt einzig von der Verkippung $\epsilon(t)$ her. Die Raten sind gemäß dem Prinzip der detaillierten Balance (engl. *detailed balance*) miteinander verknüpft, i.e. $k^{-}(\epsilon) = k^{+}(-\epsilon) = \exp\{-\hbar\beta\epsilon\}k^{+}$.

1.5 Hochfrequenz Regime

Falls die treibende Frequenz ω sehr viel größer als die charakteristischen Frequenzen des gedämpften Zweizustandssystems ist, verhält sich die Systemdynamik träge auf einer Zeitskala $\mathcal{T}_{\omega} = 2\pi/\omega$, die durch das Inverse der treibenden Frequenz bestimmt ist. Unter diesen Bedingungen ist eine Beschreibung über zeitlich gemittelte Größen sinnvoll (engl. *coarse-grained model*). Die zeitliche Mittelung erfolgt gerade über eine solche Periode $\mathcal{T}_{\omega} = 2\pi/\omega$. Ersetzt werden somit die Größen

$$\hat{K}_{\lambda}^{(s/a)}(t) \quad \Rightarrow \quad \langle \hat{K}_{\lambda}^{(s/a)} \rangle \equiv \frac{1}{\mathcal{T}_{\omega}} \int_{0}^{\mathcal{T}_{\omega}} \mathrm{d}t \, \hat{K}_{\lambda}^{(s/a)}(t) = k_{0}^{(s/a)}(\lambda) \,. \tag{1.171}$$

Gleichung (1.171) zeigt, dass die gemittelte Dynamik durch den statischen Fourierkoeffizienten m = 0 aus der Reihendarstellung (1.149) beschrieben wird. In dieser Näherung findet man für Gleichung (1.146) die Lösung

$$\widehat{P}(\lambda) = \frac{1 + k_0^{(a)}(\lambda)/\lambda}{\lambda + k_0^{(s)}(\lambda)}$$
(1.172)

Anhand dieser Form lassen sich sowohl die gemittelte Übergangsdynamik als auch das Langzeitverhalten studieren. Die charakteristischen Zeitskalen des Übergangsverhaltens werden durch die Nullstellen der Gleichung $\lambda + k_0^{(s)}(\lambda) = 0$ bestimmt. Setzt man in der Gleichung (1.158) für $k_0^{(s)}$ die Zerlegung

$$J_0(2z\,\sin(\alpha)) = J_0^2(z) + 2\sum_{n=1}^{\infty} J_n^2(z)\,\cos(2n\alpha)$$
(1.173)

ein, findet man die bestimmende Gleichung für die Polstellen im Nenner von Gleichung (1.172) in der Form

$$\lambda + \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2(\epsilon_1/\omega) \hat{K}_z^{(s)}(\lambda + in\omega) = 0. \qquad (1.174)$$

Die Dynamik des inkohärenten Verhaltens, welches alleine durch die Polstelle $\lambda = -\gamma_r \equiv -k_0^{(s)}(\lambda = 0)$ gekennzeichnet wird, kann im Grenzfall reiner Dämpfung durch

$$P(t) = P_{\infty} + (1 - P_{\infty}) e^{-\gamma_{r} t}, \qquad P_{\infty} = k_{0}^{(a)}(0) / k_{0}^{(s)}(0) \qquad (1.175)$$

beschrieben werden. In diesem Ausdruck steht P_{∞} für den gemittelten Gleichgewichtswert. Die Dämpfungsrate berechnet sich aus der Summe

$$\gamma_{\rm r}(\epsilon_0;\omega,\epsilon_1) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2\left(\frac{\epsilon_1}{\omega}\right) \left[k^+(\epsilon_0+n\omega)+k^-(\epsilon_0+n\omega)\right].$$
(1.176)

Die Summation im Ausdruck (1.176) erfolgt über alle möglichen Kanäle, durch welche ganze Vielfache der Grundfrequenz ω durch Absorption bzw. Emission tunneln können.

Jeder Kanal für n Quanten der Grundfrequenz ω ist dabei mit dem Faktor $J_n^2(\epsilon_1/\omega)$ gewichtet. Die Rate, die einem Kanal zugeschrieben werden kann, setzt sich aus den Relaxationstermen k^{\pm} für eine statische Verkippung der Größe $\epsilon_n = \epsilon_0 + n\omega$ zusammen. Damit hängt γ_r im wesentlichen von den Parametern des externen treibenden Feldes ab. Dies wird auch an der Abbildung 22.2 in der Referenz [86] deutlich. Dort sieht man, dass die Rate im Vergleich zum statischen Fall verstärkt wird, falls die Bedingung $\epsilon_0 = \pm n\omega$ erfüllt ist und gleichzeitig das Argument des Gewichtungsfaktors keine Nullstelle der Besselfunktion trifft. Umgekehrt kann ein Einstellen der Parameter auf diese Nullstelle genutzt werden, um den entsprechenden Dämpfungskanal auszuschalten bzw. komplett zu unterdrücken. Für lange Zeiten führt das externe Wechselfeld asymptotisch auf eine Besetzungswahrscheinlichkeit $P_{\infty} = k_0^{(a)}(0)/k_0^{(s)}(0)$, die sich vom asymptotischen Verhalten bei statischer Verkippung $P_{\infty} = \tanh(\hbar\beta\epsilon_0/2)$ stark unterscheiden kann. Betrachtet man nun ein symmetrisches Zweizustandssystem unter Ankopplung an ein

ohmsches Bad, findet man für Frequenzen $\omega \gg 2\pi K k_{\rm B} T/\hbar$ innerhalb der NIBA die bestimmende Gleichung der Polstellen (1.174) in der Form [39]

$$\lambda + 2g(\lambda) \left\{ J_0^2(\epsilon_1/\omega) + \left(\frac{2\pi K + \hbar\beta\lambda}{\hbar\beta\omega}\right)^2 \sum_{n\neq 0} \frac{J_n^2(\epsilon_1/\omega)}{n^2} \right\} = 0.$$
 (1.177)

Der erste Term in den geschweiften Klammern ist vorherrschend für hohe Frequenzen ω , solange das Verhältnis ϵ_1/ω nicht einen Wert in unmittelbarer Nähe der Nullstelle der Besselfunktion J_0 einnimmt. Für $K \ll 1$ findet sich die schwach gedämpfte kohärente Dynamik im Übergangsregime. Ersetzt man Δ durch ein renormiertes Tunnelmatrixelement, welches die Einflüsse des externen treibenden Feldes beinhaltet,

$$\Delta \longrightarrow J_0(\epsilon_1/\omega)\Delta, \qquad (1.178)$$

lässt sich die Gültigkeit der Ergebnisse, die man für ein ungetriebenes System erhalten würde [86], auf den Fall eines getriebenen Systems ausweiten.

Die kohärente Dynamik wird unterdrückt, sobald das Verhältnis der Parameter ϵ_1/ω derart eingestellt wird, dass die Besselfunktion nahezu verschwindet, $J_0(\epsilon_1/\omega) \approx 0$. In diesem Fall erfolgt die Relaxation des Systems in inkohärenter Weise mit der Rate

$$\gamma_{\rm r} = 2g(0) \left(\frac{2\pi K}{\hbar\beta\omega}\right) \sum_{n\neq 0} \frac{J_n^2(\epsilon_1/\omega)}{n^2} \,. \tag{1.179}$$

Die Bedingung $J_0(\epsilon_1/\omega) = 0$ stellt ein notwendiges Kriterium für das Phänomen der kohärenten Zerstörung des Tunnelvorgangs bei einem getriebenen, ungedämpften Zweizustandssystem dar [45, 46].

Im kohärenten Regime mit $K \ll 1$ und $\epsilon_1/\omega \ll 1$ lässt sich die Systemdynamik für schwache Dämpfungen analysieren. Die wesentlichen Effekte der treibenden Kraft werden im Falle hoher Frequenzen berücksichtigt, indem die Besselfunktion in Gleichung (1.174) bis zur Ordnung $\mathcal{O}[(\epsilon_1/\omega)^2]$ entwickelt wird. In dieser Näherung wird das getriebene System ohne Dämpfung durch die drei Verkippungsfrequenzen $\mu_1 = \epsilon_0, \mu_2 = \epsilon_0 + \omega$ und $\mu_3 = \epsilon_0 - \omega$ sowie den drei Tunnelfrequenzen ν_j charakterisiert. Die letztgenannten Tunnelfrequenzen lassen sich in quadrierter Form ν_j^2 als Lösung der kubischen Gleichung

$$\left(\nu^{2}\right)^{3} - a_{4}\left(\nu^{2}\right)^{2} + a_{2}\nu^{2} - a_{0} = 0 \qquad (1.180)$$

bestimmen. Hierin stehen die Koeffizienten a_0 , a_2 und a_4 für die Ausdrücke

$$a_{0} = \mu_{1}^{2} \mu_{2}^{2} \mu_{3}^{2} + [\Delta_{1}^{2} \mu_{2}^{2} \mu_{3}^{2} + \text{zykl. Vert.}]$$

$$a_{2} = \Delta_{1}^{2} (\mu_{2}^{2} + \mu_{3}^{2}) + \mu_{2}^{2} \mu_{3}^{2} + \text{zykl. Vert.}$$

$$a_{4} = \sum_{j=1}^{3} (\mu_{j}^{2} + \Delta_{j}^{2})$$
(1.181)

mit den modifizierten Tunnelmatrixelementen $\Delta_1^2 = (1 - \epsilon_1^2/2\omega^2)\Delta^2$ und $\Delta_2^2 = \Delta_3^2 = (\epsilon_1^2/2\omega^2)\Delta^2$. Die Zeitentwicklung des ungedämpften Systems ergibt sich aus der Superposition dreier kohärenter Oszillationsterme

$$P_{\text{unged.}}(t) = p_0 + \sum_{j=1}^3 p_j \cos(\nu_j t) .$$
 (1.182)

Die darin vorkommenden Amplituden p_j lassen sich als Funktionen der zuvor genannten Verkippungs- μ_j und Tunnelfrequenzen ν_j ausdrücken

$$p_0 = \prod_{j=1}^3 \frac{\mu_j^2}{\nu_j^2}, \qquad p_1 = \frac{\prod_{j=1}^3 (\nu_1^2 - \mu_j^2)}{\nu_1^2 (\nu_1^2 - \nu_2^2) (\nu_1^2 - \nu_3^2)}.$$
(1.183)

Hier steht exemplarisch der Ausdruck für p_0 und p_1 . Die Amplituden p_2 sowie p_3 lassen sich durch zyklisches Vertauschen der Indizes in der Darstellung für p_1 in Gleichung (1.183) gewinnen.

Für das gedämpfte System ergibt sich eine Verschiebung der Polstellen in die negative komplexe Zahlenebene. Man erhält unter Auslassung der irrelevanten Frequenzverschiebungen die Form

$$P(t) = \sum_{j=1}^{3} p_j \cos(\nu_j t) e^{-\gamma_j t} + (p_0 - P_\infty) e^{-\gamma_0 t} + P_\infty.$$
 (1.184)

Darüber hinaus zeigt sich, dass im asymptotischen Grenzfall der stationäre Zustand um den Mittelwert P_{∞} aus Gleichung (1.175) schwingt

$$P^{(\mathrm{as})}(t) = P_{\infty} + \sum_{m \neq 0} \frac{1}{-\mathrm{i}m\omega} \left[k_m^{(\mathrm{a})}(-\mathrm{i}m\omega) - k_m^{(\mathrm{s})}(-\mathrm{i}m\omega) P_{\infty} \right] \,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\omega t} \,. \tag{1.185}$$

Mit zunehmender treibender Frequenz werden die Schwingungen um P_{∞} immer stärker unterdrückt, da die Fourierkoeffizienten mit $m \neq 0$ an Gewicht verlieren.

2 Experimenteller Aufbau und theoretische Beschreibung

In diesem Kapitel wird der grundlegende Aufbau eines Experiments zur Realisierung eines getriebenen Zweizustandssystems sowie zur Beobachtung des Phänomens der quantenstochastischen Resonanz vorgestellt. Ergänzend werden die zur theoretischen Beschreibung der experimentell kontrollierten Systeme benötigten Theorien dargelegt. Kurz und knapp sollen hier einführend die wesentlichen Gesichtspunkte der Bose-Einstein-Kondensation und des Luttinger Flüssigkeitsmodells zur Beschreibung niederenergetischer Anregungen in eindimensionalen Systemen aufgeführt werden.

2.1 Experimenteller Aufbau

Das Experiment besteht aus einer Vakuumkammer, in der ein Gas, bestehend aus Rubidiumatomen des Isotops ⁸⁷Rb, bis nahe an den absoluten Nullpunkt gekühlt wird, sodass unterhalb der kritischen Temperatur ein Kondensat entstehen kann. Dieses soll



Abbildung 2.1: Phasenübergang eines ⁸⁷Rb–Gases in einem stark anisotropen Fallenpotential.

in seiner räumlichen Ausdehnung möglichst auf eine Dimension eingeschränkt werden. Besitzt das die Atome einschließende Fallenpotential in der Vakuumkammer eine starke Anisotropie kann das Kondensat bereits in einer quasi-eindimensionalen Topologie vorliegen [siehe Abb. 2.1]. Eine andere Möglichkeit zur Reduktion der Dimensionalität des Kondensats besteht darin, den bei einer gewöhnlichen, isotropen Fallengeometrie zu Beginn dreidimensionalen, kugelförmigen Kondensattropfen durch das Hinzufügen zweier optischer Gitter in der x - y- sowie x - z-Ebene in viele quasi-eindimensionale Kondensatschläuche zu zerschneiden, die sich entlang der x-Achse erstrecken [siehe Abb. 2.2]. In jedem Kondensatschlauch befinden sich ca. 80 bis 100 Rubidiumatome. In der



Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der räumlichen Anordnung der durch ein zweidimensionales optisches Gitter erzeugten zigarrenförmigen, quasieindimensionalen Kondensatschläuche.

Folge werden zwei Subniveaus des Grundzustands des bosonischen Gases besonders ausgezeichnet: $|a\rangle$ und $|b\rangle$. Sie unterscheiden sich nur in ihrer Hyperfeinstruktur, also einer inneren Quantenzahl, und können durch einen Raman–Übergang ineinander überführt werden (siehe Abschnitt 2.2.2.4).

2.1.1 Mögliche Potentiallandschaften für einen oder mehrere AQP(s)

Die Erzeugung eines atomaren Quantenpunktes für Atome im Zustand $|b\rangle$ bedarf eines zusätzlichen Potentials, welches dem Fallenpotential des Kondensats überlagert ist. Es sind verschiedene Realisierungen möglich, die nachstehend kurz diskutiert werden.

2.1.1.1 Fokussierter Laserstrahl

Durch das mit einem fokussierten Laserstrahl erzeugte Potential [siehe Abb. 2.3 a)] ist es möglich, einen einzelnen atomaren Quantenpunkt im Kondensat zu erzeugen, so dass induzierte Wechselwirkungen mit weiteren AQPs nicht bedacht werden müssen. Es erweist sich jedoch als experimentell schwierig, den örtlichen Fokus zeitlich konstant zu halten. Auch die Flankensteilheit des Potentials und damit die Unterdrückung von Mehrfachbesetzungen kann nicht gewährleistet werden.

2.1.1.2 Periodisches Gitter

Ein periodisches Gitter in Form eines Kosinuspotentials [vgl. Abb. 2.3 b)] ist in seiner experimentellen Umsetzung einfacher. Es sind jedoch Phononen-induzierte Nachbarwechselwirkungen zwischen zwei AQPs möglich, falls die Kohärenzlänge des Kondensats und die Gitterkonstante von gleicher Größenordnung sind. Indem die Verstimmung der Laser im Raman-Übergang vergrößert wird, lässt sich die Besetzungswahrscheinlichkeit der AQPs reduzieren. Dabei handelt es sich jedoch um eine rein statistische Reduktion der Besetzung und garantiert nicht, dass, selbst wenn nur zwei AQPs des Gitters besetzt sind, diese nicht benachbart sind.

2.1.1.3 Supergitter

Ein Supergitter [siehe Abb. 2.3 c)] bietet den Vorteil, dass bei gleichbleibender Steilheit der Potentialflanken der Abstand der Minima im Gitter zueinander variiert werden kann. Somit lassen sich Phononen-induzierte Wechselwirkungen unterdrücken, indem ein Abstand zwischen den Potentialminima gewählt wird, der größer als die Kohärenzlänge des Kondensats ist. Die experimentelle Implementierung ist hingegen äußerst schwierig, da hierzu ein aufwendiger optischer Aufbau notwendig ist, der mit hoher Präzision die zur Erzeugung des Supergitters verschiedenen Wellenlängen kohärenten Lichts liefert sowie zur Überlagerung bringt.

2.1.1.4 Periodisches Gitter plus lineare Rampe

Am einfachsten und experimentell praktikabelsten ist es, ein periodisches Gitter durch ein zusätzliches elektrisches Feld linear zu verkippen [siehe Abb. 2.3 d)]. Somit befindet sich nur noch ein einziges Minimum des Potentialgitters in Resonanz zum Lasersystem des Raman–Übergangs.

a) Fokussierter Laserstrahl



b) Periodisches Gitter



c) Supergitter



d) Periodisches Gitter plus lineare Rampe



Abbildung 2.3: Verschiedene mögliche Potentialverläufe zur Realisierung eines oder mehrerer atomarer Quantenpunkte.

2.2 Theoretische Beschreibung

Um von der experimentellen Beschreibung hin zur theoretischen Erfassung der betrachteten Systeme zu gelangen, wird nachstehend die Physik der ultrakalten Quantengase und deren niederenergetischen Anregungen beleuchtet. Weiterhin wird das Bose-Hubbard-Modell diskutiert, welches die Dynamik eines bosonischen Gases in einem periodischen Gitter beschreibt. Abschließend werden die im Experiment auftretenden Wechselwirkungen bzw. Kopplungsmechanismen zwischen Kondensatatomen und Atomen im Quantenpunkt erläutert.

2.2.1 Phononen-induzierte Wechselwirkung zwischen zwei AQPs

Zwei besetzte benachbarte atomare Quantenpunkte können eine durch Bad–Phononen induzierte Wechselwirkung erfahren [siehe Abb. 2.4]. Das zugehörige Wechselwirkungspotential bei einem eindimensionalen System hat die Form [73],

$$V(\gamma, r) \approx -\gamma^2 \rho_0 \xi \frac{\pi^2 \rho_0^2}{m} \exp\{-2r/\xi\},$$
 (2.1)

mit dem Abstand r zwischen den beiden AQPs und ξ der Kohärenzlänge des Kondensats. Um eine Verschiebung der Energieniveaus durch dieses zusätzliche Potential (2.1) zu



Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Phononen-induzierten Wechselwirkung zwischen zwei atomaren Quantenpunkten in einem Bose-Einstein-Kondensat.

vermeiden, muss der Abstand zwischen den Minima im verwendeten optischen Gitter dementsprechend angepasst werden.

2.2.2 Atom–Photon Wechselwirkung

Da in dem vorgeschlagenen Experiment kohärente Lichtquellen (Laser) für das Laden und Entladen der optischen Gitterplätze benutzt werden, soll nun kurz die Theorie der Wechselwirkung zwischen Atomen und Photonen skizziert werden. Ein Hamiltonoperator, der ein derart wechselwirkendes System beschreibt, setzt sich aus einem Anteil für das freie Atom, \hat{H}_{At} , und einem für das Wechselwirkungspotential, $\hat{V}(t)$, zusammen:

$$\hat{H} = \hat{H}_{At} + \hat{V}(t).$$
 (2.2)

Vereinfachend wird angenommen, dass das Atom aus einem Grundzustand, $|1\rangle$, und einem angeregten Zustand, $|2\rangle$, besteht und somit ein Zweiniveausystem darstellt. Diese beiden Zustände sind durch die Energiedifferenz $\Delta E_{21} = \hbar(\omega_2 - \omega_1) = \hbar\omega_{21}$ voneinander getrennt. Dieses Zweiniveausystem steht in Wechselwirkung mit einem monochromatischen Lichtfeld der Kreisfrequenz $\omega_{\rm L} = 2\pi\nu_{\rm L}$. In einem nächsten Schritt wird nun die Gestalt des Wechselwirkungsoperators $\hat{V}(t)$ näher analysiert.

2.2.2.1 Atom–Photon Wechselwirkungsoperator

In einem externen elektrischen Feld ergibt sich für ein Teilchen mit einem Dipolmoment die Wechselwirkungsenergie $V = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$. Im hiesigen Fall handelt es sich um ein oszillierendes, also zeitabhängiges Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$, welches das Lichtfeld beschreibt. Wenn die Ausdehnung des Atoms klein gegenüber der Wellenlänge des verwendeten Lichts ist, lassen sich die räumlichen Variationen des elektrischen Feldes auf der Längenskala der atomaren Ausdehnung in erster Ordnung vernachlässigen. Diese Näherung wird auch elektrische Dipolnäherung genannt. Das elektrische Feld lässt sich auf diese Weise am Ort des Atoms \mathbf{R} auswerten,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) \sim \mathbf{E}(\mathbf{R},t) \sim \mathbf{E}(t) \,. \tag{2.3}$$

Die rechte Näherung in Gleichung (2.3) beruht auf der Annahme, dass das Atom seinen Ort während der Atom-Photon Wechselwirkung nicht ändert. Dadurch verliert das elektrische Feld auch die Abhängigkeit von der Ortskoordinate des Atoms. Das oszillierende elektrische Lichtfeld am Ort des Atoms kann demnach auf die Form

$$\mathbf{E}(t) = \boldsymbol{\epsilon} E_0 \cos(\omega_{\rm L} t) \tag{2.4}$$

gebracht werden. Hierbei bezeichnet ϵ den auf Eins normierten Polarisationsvektor, E_0 die Amplitude und $\omega_{\rm L}$ die Kreisfrequenz des Lichtfeldes. Damit lässt sich der Atom-Photon Wechselwirkungsoperator als

$$\hat{V}(t) = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}(t) \tag{2.5}$$

schreiben mit dem elektrischen Dipoloperator $\hat{\mathbf{d}} = -e\,\hat{\mathbf{r}}$.

2.2.2.2 Allgemeine Dynamik

Um die zeitliche Entwicklung eines jeden Zustandsvektors im Zweiniveausystem unter dem Einfluss der Atom–Photon Wechselwirkung zu bestimmen, muss die zeitabhängige Schrödingergleichung gelöst werden:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) .$$
(2.6)

Eine allgemeine Lösung für die Wellenfunktion stellt der Ansatz

$$\Psi(\mathbf{r},t) = c_1(t) e^{-i\omega_1 t} u_1(\mathbf{r}) + c_2(t) e^{-i\omega_2 t} u_2(\mathbf{r})$$
(2.7)

dar. Hierin sind $u_1(\mathbf{r})$ und $u_2(\mathbf{r})$ die stationären Eigenfunktionen und $c_1(t)$ sowie $c_2(t)$ die zugehörigen zeitabhängigen Amplituden. Setzt man nun den Ausdruck für Gleichung (2.5) zusammen mit (2.4) in die zeitabhängige Schrödingergleichung (2.6) und bildet das Skalarprodukt, nachdem die resultierende Gleichung von links mit $\exp\{i\omega_j t\}u_j^*(\mathbf{r})$ multipliziert wurde, führt dies auf ein System gekoppelter Differentialgleichungen für die zeitabhängigen Koeffizienten $c_1(t)$ und $c_2(t)$,

$$\dot{c}_{1}(t) = i \frac{d_{12}^{\epsilon} E_{0}}{\hbar} e^{-i\omega_{21}t} \cos(\omega_{\rm L}t) c_{2}(t) ,$$

$$\dot{c}_{2}(t) = i \frac{d_{21}^{\epsilon} E_{0}}{\hbar} e^{i\omega_{21}t} \cos(\omega_{\rm L}t) c_{1}(t) .$$
(2.8)

Hierbei ist $d_{jk}^{\epsilon} = \langle j | \hat{\mathbf{d}} | k \rangle \epsilon = \int d^3 r \, u_j^*(\mathbf{r}) \, \hat{\mathbf{d}} \, u_k(\mathbf{r}) \, \epsilon$ die Projektion des Dipolmatrixelements auf den Polarisationsvektor. Das Dipolmatrixelement $\mathbf{d}_{21} = \langle 2 | \hat{\mathbf{d}} | 1 \rangle$ ist ein Maß für die Kopplungsstärke des Übergangs $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$. Verschwindet dieses, so spricht man von einem verbotenen Übergang.

2.2.2.3 Exakte ungedämpfte Lösung in der Drehwellennäherung

Zur Lösung der gekoppelten Differentialgleichungen ist es zunächst hilfreich, die für die spätere Dynamik wichtige Größe der resonanten Rabifrequenz

$$\Omega_0 = \frac{d E_0}{\hbar} \tag{2.9}$$

einzuführen mit $d = d_{12}^{\epsilon} = d_{21}^{\epsilon}$. Dies lässt die Gleichungen (2.8) in der Form

$$\dot{c}_1(t) = i \Omega_0 e^{-i\omega_{21}t} \cos(\omega_{\rm L}t)c_2(t) ,$$

$$\dot{c}_2(t) = i \Omega_0 e^{i\omega_{21}t} \cos(\omega_{\rm L}t)c_1(t) ,$$
(2.10)

darstellen. Mit der Euler'schen Ersetzung $\cos(\omega_{\rm L} t) = 1/2 \left[\exp\{i\omega_{\rm L}\} + \exp\{-i\omega_{\rm L}\} \right]$, eingesetzt in (2.10), erhält man

$$\dot{c}_{1}(t) = i \frac{\Omega_{0}}{2} \left(e^{i(\omega_{L} - \omega_{21})t} + e^{-i(\omega_{L} + \omega_{21})t} \right) c_{2}(t) ,$$

$$\dot{c}_{2}(t) = i \frac{\Omega_{0}}{2} \left(e^{-i(\omega_{L} - \omega_{21})t} + e^{i(\omega_{L} + \omega_{21})t} \right) c_{1}(t) .$$
(2.11)

Die Frequenz des kohärenten Lichts befindet sich nahe der Übergangsfrequenz, $\omega_{\rm L} \approx \omega_{21}$. Man spricht in diesem Fall auch von nahresonanter Licht–Atom Kopplung. Daher sind die in den Gleichungen (2.11) auftretenden Terme $\exp\{\pm i(\omega_{\rm L}+\omega_{21})t\}$ schnell oszillierend im Vergleich zu $\exp\{\pm i(\omega_{\rm L}-\omega_{21})t\}$ und tragen kaum zur Kopplung der beiden Zustände bei. Sie können daher vernachlässigt werden (engl. *rotating-wave approximation*). Führt man noch die Verstimmung ein, also die Differenz aus der Frequenz des Lichtes und der Übergangsfrequenz, $\delta = \omega_{\rm L} - \omega_{21}$, ergibt sich

$$\dot{c}_1(t) = i \frac{\Omega_0}{2} e^{i\delta t} c_2(t),$$

$$\dot{c}_2(t) = i \frac{\Omega_0}{2} e^{-i\delta t} c_1(t).$$
(2.12)

Definiert man nun neue Koeffizienten,

$$\tilde{c}_{1}(t) = c_{1}(t) e^{-i\delta t/2},
\tilde{c}_{2}(t) = c_{2}(t) e^{i\delta t/2},$$
(2.13)

welche die zeitabhängigen, von der Verstimmung δ abhängigen Terme in Gleichung (2.12) kompensieren, ergibt sich in diesem mit der Frequenz $\omega_{\rm L}$ rotierenden Bezugssystem folgendes Differentialgleichungssystem für die neuen Koeffizienten

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ \tilde{c}_2(t) \end{pmatrix} = \frac{\mathrm{i}}{2} \begin{pmatrix} -\delta & \Omega_0 \\ \Omega_0 & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ \tilde{c}_2(t) \end{pmatrix} .$$
(2.14)

Rabioszillationen: Dieses Differentialgleichungssystem kann man nun für verschiedene Fälle betrachten. Zunächst ist es naheliegend, die Dynamik bei resonanter Atom– Photon Kopplung zu lösen. Dazu setzt man den Verstimmungsparameter δ in Gleichung (2.12) Null. Nochmaliges Ableiten dieser Gleichung und rekursives Einsetzen führt zur Entkopplung des Systems,

$$\ddot{\tilde{c}}_i(t) = -\frac{\Omega_0^2}{4} \tilde{c}_i(t), \qquad i \in \{1, 2\}.$$
(2.15)

Die Gleichungen (2.15) lassen sich leicht lösen,

$$\tilde{c}_1(t) = \cos(\Omega_0/2t) \text{ und } \tilde{c}_2(t) = i\sin(\Omega_0/2t),$$
 (2.16)

wobei die Anfangsbedingungen $\tilde{c}_1(0) = 1$ und $\tilde{c}_2(0) = 0$ vorausgesetzt wurden. Dies ist gleichbedeutend mit der Aussage, dass sich das Atom zum Zeitpunkt t = 0 im Zustand $|1\rangle$ befindet. Die Besetzung des Grundzustandes und des angeregten Niveaus erhält man aus den Gleichungen (2.16), indem man das Absolutquadrat der Ausdrücke für die Koeffizienten bildet:

$$\begin{aligned} |\tilde{c}_1(t)|^2 &= \cos^2(\Omega_0 t/2) &= \frac{1}{2} (1 + \cos(\Omega_0 t)) , \\ |\tilde{c}_2(t)|^2 &= \sin^2(\Omega_0 t/2) &= \frac{1}{2} (1 - \cos(\Omega_0 t)) . \end{aligned}$$
(2.17)

Rabioszillationen mit Verstimmung: Auch der allgemeine Fall mit nicht verschwindender Verstimmung, $\delta \neq 0$, lässt sich exakt lösen. Ohne Rechenweg seien hier die Lösungen angegeben:

$$\tilde{c}_{1}(t) = i\frac{\Omega_{0}}{\Omega}\sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right)\tilde{c}_{2}(0) + \left\{\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) - i\frac{\delta}{\Omega}\sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right)\right\}\tilde{c}_{1}(0),$$

$$\tilde{c}_{2}(t) = i\frac{\Omega_{0}}{\Omega}\sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right)\tilde{c}_{1}(0) + \left\{\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) + i\frac{\delta}{\Omega}\sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right)\right\}\tilde{c}_{2}(0).$$
(2.18)

Hierin ist

$$\Omega = \sqrt{\Omega_0^2 + \delta^2} \tag{2.19}$$

die verallgemeinerte Rabifrequenz.

Mit den speziellen Anfangswertbedingungen $\tilde{c}_1(0) = 1$ und $\tilde{c}_2(0) = 0$, die einer anfänglichen Grundzustandsbesetzung entsprechen, ergibt sich eine Zeitentwicklung des angeregten Zustands

$$\left|\tilde{c}_{2}(t)\right|^{2} = \frac{\Omega_{0}^{2}}{\Omega^{2}}\sin^{2}\left(\frac{\Omega}{2}t\right) = \frac{\Omega_{0}^{2}}{2\Omega^{2}}\left(1-\cos(\Omega t)\right), \qquad (2.20)$$

die für verschiedene Werte der Verstimmung in Abbildung 2.5 dargestellt ist. Man erkennt, dass mit zunehmender Verstimmung die Amplitude abnimmt und somit die Besetzung des angeregten Zustandes immer unwahrscheinlicher wird und sich gleichzeitig die zugehörige Frequenz erhöht.



Abbildung 2.5: Zeitliche Veränderung der Besetzung des angeregten Zustands für verschiedene Werte der Verstimmung δ mit der Rabifrequenz $\Omega_0 = 1$.

2.2.2.4 Raman–Übergang

Ein Raman–Übergang ist ein spezieller Zwei–Photonen–Übergang unter dem Einfluss zweier Laser mit den Frequenzen ω_1 und ω_2 . Er beschreibt die Wechselwirkung eines Atoms mit dem durch die Laser generierten elektrischen Feld,

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{L1} \cos(\omega_{L1} t) + \mathbf{E}_{L2} \cos(\omega_{L2} t).$$
(2.21)

Der Übergang zwischen den atomaren Zuständen $|a\rangle$ und $|b\rangle$ erfordert einen dritten Zwischenzustand, der hier mit $|z\rangle$ bezeichnet wird (siehe Abb. 2.6). Es sei darauf hingewiesen, dass es sich bei diesem Übergang nicht um zwei aufeinanderfolgende Einzelphotonen-Übergänge handelt, da das Atom nur virtuell den Zwischenzustand $|z\rangle$



Abbildung 2.6: Raman–Übergang (Zwei–Photonen–Übergang) zwischen den Hyperfeinzuständen $|a\rangle$ und $|b\rangle$ via Zwischenzustand $|z\rangle$ mit den Laserfrequenzen ω_{L1} und ω_{L2} , den Verstimmungen Δ bzgl. Zustand $|z\rangle$ und δ bzgl. Zustand $|b\rangle$ sowie der effektiven Rabifrequenz $\Omega_{ab}^{(eff)}$.

einnimmt [27]. Die effektive Rabifrequenz berechnet sich in zweiter Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie zu

$$\Omega_{ab}^{(\text{eff})} = \frac{\Omega_{bz} \,\Omega_{za}}{2\Delta} = \frac{\langle b|e\,\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_{\text{L2}}|z\rangle \,\langle z|e\,\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_{\text{L1}}|a\rangle}{2\hbar^2(\omega_z - \omega_a - \omega_{\text{L1}})} \,. \tag{2.22}$$

Sie ergibt sich demnach aus dem Produkt der beiden Rabifrequenzen für die Übergänge $|a\rangle \rightarrow |z\rangle$ sowie $|z\rangle \rightarrow |b\rangle$ [vgl. Gl. (2.9)] geteilt durch den zweifachen Wert der Verstimmung Δ bzgl. des Zwischenzustandes $|z\rangle$ [siehe Abb. 2.6].

2.2.3 Bose–Einstein–Kondensation

Im Jahr 1925 postulierte Albert Einstein [22], dass in einem Gas aus spinlosen nichtwechselwirkenden Bosonen unterhalb einer kritischen Temperatur T_c eine makroskopische Anzahl an Teilchen den energetisch niedrigsten Ein–Teilchen–Zustand einnehmen. Seine Arbeiten basierten dabei auf einer Veröffentlichung von Satyendra Nath Bose [10]. Deren beider Theorie der Kondensation bosonischer Gase wird nachstehend zusammengefasst. Eine ausführliche Herleitung des Phasenübergangs eines nicht wechselwirkenden bosonischen Gases kann in [50] gefunden werden. Weitere Standardwerke, die die Physik der Bose–Einstein–Kondensation ausgedünnter Gase beschreiben, sind [17, 71].

2.2.3.1 Nicht wechselwirkende Bose-Gase

Zur theoretischen Erklärung des Phasenübergangs von einem thermischen Gas, dessen Teilchen der Bose–Statistik genügen, zu einem Bose–Einstein–Kondensat werde angenommen, dass sich das nicht wechselwirkende Bose–Gas in einem Potential $U(\mathbf{r})$ befindet. Darüber hinaus sei zur Beschreibung der thermodynamischen Eigenschaften eine entsprechende großkanonische Zustandssumme gegeben, die den Energie- und Teilchenaustausch mit einem Reservoir erlaubt. Die Besetzungszahl n_k des Zustands k bei gegebener Temperatur T wird durch die Bose–Verteilung,

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{(\epsilon_k - \mu)/k_{\mathrm{B}}T} - 1}, \qquad (2.23)$$

bestimmt, wobei ϵ_k die Energie des Zustands k, μ das chemische Potential und $k_{\rm B}$ die Boltzmannkonstante ist. Bei höheren Temperaturen entspricht diese Verteilung (2.23) der Boltzmann-Verteilung eines klassischen Gases. Das chemische Potential wird durch die Gesamtteilchenanzahl N festgelegt,

$$N = \sum_{k} \langle n_k \rangle \,. \tag{2.24}$$

Wird die Temperatur immer weiter gesenkt, nähert sich das chemische Potential der Grundzustandsenergie ϵ_0 des Potentials $U(\mathbf{r})$ an. Gleichzeitig nimmt die Besetzung des Grundzustands $\langle n_0 \rangle$ so weit zu, dass dafür eine makroskopische Zahl N_0 angenommen werden kann. Die Zahl der Atome, die nicht den Grundzustand besetzen, berechnet sich gemäß

$$N - N_0 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/k_{\rm B}T} - 1} \approx \int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \,\rho(\epsilon) \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)/k_{\rm B}T} - 1} \,.$$
(2.25)

Man beachte, dass der Summationsindex k mit dem Wert Eins beginnt und somit der Grundzustand ausgenommen ist. Die resultierende Summe kann durch ein Integral mit der kontinuierlichen Zustandsdichte $\rho(\epsilon)$ abgeschätzt werden. Dies ist erlaubt, solange die thermische Energie $k_{\rm B}T$ groß gegenüber den Energieabständen zwischen den Zuständen k ist. Da die Zustandsdichte $\rho(\epsilon)$ für $\epsilon \to 0$ gegen Null tendiert, ist der Fehler durch das bei Null beginnende Integrationsintervall vernachlässigbar klein. Die Zustandsdichte ist gegeben durch

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3 r \, \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3 p \, \delta\left(\epsilon - U(\mathbf{r}) - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right) \,,$$

$$= \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \int_{U < \epsilon} \mathrm{d}^3 r \, \sqrt{\epsilon - U(\mathbf{r})} \,.$$
 (2.26)

Für Temperaturen oberhalb der kritischen Temperatur des Phasenübergangs kann die Dichteverteilung $n(\mathbf{r})$ über die Normierungsbedingung $N = \int d^3r n(\mathbf{r})$ bestimmt werden,

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\lambda_{\rm dB}^3} g_{3/2} \left(e^{(\mu - U(\mathbf{r}))/k_{\rm B}T} \right) , \qquad (2.27)$$

mit der thermischen de-Broglie-Wellenlänge

$$\lambda_{\rm dB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m\,k_{\rm B}T}}.$$
(2.28)

Die in Gleichung (2.27) vorkommende polylogarithmische Funktion ist über die unendliche Summe $g_{\alpha}(x) = \sum_{j=1}^{\infty} x^j / j^{\alpha}$ definiert [3]. Sie erreicht einen kritischen Wert, falls ihr Argument gegen Eins tendiert, $(x \to 1)$. Dies entspricht in Gleichung (2.27) dem Annähern des chemischen Potentials μ an den Wert $U(\mathbf{0})$. Erreicht die Phasenraumdichte (PRD) diesen Punkt, erfolgt der Phasenübergang zum Bose-Einstein-Kondensat

PRD =
$$\max\{n(\mathbf{r})\}\lambda_{\rm dB}^3 = g_{3/2}(1) = 2.612...$$
 (2.29)

Betrachtet man das Fallenpotential eines dreidimensionalen harmonischen Oszillators,

$$U(\mathbf{r}) = \frac{m}{2} \left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2 \right) , \qquad (2.30)$$

findet man als Zustandsdichte die Form $\rho(\epsilon) = \epsilon^2/(2(\hbar\bar{\omega})^3)$ mit der geometrisch gemittelten Fallenfrequenz $\bar{\omega} = \sqrt[3]{\omega_x \omega_y \omega_z}$. Für diese Potentialform berechnet sich der Anteil der nicht im Grundzustand befindlichen Atome zu

$$N - N_0 = g_3(1) \left(\frac{k_{\rm B}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3.$$
(2.31)

Am Phasenübergang ist die Anzahl der Atome im Grundzustand noch verschwindend gering und kann auf Null gesetzt werden, $(N_0 = 0)$. Somit ergibt sich aus Gleichung (2.31) die kritische Temperatur

$$T_{\rm c} = \frac{\hbar\bar{\omega}}{k_{\rm B}} \left(\frac{N}{g_3(1)}\right)^{1/3}.$$
(2.32)

Der relative Anteil der Atome im Grundzustand lässt sich nun als Funktion der Temperatur mit Hilfe der Relationen (2.31) und (2.32) aufstellen,

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3.$$
 (2.33)

Die hier dargestellte Behandlung des Phasenübergangs gilt nur für Systeme mit einer hinreichend großen Teilchenzahl $N \to \infty$. Für kleinere Systeme mit einer geringen Teilchenanzahl ist es hingegen nicht möglich, eine definierte kritische Temperatur aufzustellen. In [17, 52] werden die Effekte, die solche Systeme mit beschränkter Teilchenzahl aufweisen, analysiert.

2.2.3.2 Wechselwirkende Bose–Gase

In einem nächsten Schritt wird nun die Wechselwirkung zwischen den Atomen mit in die Theorie eingebunden. Für ausgedünnte Bose–Gase bei tiefen Temperaturen ist es ausreichend, die Wechselwirkung durch paarweise elastische Streuprozesse zu beschreiben. Das Streupotential kann in Form eines Pseudopotentials dargestellt werden,

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g \,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \,. \tag{2.34}$$

Der darin vorkommende Wechselwirkungsparameter $g = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ lässt sich als Funktion der Streulänge der s-Wellen a_s und der atomaren Masse m ausdrücken. Höherenergetische Wellenbeiträge der Streuamplitude können wegen der tiefen Temperaturen vernachlässigt werden. Da sich die Atome des Bose-Einstein-Kondensats alle im gleichen Grundzustand befinden, kann das Kondensat durch eine makroskopische Wellenfunktion $\phi(\mathbf{r})$ beschrieben werden. Die Dynamik dieser Wellenfunktion wird durch eine nichtlineare Schrödingergleichung, die sog. Gross-Pitaevskii-Gleichung, bestimmt,

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\mathbf{r}) + g \left|\phi(\mathbf{r})\right|^2\right) \phi(\mathbf{r}) = \mu \phi(\mathbf{r}).$$
(2.35)

Bei sehr tiefen Temperaturen oder hohen Dichten kann der kinetische Term in Gleichung (2.35) vernachlässigt werden. Die Lösung der Gross-Pitaevskii Gleichung innerhalb dieser sog. Thomas-Fermi Näherung ist algebraisch, und die Dichteverteilung berechnet sich zu

$$n(\mathbf{r}) = |\phi(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{g} (\mu - U(\mathbf{r})).$$
 (2.36)

Gleichung (2.36) zeigt, dass die Dichteverteilung die Form des umgedrehten Potentials, $-U(\mathbf{r})$, annimmt. Beispielsweise wird die Dichteverteilung im Falle eines harmonischen Potentials eine parabolische Gestalt annehmen. Die Ausdehnung des Kondensats reicht in dieser Näherung bis zum Thomas-Fermi-Radius, $r_{\rm TF}$, der sich aus der Nullstelle von Gleichung (2.36) bestimmen lässt. Setzt man also $\mu - U(\mathbf{r}) = 0$, erhält man

$$r_{\text{TF},i}^2 = \frac{2\mu}{m\omega_i^2}$$
 $i \in \{x, y, z\}.$ (2.37)

Unter Verwendung der Normierungsbedingung $N = \int d^3r n(\mathbf{r})$ für eine gegebene Atomanzahl N kann das chemische Potential berechnet werden. Es findet sich

$$\mu = \frac{15^{2/5}}{2} \left(\frac{Na_{\rm s}}{\bar{l}}\right)^{2/5} \hbar\bar{\omega} = \frac{15^{2/5}}{2} (\bar{\omega}^3 \sqrt{m} \,\hbar^2 a_{\rm s} N)^{2/5} \tag{2.38}$$

mit $l_i = \sqrt{\hbar/(m\omega_i)}$ der Ausdehnung der Wellenfunktion im harmonischen Oszillatorpotential in *i*-Richtung, ($i \in \{x, y, z\}$), und $\bar{l} = \sqrt[3]{l_x l_y l_z}$ dem geometrischen Mittel. Das Maximum der Dichteverteilung ergibt sich zu

$$n_0 = \frac{m\bar{\omega}}{8\pi\hbar a_{\rm s}} \left(\frac{15Na_{\rm s}}{\bar{l}}\right)^{2/5}.$$
(2.39)

2.2.4 Atomare Quantenpunkte: Grenzfall des Bose–Hubbard–Modells

Das Bose–Hubbard–Modell beschreibt die Dynamik wechselwirkender Teilchen in optischen Gittern. Ausgehend von einem Viel–Teilchen Hamiltonoperator mit Zwei–Teilchen Wechselwirkung lässt sich das Bose–Hubbard–Modell ableiten. Dieser Hamiltonoperator hat zunächst die Gestalt,

$$\hat{H} = \int \mathrm{d}^3 x \,\hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{x}) + V_F(\mathbf{x})\right) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \frac{g}{2} \int \mathrm{d}^3 x \,\hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \,,$$
(2.40)

wobei $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ den bosonischen Feldoperator für Atome in einem gegebenen inneren Zustand $|b\rangle$ und $V_{\rm F}(\mathbf{x})$ das äußere Fallenpotential bezeichnet, welches sich im Vergleich zum Potential des optischen Gitters $V_0(\mathbf{x})$ räumlich nur schwach verändert. Der Parameter g ist ein Maß für die Stärke der Wechselwirkung zwischen zwei atomaren Teilchen. Im niederenergetischen Fall wird diese interatomare Wechselwirkung durch die Stoßprozesse der s-Wellen-Streuung $a_{\rm s}$ dominiert, die über die Relation $g = 4\pi\hbar^2 a_{\rm s}/m$ mit dem Parameter g verknüpft ist. Unter der Annahme, dass sich alle Teilchen im niedrigsten Energieband befinden, lassen sich die Feldoperatoren in der Basis der Wannierfunktionen $w_0(\mathbf{x})$ entwickeln, $\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \sum_i \hat{b}_i w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$, wobei \hat{b}_i der Vernichtungsoperator für ein Teilchen am Ort \mathbf{x}_i des optischen Gitters ist. Dieser Ausdruck, eingesetzt in Gleichung (2.40), führt auf

$$\hat{H} = -\sum_{i,j} J_{ij} \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} U_{ijkl} \, \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j^{\dagger} \hat{b}_k \hat{b}_l \,.$$
(2.41)

Abkürzend wurden die Größen,

$$J_{ij} = -\int d^3 x \, w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{x}) + V_F(\mathbf{x})\right) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) ,$$

$$U_{ijkl} = g \int d^3 x \, w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_l) ,$$
(2.42)

eingeführt, die das Tunneln bzw. das Springen eines einzelnen Teilchens zwischen den Gitterplätzen, J, und die Wechselwirkungen zwischen zwei Teilchen, U, beschreiben. Nimmt man nun an, dass nur die Tunnelprozesse zwischen benachbarten Gitterplätzen $J_{ii+1} \equiv J$ relevante Beiträge liefern (im Vergleich zu Tunnelvorgängen zu übernächsten oder noch weiter entfernten Gitterplätzen) und auch die Wechselwirkungsbeiträge zwischen unterschiedlichen Gitterplätzen (engl. offsite interaction) vernachlässigbar gegenüber solchen auf dem Gitterplatz $U_{iiii} \equiv U$ (engl. onsite interaction) sind, dann lässt sich bei einem isotropen optischen Gitter der Bose–Hubbard Hamiltonoperator auf die Standardform

$$\hat{H}_{\text{BHM}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_i \hat{b}_i + \sum_i \epsilon_i \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_i$$
(2.43)

bringen. Hierbei steht die Bezeichung $\langle i, j \rangle$ für die Summation über ausschließlich nächste Nachbargitterplätze. Der Zusatzterm $\epsilon_j = V_{\rm F}(\mathbf{x}_j)$ rührt vom äußeren Fallenpotential her. Die Abbildung 2.7 veranschaulicht die durch den Hamiltonoperator $\hat{H}_{\rm BHM}$ beschriebene Physik. Teilchen gewinnen den Energiebetrag J hinzu, indem sie von einem Gitterplatz zum nächsten springen, während zwei Teilchen, die sich den selben Gitterplatz teilen, die Energie U zum System beitragen. Wird die Amplitude des Gitterpotentials erhöht


Abbildung 2.7: Veranschaulichung der verschiedenen Beiträge im Hamiltonoperator des Bose–Hubbard–Modells (2.43).

bzw. die Tiefe der Gitterplätze vergrößert, führt dies zu höheren Barrieren zwischen den Minima des Gitters und somit zu einer Verringerung des Sprungterms J. Gleichzeitig werden zwei Teilchen auf dem selben Gitterplatz durch die steileren Flanken des Potentials näher aneinander gedrückt, was zu einem anwachsenden Abstoßungsterm U führt. Es lassen sich nun anhand des Verhältnisses J/U zwei Grenzfälle studieren:

2.2.4.1 Der Sprungterm J bzw. $J/U \rightarrow \infty$

Dieser Grenzfall beschreibt ein ideales Gas, für welches der Wechselwirkungsterm verschwindet, d.h. U = 0. Der Hamiltonoperator (2.43) lässt sich für periodische Randbedingungen und $\epsilon_i = 0$ leicht diagonalisieren. An der Eigenwertgleichung $E_q^{(0)} = -2J \cos(qa)$ sieht man, dass das niedrigste Blochband die Höhe 4J besitzt. Des Weiteren erkennt man, dass die Energie für q = 0 minimal wird, was der Delokalisierung der Teilchen im Grundzustand über die gesamte Gitterlänge gleichkommt. Der Grundzustand von N Teilchen im Gitter ist somit von der Form $|\Psi_{\rm sf}\rangle \propto (\sum_i \hat{b}_i^{\dagger})^N |\text{vak}\rangle$ mit dem Vakuumzustand $|\text{vak}\rangle$. In diesem Limes ist ein solches System suprafluid (sf) und zeigt langreichweitige Korrelationen in erster Ordnung der Nebendiagonalelemente der Dichtematrix.

2.2.4.2 Die Onsite Wechselwirkung U bzw. $J/U \rightarrow 0$

Im gegensätzlichen Grenzfall $U \gg J$ zerfällt die zuvor genannte langreichweitige Korrelation und stattdessen geht das System in einen isolierenden Zustand über. Systeme in diesem Zustand werden auch als Mott–Isolatoren (MI) (engl. *Mott insulator*) bezeichnet. Solche Zustände wurden erstmals im Jahr 2002 experimentell in einem BEK nachgewiesen [9, 30, 31, 36, 37]. Besitzt das optische Gitter genauso viele Plätze, wie sich Atome im System befinden, lässt sich dieser Zustand schreiben als $|\Psi_{\rm MI}\rangle \propto \prod_j \hat{b}_i^{\dagger} |{\rm vak}\rangle$. Im Fall eines einzelnen Gitterplatzes sowie für verschwindendes J und ein vernachlässigbar kleines äußeres Fallenpotential reduziert sich Gleichung (2.43) auf die Form

$$\hat{H}_{\rm QP} = \frac{U}{2}\hat{n}(\hat{n}-\hat{1}),$$
 (2.44)

die die Energiebeiträge eines einzelnen Quantenpunktes in Abhängigkeit seiner Besetzung durch Atome beschreibt.

2.2.5 Stoßprozesse und Raman Kopplung

Die Kopplung zwischen Atomen im Zustand $|a\rangle$ und solchen im Zustand $|b\rangle$ erfolgt einerseits durch einen Raman–Übergang (siehe Abschnitt 2.2.2.4), andererseits durch Stoßprozesse. Der entsprechende Hamiltonoperator hat dementsprechend die Gestalt,

$$\hat{H}_{ab} = \left\{ -\hbar\delta_0 + g_{ab} \int d\mathbf{x} |\psi_b(\mathbf{x})|^2 \hat{\rho}_a(\mathbf{x}) \right\} \hat{b}^{\dagger} \hat{b}
+ \frac{\hbar\Omega}{2} \int d\mathbf{x} \left(\hat{\Psi}_a(\mathbf{x}) \psi_b(\mathbf{x}) \hat{b}^{\dagger} + \hat{\Psi}_a^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_b^*(\mathbf{x}) \hat{b} \right) ,$$
(2.45)

mit der effektiven Rabifrequenz $\Omega = \Omega_{ab}^{(\text{eff})}$ aus Gleichung (2.22) und der Wellenfunktion $\psi_b(\mathbf{x})$ eines Atoms im Zustand $|b\rangle$ im Quantenpunkt.

2.2.6 Luttinger Flüssigkeitsmodell

Das Luttinger Flüssigkeitsmodell ist der Spezialfall des harmonischen Flüssigkeitsmodell in einer Dimension. Die Anfänge der Theorie zum harmonischen Flüssigkeitsmodell gehen zurück auf die Arbeiten von S. Tomonaga [82], K. B. Efetov und A. I. Larkin [20, 21] sowie D. C. Mattis und E. H. Lieb [68]. Jedoch erst Haldane [48, 49] erkannte, dass sich der in diesen Arbeiten aufgezeigte theoretische Rahmen verwenden lässt, um die lückenlosen, linearen Anregungsspektren vieler eindimensionaler Modelle einheitlich zu beschreiben. Dieser theoretische Rahmenbau definiert eine Universalitätsklasse für Systeme, die Haldane "Luttinger Flüssigkeiten" taufte. Der Name ist in Anlehnung an höherdimensionale, fermionische Systeme gewählt, deren äquivalente Universalitätsklasse die der Fermi Flüssigkeiten ist. Im Kontext eindimensionaler Fermisysteme wird dieser Zugang auch oft mit dem Begriff "Bosonisierung" (engl. bosonization) bezeichnet. Dies liegt nahe, da die niederenergetischen Anregungen der Fermionen als Funktion bosonischer Felder beschrieben werden. Im Gegensatz zu den Fermi Flüssigkeiten lassen sich mit dem Modell der Luttinger Flüssigkeit auch eindimensionale Systeme wechselwirkender Bosonen beschreiben. Daraus resultiert, dass eindimensionale bosonische Systeme auch fermionische Charakteristika zeigen und umgekehrt. Beispielsweise verhalten sich die niederenergetischen Anregungen eines Tonks-Girardeau Gases — dies ist ein kaltes Gas aus bosonischen Atomen, welche undurchdringbar sind und daher stark miteinander wechselwirken — wie diejenigen eines Systems freier Fermionen [32, 62]. Die ersten

Arbeiten, die sich mittels einer mikroskopischen Theorie der Dynamik eines bosonischen Viel-Teilchen-Systems in einer Dimension genähert haben, gehen auf E. H. Lieb und W. Liniger zurück [63],

$$\hat{H}_{LL} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g_1 \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j).$$
(2.46)

Der Lieb-Liniger-Hamiltonoperator besteht aus einem kinetischen Term und der paarweisen Wechselwirkung mit einem Pseudopotential $g_1\delta(x)$. Dieses Modell kann mittels des Bethe Ansatzes gelöst werden. Alle Eigenzustände dieses Viel-Teilchen Problems können in dem Gebiet $0 \le x_1 \le x_2 \le \ldots \le x_N \le L$ als Summe ebener Wellen geschrieben werden,

$$\Psi_{\rm B}(x_1, \dots, x_N) = \sum_P a(P) \exp\left\{i\sum_{l=1}^N k_{P(l)} x_l\right\}, \qquad (2.47)$$

mit N verschiedenen Wellenvektoren k_l . Diese werden mit den Koordinaten x_l in allen N! möglichen Permutationen $k_{P(l)}$ der k_l kombiniert.

Die nun folgende Diskussion ist zunächst unabhängig von den Randbedingungen. Dennoch soll das betrachtete System eine endliche Ausdehnung L besitzen. Die Hamiltonoperatoren werden in zweiter Quantisierung geschrieben. Dies bedeutet, dass das System aus Bosonen durch Feldoperatoren $\hat{\Psi}$ und $\hat{\Psi}^{\dagger}$ beschrieben wird, welche der Vertauschungsrelation

$$\left[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^{\dagger}(x')\right] = \delta(x - x') \tag{2.48}$$

genügen. Alle anderen Kombinationen der Feldoperatoren kommutieren,

$$[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x')] = [\hat{\Psi}^{\dagger}(x), \hat{\Psi}^{\dagger}(x')] = 0.$$
(2.49)

Der Dichteoperator ergibt sich als Produkt der Feldoperatoren,

$$\hat{\rho}(x) = \hat{\Psi}^{\dagger}(x)\hat{\Psi}(x), \qquad (2.50)$$

und die mittlere Grundzustandsdichte ρ_0 wird entweder im großkanonischen Ensemble durch das chemische Potential μ derart festgelegt, dass $\rho_0 = \rho(\mu)$ gilt, oder im kanonischen Ensemble durch die Anzahl N_0 der Teilchen im Grundzustand, so dass sich $\rho_0 = \frac{N_0}{L}$ ergibt. Die Auswirkungen von langwelligen thermischen und quantalen Fluktuationen werden durch die reduzierte Dimensionalität verstärkt. Dies liegt daran, dass bei Einschränkung der bosonischen (und auch fermionischen) Systeme auf eine Dimension alle transversalen Freiheitsgrade verschwinden und Fluktuationen nur noch longitudinal propagieren können. Sie wirken sich somit unmittelbar auf die Dynamik des Systems aus und können nicht wie in höheren Dimensionen vernachlässigt werden. Daher sind auch Beschreibungsansätze wie die Molekularfeldtheorie (engl. mean field theory) in derartigen eindimensionalen Systemen ungeeignet.

Die richtigen Größen zur Beschreibung der niederenergetischen Fluktuationen sind

im Falle von Bosonen das Dichte- und Phasenfeld. Bei tiefen Temperaturen sind die Fluktuationen der Dichte und der Phase lokal klein, was im weiteren Ablauf noch präzisiert wird. Die bosonischen Feldoperatoren lassen sich als Funktion dieser Felder in Form der sog. Phase–Dichte Darstellung schreiben,

$$\hat{\Psi}^{\dagger}(x) = \sqrt{\hat{\rho}(x)} e^{-i\hat{\phi}(x)}. \qquad (2.51)$$

Aus der Kommutatorgleichung (2.48) für die bosonischen Feldoperatoren lässt sich die Vertauschungsrelation für den Dichte- und Phasenoperator bestimmen¹

$$\left[\hat{\rho}(x), \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\phi}(x')}\right] = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\phi}(x)}\delta(x - x'). \qquad (2.52)$$

Um die langwelligen Dichte- und Phasenfluktuationen zu erfassen, ist es zunächst hilfreich, eine Unterscheidung,

$$\hat{\rho}(x) = \hat{\rho}_{<}(x) + \hat{\rho}_{>}(x),$$
(2.53)

$$\hat{\phi}(x) = \hat{\phi}_{<}(x) + \hat{\phi}_{>}(x),$$
(2.54)

in Operatoranteile, $\hat{\rho}_{<}(x)$ und $\hat{\phi}_{<}(x)$, (z. B. grobkörnig gemittelt über Ausdehnungen $\gg \rho_0^{-1}$), die langwellige Fluktuationen beschreiben, und in Anteile, $\hat{\rho}_{>}(x)$ und $\hat{\phi}_{>}(x)$, die für die kurzwelligen Fluktuationen stehen, durchzuführen. Die folgenden Berechnungen beschränken sich auf die langwelligen Fluktuationsbeiträge und es wird, solange keine Verwechslungsgefahr besteht, der entsprechende Anteil des Phasenoperators mit $\hat{\phi}(x)$ bezeichnet. Da bei tiefen Temperaturen die Dichte um den Grundzustandswert ρ_0 fluktuiert, ist es sinnvoll, den Operator $\hat{\Pi}(x)$ einzuführen, der über die Relation

$$\hat{\rho}_{<}(x) = \rho_0 + \hat{\Pi}(x) \quad \text{mit} \quad \rho_0 = \frac{N}{L}$$
 (2.55)

definiert wird. Es kann gezeigt werden, dass die langsamen Felder $\hat{\phi}(x)$ und $\hat{\Pi}(x)$ kanonisch konjugiert sind,

$$\left[\hat{\Pi}(x), \hat{\phi}(x')\right] = \mathrm{i}\delta(x - x'). \qquad (2.56)$$

In einem nächsten Schritt werden nun langwellige Dichtefluktuationen betrachtet, welche gemäß Gleichung (2.55) parametrisiert sind. $\hat{\Pi}(x)$ beschreibt lokal kleine Fluktuationen

$$\hat{\Psi}(x)\hat{\Psi}^{\dagger}(x') - \hat{\Psi}^{\dagger}(x')\hat{\Psi}(x) = \delta(x - x')$$
$$\hat{\Psi}^{\dagger}(x)\hat{\Psi}^{\dagger}(x') - \hat{\Psi}^{\dagger}(x)\hat{\Psi}^{\dagger}(x')\hat{\Psi}(x) = \hat{\Psi}^{\dagger}(x')\delta(x - x')$$
$$\hat{\rho}(x)\hat{\Psi}^{\dagger}(x') - \hat{\Psi}^{\dagger}(x')\hat{\rho}(x) = \hat{\Psi}^{\dagger}(x')\delta(x - x')$$

führen auf die Gleichung

$$\sqrt{\hat{\rho}(x')} \left\{ \left[\hat{\rho}(x), \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\phi}(x')} \right] - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\phi}(x')}\delta(x-x') \right\} = 0$$

aus der die Kommutatorbeziehung (2.52) hervorgeht.

¹Die Äquivalenzumformungen

mit einer Wellenlänge $\gg \rho_0^{-1}$. Dennoch sind damit nicht alle möglichen niederenergetischen Fluktuationen erfasst. Es sind auch niederenergetische Fluktuationen mit Wellenlängen in der Größenordnung $\propto \rho_0^{-1}$ und kleiner denkbar. Dies sieht man zum Beispiel im Fall des Tonks-Girardeau Gases aus undurchdringbaren Bosonen. Die Anregungen eines solchen Systems verhalten sich wie diejenigen eines freien Fermi Gases der selben Dichte. In diesem ist der Impuls des schnellsten Teilchens $p_{\rm F}$ mit der Dichte verknüpft. Es gilt $p_{\rm F} = \pi \rho_0$. Die Fermikante besteht daher aus zwei verschiedenen Punkten mit den Werten $p = \pm p_{\rm F}$. Niederenergetische Anregungen sind nun auf zwei Arten möglich (vgl. Abbildung 2.8): Die Teilchen-Loch-Anregungen an einer der beiden Fermikanten besitzen kleine Impulsänderungen und verursachen daher langwellige Dichtefluktuationen des Systems, während Anregungen von einer Fermikante zur gegenüberliegenden Dichtefluktuationen erzeugen, deren Oszillationen die Form $\cos(2 p_{\rm F} x) = \cos(2\pi \rho_0 x)$ haben. Die langwelligen Dichtefluktuationen, die durch das Feld $\Pi(x)$ beschrieben werden, führen zu kleinen Modifikationen des Fermiimpulses, $\hat{p}_{\rm F}(x) \equiv p_{\rm F} + \pi \Pi(x)$. Dies beeinflusst wiederum kurzwellige Dichtefluktuationen, die nun wie $\cos \left[2 \int^x dx' \hat{p}_{\rm F}(x') \right] = \cos \left[2 \hat{\Theta}(x) \right]$ oszillieren. Dabei wurde das Hilfsfeld $\hat{\Theta}(x)$ eingeführt, definiert durch

$$\frac{1}{\pi}\partial_x \hat{\Theta}(x) = \rho_0 + \hat{\Pi}(x). \qquad (2.57)$$

Integriert man Gleichung (2.57) über das Intervall [0, L] und multipliziert beide Seiten mit π , erhält man einen Ausdruck, der das Hilfsfeld $\hat{\Theta}$ mit der Teilchenzahl N des Systems verknüpft,

$$\Theta(L) - \Theta(0) = \pi N. \qquad (2.58)$$

Dies deutet darauf hin, dass sich bei variierender Gesamtteilchenzahl N auch die Feldfunktion $\hat{\Theta}(x)$ verändert. Der Verlauf von $\hat{\Theta}(x)$ ist auf dem Intervall [0, L] monoton steigend. Man kann den Ort der Teilchen des Systems mit denjenigen Positionen assoziieren, an denen die Funktion $\hat{\Theta}(x)$ ganzzahlige Vielfache von π einnimmt. In gewissem Sinne zählt das Hilfsfeld $\hat{\Theta}(x)$ die Anzahl der Teilchen im Intervall [0, x]. Physikalisch lässt sich also auf Ebene der Feldfunktion $\hat{\Theta}(x)$ jedem Teilchen ein Soliton bzw. Kink zuordnen (siehe Abbildung 2.9). Diese effektive Darstellung des Dichteoperators für geringe Anregungsenergien berücksichtigt demnach die diskrete Natur der Teilchen und kann daher auch kurzwellige niederenergetische Fluktuationen beschreiben. Dies gelingt, indem man den Dichteoperator in der Form

$$\hat{\rho}(x) = \partial_x \hat{\Theta}(x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\hat{\Theta}(x) - n\pi)$$
(2.59)

darstellt. Dies ist äquivalent zur Formulierung des Dichteoperators in erster Quantisierung $\hat{\rho}(x) = \sum_{i=1}^{N} \delta(x - x_i)$ mit dem Verständnis der x_i als Positionsoperator der Teilchensolitonen. Zusätzlich muss die Relation benutzt werden,

$$\delta[f(x)] = \frac{\delta(x - x_0)}{|f'(x_0)|}, \qquad (2.60)$$



Abbildung 2.8: Energetische Darstellung eines Tonks-Girardeau Gases im Grundzustand. Die kurzen Doppelpfeile symbolisieren niederenergetische Anregungen an der Fermikante mit $\Delta p \approx 0$. Der lange Doppelpfeil stellt eine niederenergetische Anregung mit dem Impulsübertrag $\Delta p \approx 2p_{\rm F}$ dar. Es gilt die Einheitenkonvention 2m = 1.

in der $f(x_0) = 0$ einfache Nullstellen sind. Der Ausdruck (2.59) kann mit der Poisson'schen Summenformel [6],

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\hat{\Theta}(x) - n\pi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}z \,\delta(\hat{\Theta}(x) - z\pi) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,2m\pi\,z} = \frac{1}{\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}2m\hat{\Theta}(x)}, \quad (2.61)$$

auf eine nützlichere Form gebracht werden,

$$\hat{\rho}(x) = \frac{1}{\pi} \partial_x \hat{\Theta}(x) \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i 2m \,\hat{\Theta}(x)} = \left[\rho_0 + \hat{\Pi}(x)\right] \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i 2m \,\hat{\Theta}(x)}, \qquad (2.62)$$

die die gewünschten Eigenschaften besitzt. Der Term m = 0 entspricht gerade $\rho_0 + \hat{\Pi}(x)$ und beschreibt langwellige Fluktuationen mit Impulsen $|q| \ll \rho_0$. Die Terme $m = \pm 1$ beschreiben Fluktuationen mit $q \approx \pm 2\pi\rho_0$ und allgemein die Beiträge $m = \pm n$ solche mit $q \approx \pm 2n\pi\rho_0$. Völlig analog folgt die effektive Darstellung des bosonischen Feldoperators (2.51). Man zieht die Wurzel aus Gleichung (2.59) und, unter Verwendung der Relationen $\sqrt{\sum_n \delta(x - x_n)} = \sum_n \sqrt{\delta(x - x_n)}$ sowie $\sqrt{\delta(x)} = A^{-1/2} \delta(x)$, findet man

$$\hat{\Psi}^{\dagger}(x) \approx [\rho_0 + \hat{\Pi}(x)]^{1/2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,2m\,\hat{\Theta}(x)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\phi}(x)} \,.$$
 (2.63)



Abbildung 2.9: Eine mögliche Konfiguration des Hilfsfeldes $\hat{\Theta}(x)$ bei einer Anordnung von sechs Teilchen. Der Höhenunterschied zwischen den Mitten zweier aufeinanderfolgender Plateaus beträgt jeweils π .

Die Relation (2.63) ist bis auf einen Vorfaktor richtig, dessen Wert von der Art abhängt, wie die hochenergetischen Fluktuationen von den langsamen Moden unterschieden und ausintegriert werden. Mit diesen Vorarbeiten kann nun die effektive niederenergetische Dynamik des Systems beschrieben werden. Ausgangspunkt für die folgenden Betrachtungen ist ein allgemeiner Hamiltonoperator für wechselwirkende Bosonen mit einer Zwei-Teilchen-Wechselwirkung, deren Potential nur vom Abstand der beiden Teilchen an den Orten x und x' abhängt, V(x, x') = V(x - x'). Er hat demnach die Gestalt

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L dx \, \left[\partial_x \hat{\Psi}^{\dagger}(x) \right] \left[\partial_x \hat{\Psi}(x) \right] + \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^L dx \, dx' \, V(x - x') \hat{\rho}(x) \hat{\rho}(x') \,. \tag{2.64}$$

Hierbei wird angenommen, dass sich alle Teilchen im Grundzustand des transversal einschließenden Potentials befinden. Diese Situation ist dann anzutreffen, falls das chemische Potential μ kleiner als der Energieabstand benachbarter Zustände im transversalen Potential $\hbar\omega_{\perp}$ ist. Das longitudinal einschließende Potential sei entweder nicht vorhanden (im Fall von periodischen Randbedingungen) oder bestehe aus zwei unendlich hohen Barrieren, die sich an den Orten x = 0 sowie x = L befinden. Durch die Einschränkung der Teilchen auf den transversalen Grundzustand ergibt sich eine eindimensionale effektive Systemdynamik. Bezeichnet man die zum transversalen Grundzustand gehörige Wellenfunktion mit $u_0^{\perp}(y, z)$ kann der dreidimensionale bosonische Feldoperator in der Form

$$\hat{\Psi}_{3\mathrm{d}}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}^{\dagger}(x)u_{0}^{\perp}(y,z) + \hat{\Psi}_{\mathrm{es}}^{\dagger}(\mathbf{r})$$
(2.65)

geschrieben werden, wobei der Feldoperator $\hat{\Psi}_{es}^{\dagger}(\mathbf{r})$ alle Bosonen in höher liegenden transversalen Zuständen umfasst. Bei entsprechend tiefen Temperaturen, $T < \mu < \hbar \omega_{\perp}$,

sind nur virtuelle Übergänge zu den angeregten transversalen Zuständen möglich, was zu einer Renormierung des Wechselwirkungspotentials V(x - x') führt [70]. Die Niederenergie-Beschreibung des Hamiltonoperators (2.64) kann nun gewonnen werden, indem dort die zuvor abgeleiteten Relationen (2.59) und (2.63) eingesetzt werden und man nur die führenden Terme berücksichtigt, die quadratisch in den Ableitungen der langsam variierenden Felder $\hat{\Theta}(x)$ und $\hat{\phi}(x)$ sind. Das Ergebnis dieser Entwicklung hat die Form

$$\hat{H}_{\rm LF} = \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^L \mathrm{d}x \left\{ v_J \left[\partial_x \hat{\phi}(x) \right]^2 + v_N \left[\partial_x \hat{\Theta}(x) - \pi \rho_0 \right]^2 \right\}, \qquad (2.66)$$

wobei die Wechselwirkung durch ein Pseudopotential, $V(x-x') = g \,\delta(x-x')$, modelliert wurde. Bei einer anderen Potentialform, deren Reichweite R größer als der mittlere Teilchenabstand im Grundzustand ist, $(R \gg \rho_0^{-1})$, ergibt sich in Gleichung (2.66) ein modifizierter zweiter Term in der Gestalt

$$\frac{1}{2\pi^2} \int_0^L \int_0^L \mathrm{d}x \,\mathrm{d}x' \,V(x-x') \left(\partial_x \hat{\Theta}(x) - \pi\rho_0\right) \left(\partial_{x'} \hat{\Theta}(x') - \pi\rho_0\right) \,. \tag{2.67}$$

In der Literatur über Bosonisierungstechniken ist es auch üblich, mit dem Feld

$$\hat{\theta}(x) = \hat{\Theta}(x) - \pi \rho_0 x \tag{2.68}$$

und seiner räumlichen Ableitung $\partial_x \hat{\theta}(x) = \pi \hat{\Pi}(x)$ [vgl. (2.57)] zu arbeiten. Mit diesem Feld und den Parametern $K = \sqrt{v_J / v_N}$ sowie $v_s = \sqrt{v_J v_N}$ finden sich zwei weitere Formen für (2.66),

$$\hat{H}_{\rm LF} = \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^L dx \left\{ v_J \left[\partial_x \hat{\phi}(x) \right]^2 + \pi^2 v_N \left[\hat{\Pi}(x) \right]^2 \right\}, \qquad (2.69)$$

$$= \frac{\hbar v_{\rm s}}{2\pi} \int_0^L \mathrm{d}x \left\{ \frac{K}{\pi} \left[\partial_x \hat{\phi}(x) \right]^2 + \frac{\pi}{K} \left[\hat{\Pi}(x) \right]^2 \right\} \,. \tag{2.70}$$

Die Gleichungen (2.66), (2.69) und (2.70) sind äquivalente Darstellungen des Hamiltonoperators einer Luttinger Flüssigkeit.

3 Abbildungsvorschriften und Limitationen

In diesem Kapitel wird eine effektive, niederenergetische Beschreibung des zuvor für das betrachtete System aufgestellten Hamiltonoperators hergeleitet. Das Augenmerk liegt hierbei auf den Anteilen des Hamiltonoperators, welche den Quantenpunkt und dessen Wechselwirkung durch Stoßprozesse mit den Kondensatatomen sowie die per Laser induzierten Übergänge beschreiben. Der das Kondensat beschreibende Anteil liegt bereits in Form einer hydrodynamischen Beschreibung bzw. als Luttinger Flüssigkeit vor, welche die Dynamik für niederenergetische Anregungen wiedergibt. Anschließend wird die Transformation des zuvor hergeleiteten, das experimentelle System beschreibenden Hamiltonoperators auf das Spin–Boson–Modell dargelegt. Zunächst wird jedoch der in Kapitel 2, Absatz 3 vorgestellte hydrodynamische Hamiltonoperator diagonalisiert.

3.1 Diagonalisierung des hydrodyn. Hamiltonoperators

Im Grenzfall langwelliger Anregungen (engl. *long wavelength limit*) verhält sich ein bosonisches Gas in einer Dimension wie eine Luttinger Flüssigkeit. Diese wird durch Haldanes hydrodynamischen Hamiltonoperator aus Gleichung (2.66) beschrieben:

$$\hat{H}_{\rm LF} = \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^L \mathrm{d}x \left\{ v_J \left[\partial_x \hat{\phi}(x) \right]^2 + v_N \left[\partial_x \hat{\Theta}(x) - \pi \rho_a \right]^2 \right\} \,. \tag{3.1}$$

Folgende Transformation bringt $\hat{H}_{\rm LF}$ auf Diagonalgestalt:

$$\hat{\phi}(x) = \hat{\phi}_0 + \frac{\pi x}{L}J + \frac{1}{2}\sum_{q\neq 0} \left|\frac{2\pi}{qLK}\right|^{\frac{1}{2}} e^{-a|q|/2} \operatorname{sgn}(q) \left[e^{iqx}\hat{b}_q + e^{-iqx}\hat{b}_q^{\dagger}\right], \quad (3.2)$$

$$\hat{\Theta}(x) = \hat{\Theta}_0 + \frac{\pi x}{L} N + \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} \left| \frac{2\pi K}{qL} \right|^{\frac{1}{2}} e^{-a|q|/2} \left[e^{iqx} \hat{b}_q + e^{-iqx} \hat{b}_q^{\dagger} \right].$$
(3.3)

Da im Hamiltonoperator (3.1) Ableitungen der Feldoperatoren nach dem Ort auftreten, ist es sinnvoll, diese Ableitungen zunächst zu berechnen. Mit $\rho_a = \frac{N_0}{L}$ folgt:

$$\partial_x \hat{\phi}(x) = \frac{\pi}{L} J + \frac{i}{2} \sum_{q \neq 0} \left| \frac{2\pi q}{LK} \right|^{\frac{1}{2}} e^{-a|q|/2} \left[e^{iqx} \hat{b}_q - e^{-iqx} \hat{b}_q^{\dagger} \right], \qquad (3.4)$$

$$\partial_x \hat{\Theta}(x) - \pi \rho_a = \frac{\pi}{L} (N - N_0) + \frac{i}{2} \sum_{q \neq 0} \left| \frac{2\pi q K}{L} \right|^{\frac{1}{2}} \operatorname{sgn}(q) \mathrm{e}^{-a|q|/2} \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} \hat{b}_q - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx} \hat{b}_q^{\dagger} \right] . (3.5)$$

Daraus ergeben sich die quadrierten Ausdrücke,

$$\left[\partial_x \hat{\phi}(x)\right]^2 = \left(\frac{\pi}{L}J\right)^2 + \mathcal{O}(e^{\pm iqx}) - \frac{1}{4} \sum_{q,p\neq 0} \frac{2\pi}{LK} |qp|^{1/2} e^{-a\frac{|q|+|p|}{2}} \times \left[e^{iqx} \hat{b}_q - e^{-iqx} \hat{b}_q^{\dagger}\right] \left[e^{ipx} \hat{b}_p - e^{-ipx} \hat{b}_p^{\dagger}\right],$$
(3.6)

und,

$$\left[\partial_x \hat{\Theta}(x) - \pi \rho_a\right]^2 = \frac{\pi^2}{L^2} \left(N - N_0\right)^2 + \mathcal{O}(e^{\pm iqx}) - \frac{1}{4} \sum_{q,p \neq 0} \frac{2\pi K}{L} |qp|^{1/2} \operatorname{sgn}(q) \operatorname{sgn}(p) \\ \times e^{-a\frac{|q|+|p|}{2}} \left[e^{iqx} \hat{b}_q - e^{-iqx} \hat{b}_q^{\dagger}\right] \left[e^{ipx} \hat{b}_p - e^{-ipx} \hat{b}_p^{\dagger}\right].$$

$$(3.7)$$

Integriert man nun diese Ausdrücke von 0 bis L, $(\int_0^L dx \dots)$, sieht man zunächst, dass die Terme von Ordnung $O(e^{\pm iqx})$ verschwinden¹, i. e.:

$$\int_{0}^{L} \mathrm{d}x \, \left[\partial_{x} \hat{\phi}(x)\right]^{2} = \frac{\pi^{2}}{L} J^{2} + 0 - \frac{1}{4} \sum_{q, p \neq 0} \frac{2\pi}{LK} |qp|^{1/2} \,\mathrm{e}^{-a\frac{|q|+|p|}{2}} \times L \left[\delta_{p,-q} \hat{b}_{q} \hat{b}_{p} - \delta_{p,q} \hat{b}_{q} \hat{b}_{p}^{\dagger} - \delta_{p,q} \hat{b}_{q}^{\dagger} \hat{b}_{p} + \delta_{p,-q} \hat{b}_{q}^{\dagger} \hat{b}_{p}^{\dagger}\right] .$$
(3.8)

Die Auswertung der Deltafunktionen in der Doppelsumme liefert:

$$\int_{0}^{L} \mathrm{d}x \, \left[\partial_{x}\hat{\phi}(x)\right]^{2} = \frac{\pi^{2}}{L}J^{2} - \frac{\pi}{2K}\sum_{q\neq 0}|q|\,\mathrm{e}^{-a|q|}\left[\hat{b}_{q}\hat{b}_{-q} - \hat{b}_{q}\hat{b}_{q}^{\dagger} - \hat{b}_{q}^{\dagger}\hat{b}_{q} + \hat{b}_{q}^{\dagger}\hat{b}_{-q}^{\dagger}\right]\,,\qquad(3.9)$$

Analog berechnet sich der Ausdruck:

$$\int_{0}^{L} \mathrm{d}x \, \left[\partial_{x}\hat{\Theta}(x) - \pi\rho_{a}\right]^{2} = \frac{\pi^{2}}{L} \left(N - N_{0}\right)^{2} + 0 - \frac{1}{4} \sum_{q,p\neq 0} \frac{2\pi K}{L} |qp|^{1/2} \operatorname{sgn}(q) \operatorname{sgn}(p) \\ \times \operatorname{e}^{-a\frac{|q|+|p|}{2}} L\left[\delta_{p,-q}\hat{b}_{q}\hat{b}_{p} - \delta_{p,q}\hat{b}_{q}\hat{b}_{p}^{\dagger} - \delta_{p,q}\hat{b}_{q}^{\dagger}\hat{b}_{p} + \delta_{p,-q}\hat{b}_{q}^{\dagger}\hat{b}_{p}^{\dagger}\right].$$
(3.10)

Somit ergibt sich für Gleichung (3.10) unter Berücksichtigung der Relation,

$$\operatorname{sgn}(q)\operatorname{sgn}(\pm q) = \pm 1$$
 für $q \neq 0$, (3.11)

und nach Summation über p die Darstellung,

$$\int_{0}^{L} \mathrm{d}x \, \left[\partial_x \hat{\Theta}(x) - \pi \rho_a \right]^2 = \frac{\pi^2}{L} \left(N - N_0 \right)^2 + \frac{\pi K}{2} \sum_{q \neq 0} |q| \, \mathrm{e}^{-a|q|} \\ \times \left[\hat{b}_q \hat{b}_{-q} + \hat{b}_q \hat{b}_q^{\dagger} + \hat{b}_q^{\dagger} \hat{b}_q + \hat{b}_q^{\dagger} \hat{b}_{-q}^{\dagger} \right] \,.$$
(3.12)

¹Mit $q = \frac{2\pi}{L} n$ und $n \in \mathbb{N}$ folgt:

$$\int_{0}^{L} \mathrm{d}x \, \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}qx} = \frac{1}{\pm \mathrm{i}q} (\underbrace{\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}qL}}_{=1} - 1) = 0 \, .$$

Mit $K = \sqrt{\frac{v_J}{v_N}}$ und $v_s = \sqrt{v_J v_N}$ lässt sich nun das Integral (3.1) berechnen. Man erhält:

$$\hat{H}_{\rm LF} = \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^L dx \left\{ v_J \left[\partial_x \hat{\phi}(x) \right]^2 + v_N \left[\partial_x \hat{\Theta}(x) - \pi \rho_a \right]^2 \right\} ,$$

$$= \frac{\hbar}{2\pi} \left\{ v_J \frac{\pi^2}{L} J^2 + v_N \frac{\pi^2}{L} \left(N - N_0 \right)^2 + \pi v_{\rm s} \sum_{q \neq 0} |q| \, \mathrm{e}^{-a|q|} \left[\hat{b}_q \hat{b}_q^\dagger + \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q \right] \right\} .$$
(3.13)

Im Limes *a* gegen Null und mit $\omega(q) = v_s |q|$ sowie der Kommutatorrelation $[\hat{b}_q, \hat{b}_p^{\dagger}] = \delta_{q,p}$ erhält man die Diagonalgestalt,

$$\hat{H}_{\rm LF} = \sum_{q \neq 0} \hbar \omega(q) \hat{b}_q^{\dagger} \hat{b}_q + \frac{\hbar \pi}{2L} \left(v_J J^2 + v_N (N - N_0)^2 \right) + \text{konstante Terme} \,. \tag{3.14}$$

3.2 Effektiver Hamiltonoperator für $\hat{H}_b + \hat{H}_{ab}$

In Kapitel 2 wurden die Grundlagen für die physikalische Beschreibung der verschiedenen Beiträge zum Hamiltonoperator des Gesamtsystems gelegt. Für die Summe der Operatoren $\hat{H}_b + \hat{H}_{ab}$, die in ihren Gleichungen (2.44) [\hat{H}_b , dort jedoch mit $\hat{H}_{\rm QP}$ bezeichnet] und (2.45) [\hat{H}_{ab}] eine allgemeine, noch für alle Energieskalen gültige Form aufweisen, soll hier nun eine vereinfachte Darstellung gefunden werden, die das Systemverhalten in einem niedrigen Energieregime, wie es hier im experimentellen Aufbau bei tiefen Temperaturen anzutreffen ist, gerecht wird. Zunächst soll für die aus den Gleichungen (2.44) und (2.45) bestehende Form,

$$\hat{H}_{b} + \hat{H}_{ab} = \left\{ -\hbar\delta_{0} + g_{ab} \int d\mathbf{x} |\psi_{b}(\mathbf{x})|^{2} \hat{\rho}_{a}(\mathbf{x}) \right\} \hat{b}^{\dagger} \hat{b} + \frac{U_{bb}}{2} \hat{b}^{\dagger} \hat{b}^{\dagger} \hat{b} \hat{b} + \frac{\hbar\Omega}{2} \int d\mathbf{x} \left(\hat{\Psi}_{a}(\mathbf{x}) \psi_{b}(\mathbf{x}) \hat{b}^{\dagger} + \hat{\Psi}_{a}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{b}^{*}(\mathbf{x}) \hat{b} \right) ,$$

$$(3.15)$$

die abkürzende Schreibweise,

$$\hat{H}_{b} + \hat{H}_{ab} = A\hat{b}^{\dagger}\hat{b} + \frac{U_{bb}}{2}\hat{b}^{\dagger}\hat{b}^{\dagger}\hat{b}\hat{b} + \frac{\hbar\Omega}{2}\left(C\hat{b}^{\dagger} + C^{*}\hat{b}\right), \qquad (3.16)$$

eingeführt werden. Hierbei stehen die Platzhalter für,

$$A = -\hbar \delta_0 + g_{ab} \int d\mathbf{x} \, \left| \psi_b(\mathbf{x}) \right|^2 \hat{\rho}_a(\mathbf{x}) \,, \qquad (3.17)$$

$$C = \int d\mathbf{x} \,\hat{\Psi}_a(\mathbf{x}) \psi_b(\mathbf{x}) \,. \tag{3.18}$$

Die Idee besteht nun darin, die Wirkung einer kleinen Störung durch einen effektiven Hamiltonoperator zu beschreiben. Dazu unterteilt man die Operatoren

$$\hat{H}_b + \hat{H}_{ab} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \tag{3.19}$$

in ein ungestörtes System \hat{H}_0 und einen Störungsoperator \hat{V} mit Entwicklungsparameter λ :

$$\hat{H}_{0} = A\hat{b}^{\dagger}\hat{b} + \frac{U_{bb}}{2}\hat{b}^{\dagger}\hat{b}^{\dagger}\hat{b}\hat{b}, \qquad (3.20)$$

$$\hat{V} = C\hat{b}^{\dagger} + C^*\hat{b}, \qquad \lambda = \frac{\hbar\Omega}{2}.$$
(3.21)

Es gilt $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$ mit den Energieeigenwerten $E_0 = 0$, $E_1 = A$ und $E_2 = 2A + U_{bb}$. Der Besetzungszahloperator $\hat{n} = \hat{b}^{\dagger}\hat{b}$ erfüllt die Eigenwertgleichung $\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle$. Mit dem Kommutator $[\hat{b}, \hat{b}^{\dagger}] = \hat{1}$ kann das Operatorprodukt, das die Besetzung des Quantenpunktes beschreibt, wieder als Funktion des Besetzungszahloperators \hat{n} geschrieben werden,

$$\hat{b}^{\dagger}\hat{b}^{\dagger}\hat{b}\hat{b} = \hat{b}^{\dagger}(\hat{b}\hat{b}^{\dagger} - \hat{1})\hat{b} = \hat{b}^{\dagger}\hat{b}(\hat{b}^{\dagger}\hat{b} - \hat{1}) = \hat{n}(\hat{n} - \hat{1}).$$
(3.22)

Mit den in [14, 29] hergeleiteten Methoden, lässt sich die Wirkung der Störung, entwickelt bis zur zweiten Ordnung in λ , in Form eines effektiven Hamiltonoperators darstellen,

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_0 \hat{P}_{(0,1)} + \lambda \hat{P}_{(0,1)} \hat{V} \hat{P}_{(0,1)} + \frac{\lambda^2}{2} \hat{P}_{(0,1)} \left[i \hat{S}_1, \hat{V} \right] \hat{P}_{(0,1)} .$$
(3.23)

Hierin ist $\hat{P}_{(0,1)} = |0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1|$ der Projektionsoperator auf den Hilbertraum, der durch die Ketvektoren $|0\rangle$ und $|1\rangle$ aufgespannt wird. Der erste Term auf der rechten Seite der Gleichung (3.23) entspricht dem Beitrag des ungestörten Systems zum effektiven Hamiltonoperator. Er berechnet sich gemäß

$$\hat{H}_{0}\hat{P}_{(0,1)} = \left(A\hat{n} + \frac{U_{bb}}{2}\hat{n}(\hat{n} - \hat{1})\right) \left(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|\right) = A|1\rangle\langle 1| .$$
(3.24)

Dieses Ergebnis zeigt, dass die Abstoßungsenergie des Quantenpunktes U_{bb} im eingeschränkten Hilbertraum keinen Beitrag liefert, da diese erst für Zustände $|n\rangle$ mit $n \ge 2$ von Null verschieden ist. Daher lässt sich das Ergebnis (3.24) auf die Form

$$\hat{H}_{0}\hat{P}_{(0,1)} = A \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = A \hat{n}|_{\mathcal{H}\{|0\rangle,|1\rangle\}}$$
(3.25)

bringen. Hierbei soll die Symbolik $\hat{O}|_{\mathcal{H}\{|0\rangle,|1\rangle\}}$ dafür stehen, dass die Wirkung des Operators \hat{O} auf den Hilbertraum beschränkt ist, der durch die Vektoren $|0\rangle$ und $|1\rangle$ aufgespannt wird. Der Beitrag zum effektiven Hamiltonoperator in erster Ordnung des Störungsparameters λ berechnet sich in analoger Weise:

$$\hat{P}_{(0,1)}\hat{V}\hat{P}_{(0,1)} = \hat{P}_{(0,1)}\left(C\hat{b}^{\dagger} + C^{*}\hat{b}\right)\left(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|\right)
= \hat{P}_{(0,1)}\left(C|1\rangle\langle 0| + \sqrt{2}C|2\rangle\langle 1| + C^{*}|0\rangle\langle 1|\right)
= C|1\rangle\langle 0| + C^{*}|0\rangle\langle 1| = C\hat{b}^{\dagger}|_{\mathcal{H}\{|0\rangle,|1\rangle\}} + C^{*}\hat{b}|_{\mathcal{H}\{|0\rangle,|1\rangle\}}.$$
(3.26)

Die Korrekturen in zweiter Ordnung,

$$\hat{P}_{(0,1)}[i\hat{S}_1,\hat{V}]\hat{P}_{(0,1)}, \qquad (3.27)$$

ergeben sich aus den vier Beiträgen der Matrixelemente

$$\langle n|[i\hat{S}_1,\hat{V}]|m\rangle = \sum_p \langle n|\hat{V}|p\rangle\langle p|\hat{V}|m\rangle \left(\frac{1}{E_n - E_p} + \frac{1}{E_m - E_p}\right), \qquad (3.28)$$

wobei hier $n, m \in \{0, 1\}$ und $p \in \{2, 3, 4, ...\}$ ist. Das Matrixelement für m = n = 0,

$$\langle 0|[i\hat{S}_1,\hat{V}]|0\rangle = 2\sum_{p=2}^{\infty} \frac{|\langle 0|\hat{V}|p\rangle|^2}{E_0 - E_p} = 0,$$
 (3.29)

verschwindet, da die Störung \hat{V} nur Zustandsänderungen mit $\Delta n = 1$ ermöglicht. Dies bedeutet, dass für $p \geq 2$ das Matrixelement $\langle 0|\hat{V}|p\rangle$ gleich Null ist, da $\hat{V}|p\rangle = C\sqrt{p+1}|p+1\rangle + C^*\sqrt{p}|p-1\rangle$ gilt. Aus dem gleichen Grund tragen auch die Matrixelemente

$$\langle 0|[i\hat{S}_{1},\hat{V}]|1\rangle = \sum_{p=2}^{\infty} \underbrace{\langle 0|\hat{V}|p\rangle}_{=0} \langle p|\hat{V}|1\rangle \left(\frac{1}{E_{0}-E_{p}}+\frac{1}{E_{1}-E_{p}}\right) = 0$$
(3.30)

und

$$\langle 1|[i\hat{S}_{1},\hat{V}]|0\rangle = \sum_{p=2}^{\infty} \langle 1|\hat{V}|p\rangle \underbrace{\langle p|\hat{V}|0\rangle}_{=0} \left(\frac{1}{E_{1}-E_{p}} + \frac{1}{E_{0}-E_{p}}\right) = 0$$
(3.31)

nicht zu den Korrekturen zweiter Ordnung bei. Alleinig für m = n = 1,

$$\langle 1|[i\hat{S}_{1},\hat{V}]|1\rangle = 2\frac{|\langle 1|\hat{V}|2\rangle|^{2}}{E_{1}-E_{2}} + 2\sum_{p=3}^{\infty} \underbrace{\frac{|\langle 1|\hat{V}|p\rangle|^{2}}{E_{1}-E_{p}}}_{p=3}$$

$$= 2\frac{|\langle 1|\hat{V}|2\rangle|^{2}}{E_{1}-E_{2}},$$

$$(3.32)$$

ergibt sich für p = 2 eine Kopplung mit einem virtuell doppelt besetzten Quantenpunkt. Dieser Beitrag berechnet sich zu

$$\langle 1|\hat{V}|2\rangle = C \underbrace{\langle 1|b^{\dagger}|2\rangle}_{= \sqrt{2}C^{*}}^{=0} + C^{*} \underbrace{\langle 1|b|2\rangle}_{=\sqrt{2}C^{*}}^{=\sqrt{2}}$$
(3.33)

und führt, eingesetzt in Gleichung (3.32), auf

$$\langle 1|[i\hat{S}_1,\hat{V}]|1\rangle = -\frac{4|C|^2}{U_{bb}+A}.$$
 (3.34)

Hierbei wurde der Nenner bereits ausgewertet. Die Differenz der Energieeigenwerte beträgt $E_1 - E_2 = -(U_{bb} + A)$. Die Korrekturen in zweiter Ordnung lauten demnach

$$\hat{P}_{(0,1)}[i\hat{S}_1,\hat{V}]\hat{P}_{(0,1)} = -\frac{4|C|^2}{U_{bb}+A} \begin{pmatrix} 0 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -\frac{4|C|^2}{U_{bb}+A} \hat{n}|_{\mathcal{H}\{|0\rangle,|1\rangle\}}.$$
(3.35)

Die Konstruktion eines effektiven Hamiltonoperators \hat{H}_{eff} , der im eingeschränkten Hilbertraum die selben Energieeigenwerte besitzt, die der ursprüngliche Hamiltonoperator störungstheoretisch bis zur zweiten Ordnung liefert, führt auf den Ausdruck

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \left(A - \frac{2\lambda^2 |C|^2}{U_{bb} + A}\right) \hat{b}^{\dagger} \hat{b} + \lambda \left(C \, \hat{b}^{\dagger} + C^* \, \hat{b}\right).$$
(3.36)

Da dieser eingeschränkte Hilbertraum dem eines Zweizustandssystems entspricht, lassen sich alle Operatoren der effektiven Beschreibung (3.36) durch Paulimatrizen ausdrücken. Die Ersetzung der Leiteroperatoren in Quasi–Spin–Schreibweise lautet:

$$\hat{b}^{\dagger} \rightarrow \hat{\sigma}_{+}, \qquad \hat{b} \rightarrow \hat{\sigma}_{-}, \qquad \hat{b}^{\dagger}\hat{b} \rightarrow \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_{z}+\hat{1}).$$
 (3.37)

Dies eingesetzt in Gleichung (3.36) ergibt

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \left(A - \frac{2\lambda^2 |C|^2}{U_{bb} + A}\right) \frac{\hat{\sigma}_z}{2} + \lambda (C\hat{\sigma}_+ + C^*\hat{\sigma}_-) + \left(A - \frac{2\lambda^2 |C|^2}{U_{bb} + A}\right) \frac{1}{2}.$$
 (3.38)

Mit

$$\hat{\rho}_a(\mathbf{x}) = \rho_a + \hat{\Pi}(\mathbf{x}) \tag{3.39}$$

vereinfacht sich die zuvor definierte Größe A in Gleichung (3.17) auf

$$A = -\hbar\delta_0 + g_{ab}\rho_a \underbrace{\int \mathrm{d}\mathbf{x} \, |\psi_b(\mathbf{x})|^2}_{\approx 1} + g_{ab} \underbrace{\int \mathrm{d}\mathbf{x} \, \hat{\Pi}(\mathbf{x}) \, |\psi_b(\mathbf{x})|^2}_{\approx \hat{\Pi}(\mathbf{0}) \int \mathrm{d}\mathbf{x} \, |\psi_b(\mathbf{x})|^2 \approx \hat{\Pi}(\mathbf{0})} . \tag{3.40}$$

Die letzten beiden Umformungen sind gültig, falls $|\mathbf{q}| l_b \ll 1$. Hierin steht \mathbf{q} für den Wellenvektor der phononischen Anregungen des Bose-Einstein-Kondensats und l_b für die Ausdehnung der Grundzustandswellenfunktion des Quantenpunktes. In gleicher Weise reduziert sich die in Gleichung (3.18) definierte Größe C zu

$$C = \int d\mathbf{x} \,\hat{\Psi}_{a}(\mathbf{x})\psi_{b}(\mathbf{x}) \approx \hat{\Psi}(\mathbf{0}) \underbrace{\int d\mathbf{x}\psi_{b}(\mathbf{x})}_{\propto\sqrt{l_{b}}}$$
$$\approx \underbrace{\sqrt{\rho_{a}l_{b}}}_{=\sqrt{n_{b}}} e^{-i\hat{\phi}(\mathbf{0})} + \frac{1}{2} \underbrace{\sqrt{\frac{l_{b}}{\rho_{a}}}}_{\ll1} \hat{\Pi}(\mathbf{0}) e^{-i\hat{\phi}(\mathbf{0})}$$
$$\approx \sqrt{n_{b}} e^{-i\hat{\phi}(\mathbf{0})}.$$
(3.41)

Analog erhält man $C^* \approx \sqrt{n_b} \exp\{i\hat{\phi}(\mathbf{0})\}$. Diese Abschätzung basiert auf einer Näherung des Feldoperators Ψ^{\dagger} [vgl. Gl. (2.63)],

$$\hat{\Psi}_{a}^{\dagger}(\mathbf{x}) \approx \hat{\rho}_{a}^{1/2}(\mathbf{x}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\phi}(\mathbf{x})} \approx \left(\sqrt{\rho_{a}} + \frac{1}{2} \frac{\hat{\Pi}(\mathbf{x})}{\sqrt{\rho}}\right) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\phi}(\mathbf{x})} \,. \tag{3.42}$$

Sei die Abstoßungsenergie U_{bb} deutlich größer als $A, U_{bb} \gg A$, dann führt dies zusammen mit $\lambda = \hbar \Omega/2$ auf

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \left\{ -\left(\hbar\delta_0 - g_{ab}\rho_a + \frac{\hbar^2\Omega^2 n_b}{2U_{bb}}\right) + g_{ab}\hat{\Pi}(\mathbf{0}) \right\} \frac{\hat{\sigma}_z}{2} + \frac{\hbar\Omega\sqrt{n_b}}{2} \left(\hat{\sigma}_+ e^{-i\hat{\phi}(\mathbf{0})} + \hat{\sigma}_- e^{i\hat{\phi}(\mathbf{0})}\right) .$$
(3.43)

Mit $\Delta \equiv \sqrt{n_b}\Omega$ und $\hbar \delta \equiv \hbar \delta_0 - g_{ab}\rho_a + \frac{(\hbar \Delta)^2}{2U_{bb}}$ folgt schließlich die effektive Darstellung:

$$(\hat{H}_b + \hat{H}_{ab})^{(\text{eff})} = \left(-\hbar\delta + g_{ab}\hat{\Pi}(\mathbf{0})\right)\frac{\hat{\sigma}_z}{2} + \frac{\hbar\Delta}{2}\left(\hat{\sigma}_+ e^{-i\hat{\phi}(\mathbf{0})} + \hat{\sigma}_- e^{i\hat{\phi}(\mathbf{0})}\right).$$
(3.44)

3.3 Abbildung auf das Spin–Boson–Modell

Der Gesamthamiltonoperator setzt sich aus drei Teilen zusammen. Diese beschreiben die Dynamik der das Kondensat bildenden Atome im Hyperfeinzustand $|a\rangle$, die Besetzung des atomaren Quantenpunktes mit Atomen im Hyperfeinzustand $|b\rangle$ sowie die Wechselwirkung (WW) zwischen Kondensat- und Quantenpunktatomen. Der Gesamthamiltonoperator hat also demnach die Gestalt

$$\hat{H}_{\text{System}} = \underbrace{\hat{H}_a}_{\text{BEK}} + \underbrace{\hat{H}_b}_{\text{AQD}} + \underbrace{\hat{H}_{ab}}_{\text{WW}}, \qquad (3.45)$$

dessen Teiloperatoren gemäß den Ergebnissen (3.14) [mit J = 0 und $N = N_0$] und (3.44) die Form,

$$\hat{H}_{a} = \hbar v_{s} \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{q}| \, \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}} \,, \tag{3.46}$$

$$\hat{H}_b + \hat{H}_{ab} = \frac{1}{2} \left(-\hbar\delta + g_{ab}\hat{\Pi}(\mathbf{0}) \right) \hat{\sigma}_z + \frac{\hbar\Delta}{2} \left(\hat{\sigma}_+ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\phi}(\mathbf{0})} + \hat{\sigma}_- \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\phi}(\mathbf{0})} \right) , \qquad (3.47)$$

haben. Hierin bewirken die Operatoren $\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ und $\hat{b}_{\mathbf{q}}$ die Erzeugung bzw. Vernichtung eines Phonons im Kondensat mit Impuls **q**. Der die Dichtefluktuationen beschreibende Operator,

$$\hat{\Pi}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{q}} \left| \frac{\hbar \rho_a \mathbf{q}}{2v_{\mathrm{s}} m V} \right|^{1/2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\mathbf{x}} \left(\hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right) , \qquad (3.48)$$

sowie der die Phasenfluktuationen beinhaltende Operator,

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = i \sum_{|\mathbf{q}|\neq 0} \left| \frac{m v_{\mathrm{s}}}{2\hbar V \rho_a \mathbf{q}} \right|^{1/2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\mathbf{x}} \left(\hat{b}_{\mathbf{q}} - \hat{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right) , \qquad (3.49)$$

lassen sich als Summe über Linearkombinationen gerade dieser Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren schreiben.

Die Abbildung des Systemhamiltonoperators (3.45) auf das Spin–Boson–Modell erfolgt mit Hilfe des unitären Transformationsoperators

$$\hat{S} = \exp\left\{-\alpha\hat{\phi}(\mathbf{0})\right\}, \qquad (3.50)$$

in dessen Ausdruck die Abkürzung $\alpha = i\hat{\sigma}_z/2$ zur Vereinfachung der nachstehenden Berechnungen eingeführt wurde. Diese Umformung entspricht formal einer inversen Polarontransformation (siehe [16, 33, 39]). Die Abbildungs- bzw. Transformationsvorschrift

$$\hat{H}_{\rm SBM} = \hat{S}^{-1} \hat{H}_{\rm System} \hat{S} \tag{3.51}$$

überführt nun den Systemhamiltonoperator auf den Spin–Boson–Hamiltonoperator. In der Folge soll nun explizit gezeigt werden, wie diese Transformation durchzuführen ist. Dies ist wichtig, um die richtigen Größen aus den beiden Modellbeschreibungen miteinander zu identifizieren und auch die Gültigkeitsbereiche der Abbildung zu bestimmen.

3.3.1 Transformation des BEK–Operators H_a

Zunächst wird der Hamiltonoperator, der die Dynamik der Kondensatatome im Zustand $|a\rangle$ beschreibt, transformiert,

$$\hat{S}^{-1}\hat{H}_{a}\hat{S} = \hbar v_{s} \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{q}| \,\hat{S}^{-1}\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}\hat{b}_{\mathbf{q}}\hat{S} = \hbar v_{s} \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{q}| \,(\hat{S}^{-1}\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}\hat{S})(\hat{S}^{-1}\hat{b}_{\mathbf{q}}\hat{S}) \,.$$
(3.52)

Die Auswertung der erweiterten Gleichung (3.52) erfolgt über die Berechnung der transformierten Erzeugungs-, $\hat{S}^{-1}\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}\hat{S}$, und Vernichtungsoperatoren, $\hat{S}^{-1}\hat{b}_{\mathbf{q}}\hat{S}$. Dazu ist es sinnvoll, die Kommutatoren

$$\begin{bmatrix} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}, \hat{S} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}, \exp\left\{-\alpha\hat{\phi}(\mathbf{0})\right\} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[-\alpha\hat{\phi}(\mathbf{0})]^n}{n!} \end{bmatrix} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha)^n \left[\hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}, [\hat{\phi}(\mathbf{0})]^n\right]}{n!}$$
(3.53)

auszuwerten. Die Klammern im Operator $\hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}$ sollen darauf hinweisen, dass die Berechnung ab Gleichung (3.53) sowohl für $\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ als auch $\hat{b}_{\mathbf{q}}$ gilt. Dies führt auf die Bestimmung von

$$\left[\hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}, \hat{\phi}(\mathbf{0})\right] = \mathrm{i} \sum_{|\mathbf{p}|\neq 0} f(|\mathbf{p}|) \left\{ \left[\hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}, \hat{b}_{\mathbf{p}}\right] - \left[\hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}, \hat{b}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}\right] \right\} = -\mathrm{i} f(|\mathbf{q}|), \qquad (3.54)$$

wobei hier der Vorfaktor aus Gleichung (3.49) durch $f(|\mathbf{q}|) = |\frac{mv_{\rm s}}{2\hbar V \rho_a \mathbf{q}}|^{1/2}$ abgekürzt wurde und die letzte Umformung auf den fundamentalen Eigenschaften der Leiteroperatoren $[\hat{b}_{\mathbf{q}}, \hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger}] = \delta_{p,q}$ und $[\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}, \hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger}] = [\hat{b}_{\mathbf{q}}, \hat{b}_{\mathbf{p}}] = 0$ basiert, welche im Ausdruck

$$\left[\hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}, \left[\hat{\phi}(\mathbf{0})\right]^{n}\right] = -\mathrm{i} \, n \, f(|\mathbf{q}|) [\hat{\phi}(\mathbf{0})]^{n-1} \tag{3.55}$$

mündet. Der Zusammenhang zwischen den Gleichungen (3.54) und (3.55) entspricht formal der Implikation

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{C} \quad \Rightarrow \quad [\hat{A},\hat{B}^n] = n\hat{C}\hat{B}^{n-1}, \qquad (3.56)$$

die gilt, falls $[\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0$ erfüllt ist [66]. Mit $\hat{A} = \hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}, \hat{B} = \hat{\phi}(\mathbf{0})$ und $\hat{C} = -\mathrm{i}f(|\mathbf{q}|)$ ergibt sich wieder Gleichung (3.55). Setzt man dieses Ergebnis nun in (3.53) ein, erhält man

$$\left[\hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)},\hat{S}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha)^n (-\mathrm{i}nf(|\mathbf{q}|))(\hat{\phi}(\mathbf{0}))^{n-1}}{n!} = \mathrm{i}\alpha f(|\mathbf{q}|)\hat{S}, \qquad (3.57)$$

was gleichbedeutend mit der Lösung für die in Gleichung (3.52) vorkommenden Faktoren ist,

$$\hat{S}^{-1}\hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}\hat{S} = i\alpha f(|\mathbf{q}|) + \hat{b}_{\mathbf{q}}^{(\dagger)}.$$
 (3.58)

Damit folgt nun als Ergebnis für die Tranformation von H_a :

$$\hat{S}^{-1}\hat{H}_{a}\hat{S} = \hbar v_{s} \sum_{|\mathbf{q}|\neq0} |\mathbf{q}| \left(i\alpha f(|\mathbf{q}|) + \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \right) \left(i\alpha f(|\mathbf{q}|) + \hat{b}_{\mathbf{q}} \right)
= \hbar v_{s} \sum_{|\mathbf{q}|\neq0} |\mathbf{q}| \left(-\alpha^{2} f^{2}(|\mathbf{q}|) + i\alpha f(|\mathbf{q}|) (\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} + \hat{b}_{\mathbf{q}}) + \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}} \right)
= \hbar v_{s} \sum_{|\mathbf{q}|\neq0} |\mathbf{q}| \left(\frac{1}{4} f^{2}(|\mathbf{q}|) \hat{1} - \frac{\hat{\sigma}_{z}}{2} f(|\mathbf{q}|) (\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} + \hat{b}_{\mathbf{q}}) + \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}} \right).$$
(3.59)

Hierbei wurde im letzten Schritt wieder die Rücksubstitution $\alpha = i\hat{\sigma}_z/2$ vorgenommen. Kompakt lässt sich schreiben:

$$\hat{S}^{-1}\hat{H}_{a}\hat{S} = -\frac{\hbar v_{s}}{2}\hat{\sigma}_{z}\sum_{\mathbf{q}}|\mathbf{q}|f(|\mathbf{q}|)\left(\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}+\hat{b}_{\mathbf{q}}\right) + \hbar v_{s}\sum_{\mathbf{q}}|\mathbf{q}|\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}\hat{b}_{\mathbf{q}} + (\text{konst. Terme})\times\hat{1}.$$
(3.60)

Hierbei wurde zum einen der Teil proportional zur Einheitsmatrix, $\hat{1}$, separiert, da er die Dynamik nicht beeinflusst, und zum anderen die Summationseinschränkung $|\mathbf{q}| \neq 0$ aufgehoben, da der Nullvektor ohnehin keinen Beitrag zur Summe liefert.

3.3.2 Transformation der Operatoren $\hat{H}_b + \hat{H}_{ab}$

In einem nächsten Schritt werden nun die Operatoren $\hat{H}_{\hat{b}} + \hat{H}_{ab}$, die die Dynamik des Quantenpunktes und die Wechselwirkung mit dem Kondensatbad beschreiben, transformiert:

$$\hat{S}^{-1}(\hat{H}_b + \hat{H}_{ab})\hat{S} = \underbrace{\hat{S}^{-1}\left[\left(-\hbar\delta + g_{ab}\hat{\Pi}(\mathbf{0})\right)\frac{\hat{\sigma}_z}{2}\right]\hat{S}}_{\equiv T_1} + \underbrace{\hat{S}^{-1}\left[\frac{\hbar\Delta}{2}\left(\hat{\sigma}_+ e^{-i\hat{\phi}(\mathbf{0})} + \hat{\sigma}_- e^{i\hat{\phi}(\mathbf{0})}\right)\right]\hat{S}}_{\equiv T_2},$$
(3.61)

$$T_1 = \left(-\hbar\delta + g_{ab}\hat{S}^{-1}\hat{\Pi}(\mathbf{0})\hat{S}\right)\frac{\hat{\sigma}_z}{2}, \qquad (3.62)$$

$$T_2 = \frac{\hbar\Delta}{2} \left(\hat{S}^{-1} \hat{\sigma}_+ \hat{S} e^{-i\hat{\phi}(\mathbf{0})} + \hat{S}^{-1} \hat{\sigma}_- \hat{S} e^{i\hat{\phi}(\mathbf{0})} \right) .$$
(3.63)

Das Umgruppieren der Transformationsoperatoren in den Ausdrücken (3.62) und (3.63) im Vergleich zu ihren Definitionen in Gleichung (3.61) ist möglich, da sie mit den entsprechenden Operatoren kommutieren, i.e. $[\hat{\sigma}_z, \hat{S}] = 0$ und $[\exp\{\pm i\hat{\phi}(\mathbf{0})\}, \hat{S}] = 0$. Es gilt nun $\hat{S}^{-1}\hat{\sigma}_{\pm}\hat{S}$ und $\hat{S}^{-1}\hat{\Pi}(\mathbf{0})\hat{S}$ zu bestimmen. Bei der Transformation des Operators der Dichtefluktuationen kann auf die Ergebnisse aus dem vorherigen Abschnitt 3.3.1 zurückgegriffen werden. Konkret führt dies mit Hilfe der Zwischenergebnisse (3.57) bzw. (3.58) und der Notation $g(|\mathbf{q}|) = |\frac{\hbar\rho_a \mathbf{q}}{2v_s mV}|^{1/2}$ auf die transformierte Darstellung:

$$\hat{S}^{-1}\hat{\Pi}(\mathbf{0})\hat{S} = \sum_{\mathbf{q}} g(|\mathbf{q}|) \left(\hat{S}^{-1}\hat{b}_{\mathbf{q}}\hat{S} + \hat{S}^{-1}\hat{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger}\hat{S} \right)$$
(3.64)

$$= \sum_{\mathbf{q}} g(|\mathbf{q}|) \left(i\alpha f(|\mathbf{q}|) + \hat{b}_{\mathbf{q}} + i\alpha f(|-\mathbf{q}|) + \hat{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right)$$
(3.65)

$$= \sum_{\mathbf{q}} g(|\mathbf{q}|) \left(\hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right) + i2\alpha \sum_{\mathbf{q}} g(|\mathbf{q}|) f(|\mathbf{q}|)$$
(3.66)

$$= \hat{\Pi}(\mathbf{0}) - \hat{\sigma}_z \sum_{\mathbf{q}} g(|\mathbf{q}|) f(|\mathbf{q}|) .$$
(3.67)

Für den Ausdruck (3.63) müssen nun die Tranformationen

$$\hat{S}^{-1}\hat{\sigma}_{\pm}\hat{S}\tag{3.68}$$

ausgewertet werden. Hier ist eine direkte Berechnung sinnvoll, da sich die Darstellungen,

$$\hat{\sigma}_{\pm}\hat{S} = \hat{\sigma}_{\pm} \exp\{-i\hat{\sigma}_{z}\hat{\phi}(\mathbf{0})/2\} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{n}\hat{\sigma}_{\pm}\hat{\sigma}_{z}^{n}\hat{\phi}^{n}(\mathbf{0})}{2^{n}n!}, \qquad (3.69)$$

$$\hat{S}^{-1}\hat{\sigma}_{\pm} = \exp\{-\mathrm{i}\hat{\sigma}_{z}\hat{\phi}(\mathbf{0})/2\}\hat{\sigma}_{\pm} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\mathrm{i})^{n}\hat{\sigma}_{z}^{n}\hat{\sigma}_{\pm}\hat{\phi}^{n}(\mathbf{0})}{2^{n}n!}, \qquad (3.70)$$

über die Matrizenrelationen,

$$\hat{\sigma}_{\pm}\hat{\sigma}_z = \mp \hat{\sigma}_{\pm} \quad \text{und} \quad \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_{\pm} = \pm \hat{\sigma}_{\pm}, \qquad (3.71)$$

und den daraus folgenden Gleichungen,

$$\hat{\sigma}_{\pm}\hat{\sigma}_{z}^{n} = (\mp 1)^{n}\hat{\sigma}_{\pm}, \qquad (3.72)$$

$$\hat{\sigma}_z^n \hat{\sigma}_{\pm} = (\pm 1)^n \hat{\sigma}_{\pm}, \qquad (3.73)$$

stark vereinfachen lassen. Setzt man nun die Gleichungen (3.72) und (3.73) in die Ausdrücke (3.69) sowie (3.70) ein, führt dies auf die Relationen

$$\hat{\sigma}_{\pm}\hat{S} = \hat{\sigma}_{\pm}\exp\{\pm i\hat{\phi}(\mathbf{0})/2\}$$
(3.74)

und

$$\hat{S}^{-1}\hat{\sigma}_{\pm} = \hat{\sigma}_{\pm} \exp\{\pm i\hat{\phi}(\mathbf{0})/2\}.$$
 (3.75)

In Kombination von (3.74) und (3.75) erhält man für die Transformationen (3.68):

$$\hat{S}^{-1}\hat{\sigma}_{\pm}\hat{S} = \hat{\sigma}_{\pm}\exp\{\pm i\hat{\phi}(\mathbf{0})\}.$$
(3.76)

Die transformierten Operatoren $\hat{H}_b + \hat{H}_{ab}$ lassen sich nun mit den Zwischenergebnissen (3.67) und (3.76) auf die Gestalt bringen,

$$\hat{S}^{-1}\left(\hat{H}_{\hat{b}}+\hat{H}_{ab}\right)\hat{S} = \frac{\hbar\Delta}{2}\underbrace{\left(\hat{\sigma}_{+}+\hat{\sigma}_{-}\right)}_{=\hat{\sigma}_{x}} + \frac{1}{2}\left(-\hbar\delta + g_{ab}\hat{\Pi}(\mathbf{0})\right)\hat{\sigma}_{z} - \underbrace{\frac{g_{ab}}{2}\hat{\sigma}_{z}\hat{\sigma}_{z}\sum_{\mathbf{q}}g(|\mathbf{q}|)f(|\mathbf{q}|)}_{\propto\hat{\sigma}_{z}\hat{\sigma}_{z}=\hat{1}},$$
(3.77)

Zusammen mit der Transformation für den Anteil der Kondensatatome (3.60) und unter Abzug aller für die Dynamik irrelevanten Beiträge proportional zum Einheitsoperator,

$$\hat{H}_{\rm SBM}' = \hat{S}^{-1} \left(\hat{H}_a + \hat{H}_{\hat{b}} + \hat{H}_{ab} \right) \hat{S} - \text{alle Anteile proportional zu } \hat{1}, \qquad (3.78)$$

findet sich eine Form, die mit dem Spin–Boson–Hamiltonoperator identifiziert werden kann,

$$\hat{H}_{\rm SBM}' = \frac{\hbar\Delta}{2} \hat{\sigma}_x - \frac{\hbar\delta}{2} \hat{\sigma}_z + \sum_{\mathbf{q}} \underbrace{\left(\frac{g_{ab}}{2}g(|\mathbf{q}|) - \frac{\hbar v_{\rm s}}{2} |\mathbf{q}| f(|\mathbf{q}|)\right)}_{=\lambda_{\mathbf{q}}\hbar/2} \left(\hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}\right) \hat{\sigma}_z + \hbar v_{\rm s} \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{q}| \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}} .$$
(3.79)

Darin wird die Kopplungsstärke $\lambda_{\mathbf{q}}$ zwischen bosonischem Bad und Spin bestimmt durch

$$\lambda_{\mathbf{q}} = \frac{g_{ab}}{\hbar} g(|\mathbf{q}|) - v_{s} |\mathbf{q}| f(|\mathbf{q}|)$$

$$= \frac{g_{ab}}{\hbar} \left| \frac{\hbar \rho_{a} \mathbf{q}}{2v_{s} m V} \right|^{1/2} - v_{s} |\mathbf{q}| \left| \frac{m v_{s}}{2\hbar V \rho_{a} \mathbf{q}} \right|^{1/2}$$

$$= \sqrt{\frac{m v_{s}^{3}}{2V \hbar \rho_{a}}} |\mathbf{q}|^{1/2} \left(\frac{g_{ab} \rho_{a}}{m v_{s}} - 1 \right).$$
(3.80)

Mit dem so bestimmten Parameter zeigt sich nun gänzlich die Übereinstimmung mit dem Spin-Boson-Hamiltonoperator aus Gleichung (1.56),

$$\hat{H}_{\rm SBM}' = \frac{\hbar\Delta}{2}\hat{\sigma}_x - \frac{\hbar\delta}{2}\hat{\sigma}_z + \sum_{\mathbf{q}}\lambda_{\mathbf{q}}\left(\hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}\right)\frac{\hbar\hat{\sigma}_z}{2} - \hbar v_{\rm s}\sum_{\mathbf{q}}|\mathbf{q}|\,\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}\hat{b}_{\mathbf{q}}\,. \tag{3.81}$$

3.3.3 Bestimmung des Kondoparameters α

Der Kopplungsparameter $\lambda_{\mathbf{q}}$ steht über die spektrale Dichte, die hier der Einfachheit halber einem Potenzgesetz gehorcht, mit dem Kondoparameter α in Beziehung,

$$J(\omega) = \sum_{\mathbf{q}} \lambda_{\mathbf{q}}^2 \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}) = 2\alpha \omega^{\mathrm{d}}, \qquad (3.82)$$

wobei die Potenz d der Systemdimension entspricht. In einer Dimension beschreibt dieses Modell der spektralen Dichte ein ohmsches Bad,

$$J(\omega) = \sum_{q} \lambda_q^2 \delta(\omega - \omega_q) = 2\alpha\omega. \qquad (3.83)$$

Integriert man beide Seiten von Gleichung (3.83) bis zur Cutoff-Frequenz $\omega_{\rm c}$,

$$\int_{0}^{\omega_{\rm c}} \mathrm{d}\omega \, \sum_{q} \lambda_{q}^{2} \delta(\omega - \omega_{q}) \, = \, \alpha \omega_{\rm c}^{2} \,, \qquad (3.84)$$

ergibt sich die Gleichung:

$$\sum_{0 \le q \le \frac{\omega_c}{v_s}} \lambda_q^2 = \alpha \omega_c^2.$$
(3.85)

Quadriert man nun den Ausdruck (3.80),

$$\lambda_q^2 = \frac{mv_s^3}{2L\hbar\rho_a} \left|q\right| \left(\frac{g_{ab}\rho_a}{mv_s} - 1\right)^2, \qquad (3.86)$$

und setzt diesen in Gleichung (3.85) ein, kann nach α aufgelöst werden, und man erhält:

$$\alpha = \frac{1}{\omega_{\rm c}^2} \frac{m v_{\rm s}^3}{2L\hbar\rho_a} \left(\frac{g_{ab}\rho_a}{m v_{\rm s}} - 1\right)^2 \sum_{0 \le q \le \frac{\omega_{\rm c}}{v_{\rm s}}} q \,. \tag{3.87}$$

Die hierin enthaltene Summe lässt sich mit der Entsprechung $q = \frac{2\pi}{L}n$ auswerten,

$$\sum_{0 \le q \le \frac{\omega_c}{v_s}} q = \sum_{n=0}^m n = \frac{2\pi}{L} \frac{m(m+1)}{2} \approx \frac{\pi}{L} m^2 \,. \tag{3.88}$$

Die letzte Umformung bzw. Näherung gilt für große Werte des noch unbestimmten oberen Summenindexes m. Dieser ist mit der Trennfrequenz ω_c über die Relation, $\frac{2\pi}{L}m \approx \frac{\omega_c}{v_s}$, verknüpft. Für Gleichung (3.88) ergibt sich somit:

$$\sum_{0 \le q \le \frac{\omega_{\rm c}}{v_{\rm s}}} q \approx \frac{1}{2} \frac{L}{2\pi} \left(\frac{\omega_{\rm c}}{v_{\rm s}}\right)^2 \,. \tag{3.89}$$

Setzt man nun dieses Ergebnis (3.89) in Gleichung (3.87) ein, erhält man für den Kondoparameter die Abschätzung:

$$\alpha \approx \frac{1}{8\pi} \frac{mv_{\rm s}}{\hbar\rho_a} \left(\frac{g_{ab}\rho_a}{mv_{\rm s}} - 1\right)^2 \,. \tag{3.90}$$

Mit den Ausdrücken für die Schallgeschwindigkeit $v_s = \frac{\hbar \pi \rho_a}{mK}$ und den Parameter $\gamma_{ab} = \frac{mg_{ab}}{\hbar^2 \rho_a}$ findet man eine Form, die den Kondoparameter mit dem Luttinger Flüssigkeitsparameter K in Verbindung setzt,

$$\alpha \approx \frac{1}{8K} \left(\frac{\gamma_{ab} K^2}{\pi^2} - 1 \right)^2 \,. \tag{3.91}$$

In einer Dimension gilt für den Parameter $\gamma_{ab} = mg_{ab}^{1D}/\hbar^2 \rho_a^{1D}$ mit der 1D–Dichte



Abbildung 3.1: Der Kondoparameter α als Funktion des Parameters γ_{ab} .

 $\rho_a^{1D} \propto \rho_a * l_{\perp}^2$ und der Ausdehnung des Grundzustands in transversaler Richtung $l_{\perp} = (\hbar/m\omega_{\perp})^{-1/2}$. Der Wechselwirkungsparameter in einer Dimension g_{ab}^{1D} steht mit der 3D–Streulänge a_{aa} in der Relation $g_{ab}^{1D} = 2\hbar\omega_{\perp}a_{aa}$ solange $a_{aa} \ll l_{\perp}$ gilt [70]. Eine Variation des Parameters γ_{ab} ist somit durch Verwendung von Feshbach–Resonanzen der Streulänge a_{ab} möglich [23, 24, 81]. Der Kondoparameter α zeigt demnach als Funktion von γ_{ab} eine quadratische Abhängigkeit, wie sie in der Abbildung 3.1 dargestellt ist.

4 Quantenstochastische Resonanz: Theorie und Experiment

Im Abschnitt über getriebene Zweizustandssysteme des ersten Kapitels wurden die Grundlagen für die nun anstehenden Betrachtungen gelegt. Getriebene bistabile Systeme mit Rauschankopplung können unter bestimmten Bedingungen klassisch wie quantenmechanisch ein Resonanzphänomen zeigen, welches wegen der stochastischen Natur des Rauschtermes mit dem Begriff "(quanten–)stochastische Resonanz" bezeichnet wird. Da das periodisch getriebene Spin–Boson–Modell ein nichtlineares System darstellt, wird in den folgenden Abschnitten die Systemdynamik in verschiedenen Grenzfällen beleuchtet. Hierbei werden die Ergebnisse aus Kapitel 1 wieder aufgegriffen.

4.1 Quantenstochastische Resonanz

Unter dem Begriff der quantenstochastischen Resonanz versteht man die Dämpfung bzw. Verstärkung der Antwort eines bistabilen Systems auf eine periodisch treibende Kraft bei gleichzeitig vorhandenem Rauschen. Dieses Phänomen beruht auf dem Zusammenspiel von Reibung, Rauschen und periodischem Treiben. Die Bezeichnung dieses ursprünglich zunächst an klassischen Systemen studierten Verhaltens rührt daher, dass das maximale Ausgangssignal genau dann vorliegt, wenn sich die thermische Sprungrate in Resonanz mit der Frequenz der treibenden Kraft befindet. Dieses Modell wird in seiner klassischen Variante erfolgreich in Gebieten der Biologie [15, 19, 56, 74], der Geologie [7] sowie der Elektrotechnik [69] angewandt und ist ausführlich in den Referenzen [28, 87] dargestellt. Gänzlich neuartige Aspekte des Phänomens der stochastischen Resonanz treten im tiefen Quantenregime hervor. Hier kann das bistabile System, welches zum Beispiel durch ein Potential in Doppelmuldengestalt beschrieben wird, auf ein Zweizustandssystem abgebildet werden, in welchem Tunnelübergänge möglich sind. Im Gegensatz zum rein klassischen Regime, in dem die maximale Verstärkung bei einer im Mittel verschwindenden periodisch treibenden Kraft, $\bar{\epsilon} = \epsilon_0 = 0$, auftritt, ist das Resonanzphänomen im Quantenregime nur bei vorhandener Asymmetrie zu beobachten [40].

Da das Ausgangssignal rauschbehaftet ist, ist das Auffinden der Resonanzfrequenz darin zunächst mühselig. Ein gängiges Verfahren aus der Signalverarbeitung zur Detektion von Periodizitäten in stark verrauschten Signalen besteht darin, die Autokorrelationsfunktion des Ausgangssignals zu bilden. Diese besitzt nämlich die Eigenschaft, die selbe Periode zu besitzen wie das Signal, das autokorreliert wird. Je nach Beschaffenheit des dem Signal überlagerten Rauschanteils (weißes oder farbiges Rauschen) trägt dieser für $\tau = 0$ maximal zur Autokorrelationsfunktion bei, fällt jedoch für Verschiebungen $|\tau| > 0$ ab. Im Fourierraum werden dann die zur Resonanz beitragenden Frequenzen aufgeschlüsselt. Eine geeignete physikalische Größe, die die Signaturen der quantenstochastischen Resonanz aufweisen kann, ist demnach die spektrale Leistungsdichte

$$S(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\nu\tau} \bar{C}^{(\mathrm{as})}(\tau) \,, \qquad (4.1)$$

welche die Fourier-Transformierte der gemittelten Autokorrelationsfunktion im Gleichgewicht, $\bar{C}^{(as)}(\tau)$, ist. Diese wiederum ist definiert durch

$$\bar{C}^{(\mathrm{as})}(\tau) \equiv \lim_{\tau \to \infty} \frac{\omega}{2\pi} \operatorname{Re}\left[\int_{0}^{2\pi/\omega} \mathrm{d}t \langle \sigma_{z}(t+\tau)\sigma_{z}(t) \rangle\right] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} |p_{m}(\omega,\epsilon_{1})|^{2} e^{-\mathrm{i}m\omega\tau}.$$
(4.2)

Die Koeffizienten $p_m(\omega, \epsilon_1)$ werden durch die Gleichungen (1.152) und (1.153) festgelegt. Damit ergibt sich für das Leistungsspektrum (4.1) die Form

$$S(\nu) = 2\pi \sum_{-\infty}^{\infty} |p_m(\omega, \epsilon_1)|^2 \,\delta(\nu - m\omega) \,. \tag{4.3}$$

Für bessere Vergleichbarkeit werden die Koeffizienten p_m durch die Amplitude des dynamischen Verkippungsbeitrages ϵ_1 dividiert, so dass sich die skalierten Größen

$$\eta_m(\omega,\epsilon_1) = 4\pi \left| \frac{p_m(\omega,\epsilon_1)}{\hbar\epsilon_1} \right|^2$$
(4.4)

ergeben. Die zugehörigen Phasenverschiebungen lassen sich aus dem Verhältnis von Imaginär- zu Realteil der Koeffizienten bestimmen

$$\phi_m(\omega, \epsilon_1) = \arctan\left(\frac{\operatorname{Im}\left[p_m(\omega, \epsilon_1)\right]}{\operatorname{Re}\left[p_m(\omega, \epsilon_1)\right]}\right).$$
(4.5)

Die Ausdrücke (4.4) und (4.5) lassen sich genauer analysieren, indem die Integralkerne $k_m^{(s/a)}(\lambda)$ für eine gegebene Umgebung numerisch ausgewertet und die Lösungen des Gleichungssystems (1.152, 1.153) bestimmt werden. In der Folge wird, soweit nicht anders erwähnt, von einer Badkorrelationsfunktion im Skalenlimes (1.95) ausgegangen.

4.2 QSR innerhalb verschiedener Näherungsverfahren für getriebene Zweizustandssysteme

Anstelle des gekoppelten Gleichungssystems (1.152, 1.153) der Fourierkoeffizienten p_m in Gleichung (1.151) kann eine rekursive Beziehung für die Reihenglieder T_n der Populationsdynamik im Laplaceraum $P(\lambda) = (1 + \sum_{n=1}^{\infty} T_n(\lambda))/\lambda$ hergeleitet werden. Ausgangspunkt hierbei ist die exakte Reihendarstellung für $P(t) = \langle \sigma_z \rangle_t$ in Gleichung (1.107). Zusammen mit den Gleichungen (1.109) und (1.143) sowie den Definitionen (1.110) und (1.142) ergibt sich der Ausdruck [vgl. Gl. (3.13) in [41]],

$$P(t) \equiv \langle \sigma_z \rangle_t = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{2} \right)^n \int_0^t \mathcal{D}_{2n,0}\{t_j\} \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}} G_n \cos(\Phi_n + \phi_{0,n}) \prod_{k=1}^{n-1} \cos(\phi_{k,n}).$$
(4.6)

Mit der kompakten Notation

$$\int_0^\infty \tilde{\mathcal{D}}_n(\lambda) \dots \equiv \prod_{j=1}^n \left(\Delta^2 \int_0^\infty \mathrm{d}\tau_j \,\mathrm{e}^{-\lambda\tau_j} \int_0^\infty \mathrm{d}\rho_j \,\mathrm{e}^{-\lambda\rho_j} \right) \dots \tag{4.7}$$

findet man die Laplacetransformierte von (4.6) in der Form,

$$\hat{P}(\lambda) = \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{2}\right)^n \int_0^\infty \mathcal{D}_n(\lambda) \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}} G_n \cos(\Phi_n + \phi_{0,n}) \prod_{k=1}^{n-1} \cos(\phi_{k,n}). \quad (4.8)$$

4.2.1 NIBA — noninteracting–blip approximation

Die NIBA beruht auf der einfachen Annahme, dass die mittlere Verweilzeit $\langle s \rangle$ des Zweizustandssystems in einem Diagonalzustand sehr viel größer als diejenige in einem Nichtdiagonalzustand $\langle t \rangle$ ist. Dies führt auf die beiden folgenden Vereinfachungen auf Ebene der Gleichungen (1.96): Alle Beiträge $X_{j,k}$ mit $j \neq k + 1$ werden gleich Null sowie $X_{k+1,k} = Q''(\tau_{k+1})$ [vgl. (1.98)] gesetzt, weshalb hier nun $\phi_{k,n} = \xi_{k+1}Q''(\tau_{k+1})$ gilt. Desweiteren werden ebenso alle Interblip–Wechselwirkungsterme $\Lambda_{j,k}$ (1.97) im Faktor G_n Null gesetzt. Somit reduziert sich das Influenzfunktional (1.96) innerhalb der NIBA auf eine faktorisierte Form von Intrablip–Badkorrelationen,

$$\mathcal{F}_{\text{NIBA}}^{(n)} = \prod_{j=1}^{n} \exp\left\{-Q'(\tau_j) + i\xi_j \eta_{j-1} Q''(\tau_j)\right\}, \qquad (4.9)$$

in der lediglich die Vorzeichen der Blipphasenterme von den jeweiligen vorausgehenden Sojourns abhängt. Im wichtigen Fall einer ohmschen spektralen Dichte im Skalenlimes mit der Badkorrelationsfunktion aus Gleichung (1.95) besteht die NIBA alleinig aus der Vernachlässigung der Interblip-Wechselwirkungen $\Lambda_{j,k}$, da die erstgenannte Vereinfachung bereits automatisch erfüllt wird. Allgemein lassen sich drei Grenzfälle feststellen, in denen die NIBA gerechtfertigt ist (für eine ausführliche Begründung siehe [86]):

- 1. Für schwache System-Bad Kopplungen und verschwindenden Bias.
- 2. Für s > 1 bei verschwindender Temperatur und s > 2 bei endlicher Temperatur.
- 3. Die Funktion Q'(t) verhält sich für lange Zeiten bei verschwindender Temperatur wie $\propto t^{1-s}$ und bei endlicher Temperatur wie $\propto t^{2-s}$. Somit wachsen die Funktionswerte von Q'(t) mit fortschreitender Zeit t im subohmschen Fall bei T = 0 und im Fall $1 \leq s < 2$ für endliches T an, sodass lange Blips durch die Interblip Wechselwirkung unterdrückt werden. Daher ist die NIBA für eine subohmsche spektrale Dichte gültig und liefert ebenfalls im ohmschen Fall bei starker Dämpfung und/oder hohen Temperaturen sowie im Fall 1 < s < 2 für hinreichend hohe Temperaturen gültige Ergebnisse.

Dadurch wird es nun möglich, über alle möglichen Blip–Konfigurationen zu summieren. Dies führt auf

$$\hat{P}(\lambda) = \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \tilde{\mathcal{D}}_{n}(\lambda) e^{-Q'(\tau_{1})} \cos[\Phi_{1} + Q''(\tau_{1})] \prod_{k=2}^{n} \cos[Q''(\tau_{n})] \cos(\Phi_{k}) e^{-Q'(\tau_{k})}.$$
(4.10)

Dieser Ausdruck lässt sich nun formal auf die Form

$$\hat{P}(\lambda) = \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} T_n(\lambda)$$
(4.11)

bringen. Darin stehen die Summationsglieder für die Ausdrücke

$$T_n(\lambda) = \left(-\Delta^2\right)^n \left(\prod_{i=1}^n \int_0^\infty \mathrm{d}\tau_i \,\mathrm{e}^{-\lambda\tau_i} \int_0^\infty \mathrm{d}\rho_i \,\mathrm{e}^{-\lambda\rho_i}\right) \mathrm{e}^{-Q'(\tau_1)} \cos\left[\Phi_1 + Q''(\tau_1)\right] \\ \times \prod_{k=2}^n \cos\left[Q''(\tau_k)\right] \cos(\Phi_k) \mathrm{e}^{-Q'(\tau_k)} \,.$$

$$(4.12)$$

Ohne äußeres treibendes Feld zerfällt der Integrand in Gleichung (4.10) in voneinander unabhängige Faktoren der Integrationsvariablen $\{\tau_i\}$ und $\{\rho_i\}$, da die kumulierten Phasen [siehe (1.142)] verschwinden, $\Phi_k = 0$. Die Summe (4.10) hat in diesem Fall die Gestalt einer geometrische Reihe und kann in geschlossener Form gelöst werden. Wird das System von einem zeitabhängigen äußeren Feld getrieben, ist dies nicht mehr möglich. Man kann, indem man die Gleichungen (4.10) und (1.146) miteinander vergleicht, eine Darstellung der Integrationskerne $\hat{K}_{z,\lambda}^{(s/a)}(t)$ identifizieren. Diese besitzen die Gestalt

$$\hat{K}_{z,\lambda}^{(a)}(t) \equiv \Delta^2 \int_0^\infty d\tau \, e^{-\lambda \tau - Q'(\tau)} \sin \left[Q''(\tau)\right] \sin \left[\varepsilon_0 \tau + g(t+\tau) - g(t)\right]$$
(4.13)

und

$$\hat{K}_{z,\lambda}^{(s)}(t) \equiv \Delta^2 \int_0^\infty \mathrm{d}\tau \,\mathrm{e}^{-\lambda\tau - Q'(\tau)} \cos\left[Q''(\tau)\right] \cos\left[\varepsilon_0 \tau + g(t+\tau) - g(t)\right] \tag{4.14}$$

und sind, wie im Abschnitt 1.2.3.5 definiert, bzgl. der Verkippung ungerade, $\hat{K}_{z,\lambda}^{(a)}(t)$, bzw. gerade Funktionen, $\hat{K}_{z,\lambda}^{(s)}(t)$. Sie beschreiben jeweils ein Integral über eine Bliplänge und sind bei der Bestimmung von (4.12) zu lösen. Ist das treibende Feld periodisch, so sind dies auch die Funktionen $\hat{K}_{z,\lambda}^{(s/a)}(t)$, welche sich daher als Fourierreihen entwickeln lassen,

$$\hat{K}_{z,\lambda}^{(s/a)}(t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} k_m^{(s/a)}(\lambda) e^{-im\omega t}, \qquad (4.15)$$

mit ω der Grundfrequenz des treibenden Feldes. Setzt man nun diese Ausdrücke in Gleichung (4.12) für die innersten Integrale (diejenigen über ρ_n und τ_n) ein und führt

die Integration durch, ergibt sich für die verbleibenden n-1 Integrale eine Verschiebung des Laplaceparameters $\lambda \to \lambda + im\omega$. Dies entspricht einer rekursiven Relation der Ausdrücke T_n ,

$$T_n(\lambda) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{-k_m^{(s)}(\lambda)}{\lambda + im\omega} T_{n-1}(\lambda + im\omega) \quad \text{für } n \ge 2.$$
(4.16)

Für n = 1 ergibt die Auswertung der Integrale die Darstellung

$$T_1(\lambda) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{k_m^{(a)}(\lambda) - k_m^{(s)}(\lambda)}{\lambda + \mathrm{i}m\omega} \,. \tag{4.17}$$

Separiert man in Gleichung (4.16) den statischen Anteil m = 0 aus der Summe,

$$T_n(\lambda) = -\frac{k_0^{(s)}(\lambda)}{\lambda} T_{n-1}(\lambda) + \sum_{m \neq 0} \frac{-k_m^{(s)}(\lambda)}{\lambda + im\omega} T_{n-1}(\lambda + im\omega) \quad \text{für } n \ge 2, \qquad (4.18)$$

erkennt man, dass diese statischen Beiträge sich geometrisch in den Ausdrücken für T_n entwickeln. Summiert man nun alle Terme T_n auf, so findet man mit $\Upsilon(\lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} T_n(\lambda)$ die implizite Gleichung

$$\Im(\lambda) = \frac{\lambda}{\lambda + k_0^{(s)}(\lambda)} \left[T_1(\lambda) + \sum_{m \neq 0} \frac{k_m^{(s)}(\lambda)}{\mathrm{i}m\omega + \lambda} \Im(\lambda + \mathrm{i}m\omega) \right].$$
(4.19)

Verwendet man dieses Ergebnis zusammen mit dem Ausdruck (4.17) in Gleichung (4.7), zeigt sich durch Umformung, dass für die Systemdynamik eine Reihendarstellung möglich ist, in der die statischen Beiträge mit m = 0 bereits zusammengefasst sind,

$$\hat{P}(\lambda) = \frac{1}{\lambda + k_0^{(s)}(\lambda)} \sum_{m=0}^{\infty} X_m(\lambda), \qquad (4.20)$$

und deren Summenglieder sich ebenfalls rekursiv generieren lassen,

$$X_{j}(\lambda) = \sum_{m \neq 0} \frac{-k_{m}^{(s)}(\lambda)}{\lambda + im\omega + k_{0}^{(s)}(\lambda + im\omega)} X_{j-1}(\lambda + im\omega) \quad j \ge 1, \qquad (4.21)$$

$$X_0(\lambda) = 1 + \sum_{m'=-\infty}^{\infty} \frac{k_{m'}^{(a)}(\lambda)}{\lambda + \mathrm{i}m'\omega} \,.$$
(4.22)

4.2.2 Kubo Formalismus

Kubos Lineare–Antwort–Theorie (für eine kurze Einführung siehe Anhang B) kann für Systeme angewandt werden, bei denen die Amplitude der treibenden Kraft ϵ_1 hinreichend klein gegenüber der treibenden Frequenz ω ist. In diesem Fall sind die relevanten Kerne diejenigen nullter bzw. erster Ordnung in ϵ_1 . Im Fall monochromatischen Treibens sind dies gerade die Terme nullter Ordnung, $k_0^{(s/a)}$, die unabhängig von ϵ_1 sind, und diejenigen erster Ordnung, $k_{\pm 1}^{(s/a)} = \mathcal{O}(\epsilon_1)$ [siehe Gl. (1.158–1.163)]. Die Fourierreihe (1.151) beschränkt sich auf die Koeffizienten, $|m| \leq 1$. Die Lösung der rekursiven Beziehung (4.21, 4.22) erlaubt eine Aufspaltung der Besetzung im Laplacebild (4.20) in einen stationären Anteil und einen Beitrag, der die Korrekturen in erster Ordnung von ϵ_1 beschreibt,

$$P(\lambda) = P^{(0)}(\lambda) + P^{(1)}(\lambda).$$
(4.23)

Diese beiden Terme lassen sich darstellen als

$$P^{(0)}(\lambda) = \frac{1 + k_0^{(a)}(\lambda)/\lambda}{\lambda + k_0^{(s)}(\lambda)}$$
(4.24)

$$P^{(1)}(\lambda) = \frac{1}{\lambda + k_0^{(s)}(\lambda)} \sum_{m \neq 0} \frac{-k_m^{(s)}(\lambda)}{\lambda + \mathrm{i}m\omega + k_0^{(s)}(\lambda + \mathrm{i}m\omega)}$$

$$+ \frac{1}{\lambda + k_0^{(s)}(\lambda)} \sum_{m \neq 0} \frac{1}{\lambda + \mathrm{i}m\omega} \left(k_m^{(s)}(\lambda) - \frac{k_m^{(s)}(\lambda)k_0^{(a)}(\lambda + \mathrm{i}m\omega)}{\lambda + \mathrm{i}m\omega + k_0^{(s)}(\lambda + \mathrm{i}m\omega)} \right)$$

$$(4.25)$$

Eine direkte Konsequenz aus Kubos Formel [54, 55] (siehe auch (B.7) im Anhang) für eine schwache externe Kraft $\delta f_{\text{ext}} = (\hbar \epsilon_1/q_0) \cos(\omega t)$ ist die Relation

$$p_{\pm 1} = \hbar \epsilon_1 \, \tilde{\chi}(\pm \omega) \tag{4.26}$$

zwischen den Fourierkoeffizienten $p_{\pm 1}$ und der linearen dynamischen Suszeptibilität $\tilde{\chi}(\omega)$. Damit kann $P^{(as)}$ in der Form

$$P^{(as)}(t) = P_{\infty} + \frac{\hbar\epsilon_1}{4} \left[\tilde{\chi}(\omega) e^{-i\omega t} + \tilde{\chi}(-\omega) e^{i\omega t} \right]$$
(4.27)

dargestellt werden. Hierin wurde der Koeffizient p_0 mit dem thermischen Gleichgewichtswert $P_{eq} = P_{\infty}$ gleichgesetzt. Aus dem Gleichungssystem (1.152, 1.153), gelöst in linearer Ordnung für p_{-1} , p_0 sowie p_1 , in Kombination mit der Relation (4.26), lässt sich die Darstellung

$$\tilde{\chi}(\omega) = \lim_{\epsilon_1 \to 0} \frac{4}{\hbar \epsilon_1} \frac{k_1^{(a)}(-i\omega) - P_{\infty} k_1^{(s)}(-i\omega)}{-i\omega + k_0^{(s)}(-i\omega)}, \qquad (4.28)$$

mit $P_{\infty} = \lim_{\epsilon_1 \to 0} k_0^{(a)}(0)/k_0^{(s)}(0) = \tanh(\hbar\beta\epsilon_0/2)$ [86] herleiten. Setzt man die Relation (4.26) in die Ausdrücke für die Leistungsamplitude $\eta_{\pm 1}$ (4.4) und die Phase $\phi_{\pm 1}$ (4.5) ein, reduziert sich deren Auswertung auf die Kenntnis der linearen dynamischen Suszeptibilität,

$$\eta_{\pm 1}(\omega) = 4\pi \left| \tilde{\chi}(\omega) \right|^2 , \qquad (4.29)$$

$$\phi_{\pm 1}(\omega) = \arctan\left(\frac{\operatorname{Im}[\tilde{\chi}(\omega)]}{\operatorname{Re}[\tilde{\chi}(\omega)]}\right).$$
(4.30)

Der für die Absorption verantwortliche Imaginärteil der linearen dynamischen Suszeptibilität $\tilde{\chi}''(\omega)$ ist mittels des Fluktuations–Dissipations–Theorems mit der Fouriertransformierten $\tilde{C}(\omega)$ der symmetrisierten Autokorrelationsfunktion C verknüpft,

$$\hbar \tilde{\chi}''(\omega) = \tanh\left(\hbar \beta \omega/2\right) \hat{C}(\omega) \,. \tag{4.31}$$

Aus Gleichung (4.31) kann mit Hilfe der Kramers–Kronig–Relation schließlich der Realteil $\tilde{\chi}'$ der linearen dynamischen Suszeptibilität gewonnen werden.

4.2.2.1 Schwache Dämpfung

Im Fall schwacher Dämpfung zeigt sich in Abhängigkeit der Temperatur ein vielseitiges Verhalten. Bei tiefen Temperaturen liegt selbst bei vorhandener Dissipation eine kohärente Tunneldynamik vor. Gilt $k_{\rm B}T < E/2\pi\alpha$ — ist also die Temperatur klein gegenüber dem Verhältnis aus der durch das Bad renommierten Energiedifferenz $E = \hbar \sqrt{\Delta_{\rm r}^2 + \epsilon_0^2}$ zwischen den beiden Energieniveaus des Zweizustandssystems und dem Kopplungsparameter α und liegt zusätzlich eine schwache Kopplung vor, vollführt das Zweizustandssystem gedämpfte, kohärente Schwingungen mit einer Frequenz E/\hbar und einer charakteristischen Abklingdauer der Einhüllenden $\gamma_{\rm koh}^{-1}$. Dem überlagert ist eine inkohärente Tunneldynamik mit einer Abklingrate $\gamma_{\rm rel}$, die im Langzeitlimes dem Gleichgewichtsausdruck

$$P_{\infty} = (\epsilon_0/\omega) \tanh(\hbar\omega/2k_{\rm B}T) \tag{4.32}$$

entgegenstrebt. Die zugehörige symmetrisierte Korrelationsfunktion $\hat{C}(\omega)$ zeigt bei den Frequenzen $\Omega_{\pm} \equiv \pm E/\hbar$ zwei Resonanzen der Breite $\gamma_{\rm koh}$ betreffend der gedämpften kohärenten Oszillationen des Zweizustandssystems. Weiterhin findet sich ein quasielastisches Maximum der Breite $\gamma_{\rm rel}$ für $\Omega_0 \equiv 0$, welches ein inkohärentes Relaxieren in den thermischen Gleichgewichtszustand beschreibt. Innerhalb des Gültigkeitsbereichs der Lorentz-Näherung, i. e. $\hbar\beta\omega \ll 1$, kann die lineare dynamische Suszeptibilität $\tilde{\chi}(\omega)$ über das Fluktuations-Dissipations-Theorem (4.31) bestimmt werden,

$$\tilde{\chi}(\omega) = \tilde{\chi}_{\rm koh}(\omega) + \tilde{\chi}_{\rm rel}(\omega).$$
(4.33)

Hierbei stehen die Beiträge für

$$\tilde{\chi}_{\rm koh}(\omega) = \frac{\Delta_{\rm e}^2}{4\hbar\Omega_+^2} \left(\frac{1}{\Omega_+ + \omega + i\gamma_{\rm koh}} + \frac{1}{\Omega_+ - \omega - i\gamma_{\rm koh}} \right) \tanh\left(\frac{\hbar\Omega_+}{2k_{\rm B}T}\right)$$
(4.34)

sowie

$$\tilde{\chi}_{\rm rel}(\omega) = \frac{\epsilon_0^2}{\Omega_+^2} \frac{1}{4k_{\rm B}T} \frac{1}{1 - i\omega/\gamma_{\rm rel}} \cosh^{-2}\left(\frac{\hbar\Omega_+}{2k_{\rm B}T}\right).$$
(4.35)

Das effektive, durch die Dissipation renormierte Tunnelmatrix element $\Delta_{\rm e}$ bestimmt sich gemäß [86]

$$\Delta_{\rm e} = \Delta \left(\frac{\Delta}{\omega_{\rm c}}\right)^{\alpha/(1-\alpha)}. \tag{4.36}$$

Die Raten $\gamma_{\rm rel}$ und $\gamma_{\rm koh}$ sind durch die Ausdrücke

$$\gamma_{\rm rel} = \pi \alpha \left(\frac{\Delta_{\rm e}}{\Omega_{+}}\right)^2 \coth\left(\frac{\hbar\Omega_{+}}{2k_{\rm B}T}\right)$$
(4.37)

und

$$\gamma_{\rm koh} = \frac{\gamma_{\rm rel}}{2} + 2\pi\alpha \left(\frac{\epsilon_0}{\Omega_+}\right)^2 \frac{k_{\rm B}T}{\hbar}$$
(4.38)

gegeben. Die lineare dynamische Suszeptibilität zerfällt demnach in zwei Anteile (4.33), einen kohärenten und einen inkohärenten Beitrag, von denen für $T \rightarrow 0$ einzig der erstgenannte (4.34) nicht verschwindet. Durch die Kenntnis der Gleichungen (4.29) bis (4.35) kann das Phänomen der quantenstochastischen Resonanz im linearen Regime eingehend studiert werden. In Abbildung 4.1 ist die Leistungsamplitude als Funktion



Abbildung 4.1: Lineare Antwort: η_1 , $4\pi |\chi_{\text{koh}}|^2$ und $4\pi |\chi_{\text{rel}}|^2$ als Funktion der Temperatur.

der Temperatur T dargestellt. Im gewählten Parameterbereich ist kohärentes Tunneln möglich (siehe durchgezogene Linie). Die Frequenzen sind in Einheiten des effektiven Tunnelmatrixelements ausgedrückt. Die Temperatur ist in Einheiten von $\hbar\Delta_{\rm e}/k_{\rm B}$ gegeben. Da der kohärente Beitrag (4.34) mit steigender Temperatur monoton abfällt, ist alleinig das inkohärente Relaxationsbestreben des statisch verkippten Zweizustandssystems¹ hin zum thermischen Gleichgewicht für das Maximum und somit für das

¹ Der Ausdruck (4.35) zeigt, dass für ein symmetrisches Zweizustandssystem, also mit verschwindender statischer Verkippung $\epsilon_0 = 0$, auch der inkohärente Beitrag der linearen Suszeptibilität Null wird, $\tilde{\chi}_{rel} = 0$.

Quanten–Resonanzphänomen verantwortlich. Aus den Gleichungen (4.34) und (4.35) in Kombination mit Gleichung (4.29) kann man ableiten, dass das Maximum von η_1 erreicht wird, wenn die Temperatur ungefähr die Bedingung $T_{\rm res} \approx \hbar \Omega_+/k_{\rm B}$ erfüllt. Da die Relaxationsrate $\gamma_{\rm rel}$ nur schwach in Abhängigkeit von der Temperatur T variiert, wird das Maximum durch das Produkt aus dem detaillierten Gleichgewichtsfaktor, $1/\cosh^2(\Omega_+/2k_{\rm B}T)$, und der inversen Temperatur 1/T bestimmt.

Bei steigender Temperatur gewinnen die dissipationsinduzierten inkohärenten Tunnelübergänge zunehmend an Bedeutung und die kohärente Tunneldynamik geht oberhalb einer Temperatur von $T^*(\alpha) = E/2\pi\alpha k_{\rm B}$ verloren. Entsprechend gehen die drei Maxima der Funktion in Gleichung (4.33) in ein gemeinsames quasielastisches Maximum der Breite γ_{α} über,

$$\tilde{\chi}(\omega) = \frac{\beta}{4} \cosh^{-2} \left(\frac{\hbar \beta \epsilon_0}{2}\right) \frac{1}{1 - i\omega/\gamma_{\alpha}}.$$
(4.39)

Im Fall starker Dämpfung, $\alpha \gg 1/2$, herrschen stets inkohärente Tunnelübergänge vor. Daher kann die Systemdynamik bei hohen Temperaturen $T > T^*(\alpha)$ sowohl bei schwacher wie auch ohnehin bei starker Badankopplung durch eine markovsche Ratengleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit P(t) ausgedrückt werden,

$$\dot{P}(t) = -\gamma_{\alpha} \left[P(t) - P_{\text{eq}} \right] . \tag{4.40}$$

Hierin ist γ_{α} die Rate, mit der das System dem Gleichgewichtswert $P_{\rm eq}$ entgegenstrebt. Für $\alpha \geq 1$ oder $T > T^*$ (beide Bedingungen können auch gleichzeitig erfüllt sein) findet man die Beziehungen $\gamma_{\alpha} = \operatorname{Re}[\Sigma(\epsilon_0)]$ und $P_{\rm eq} = -\tan(\pi\alpha)\operatorname{Im}[\Sigma(\epsilon_0)]/\operatorname{Re}[\Sigma(\epsilon_0)] = \tanh(\hbar\epsilon_0/2k_{\rm B}T)$ mit

$$\Sigma(\epsilon_0) = \frac{\Delta_{\rm e}}{\pi} \left(\frac{\hbar\beta\Delta_{\rm e}}{2\pi}\right)^{1-2\alpha} \frac{\Gamma(\alpha + i\hbar\beta\epsilon_0/2\pi)}{\Gamma(1-\alpha + i\hbar\beta\epsilon_0/2\pi)}, \qquad (4.41)$$

wobei $\Gamma(z)$ die Gammafunktion bezeichnet. Wie bereits zuvor, kann auch in dieser Darstellung der linearen dynamischen Suszeptibilität (4.39) die Bedingung $T_{\rm res} \approx \hbar \epsilon_0 / k_{\rm B}$ für die Resonanz abgeleitet werden.

4.2.3 Exakte Lösung für $\alpha = 1/2$

Der Fall $\alpha = 1/2$ stellt eine Ausnahme dar, da in diesem Fall unter der Voraussetzung eines ohmschen Bades und der Bedingung $\hbar\beta\omega_c \gg 1$ die nichtlineare Dynamik exakt gelöst werden kann. Der Grund für die exakte Summierbarkeit der Pfade in diesem Spezialfall kann am besten durch das Konzept der kollabierten Sojourns bzw. Blips verstanden werden. Im zuvor genannten Ladungsbild [vgl. hierzu Abschnitt 1.2.3 ab Gl. (1.98)] stellen benachbarte Ladungen mit entgegengesetztem Vorzeichen einen kollabierten Dipol dar. Da der Abstand zwischen diesen Ladungen verschwindet, besitzt dieser kollabierte Dipol kein Dipolmoment und kann daher auch nicht mit anderen Ladungen wechselwirken.

Die Berechnung erfolgt, indem der Kopplungsparameter $\alpha = 1/2 - \kappa$ gesetzt und anschließend der Grenzübergang $\kappa \to 0$ durchgeführt wird. Im Skalenlimes [siehe Gl.

(1.95) und die daran anschließende Erläuterung] vereinfachen sich die den Einfluss des Bades beschreibenden Größen $F_m^{(\pm)}$ und $F_{m,n}$ gemäß den Gleichungen (1.117) und (1.122). Da die in den Reihenausdrücken vorkommenden trigonometrischen Funktionen $\cos(\pi \alpha) = \sin(\pi \kappa)$ für $\kappa \to 0$ verschwinden, muss jeder dieser Faktoren durch einen einfachen Pol an der Stelle $\alpha = 1/2$ kompensiert werden. Die erforderliche Singularität findet sich, indem man die Intradipol–Wechselwirkung bei kleinen Abständen, $\lim_{\tau\to 0} e^{-Q'(\tau)} \approx (\omega_c \tau)^{-(1-2\kappa)}$, für das sog. Atmungsmodenintegral studiert. Die Dipollänge τ kann sowohl für einen Sojourn als auch einen Blip stehen. Das Integral über die Dipollänge ist singulär, falls der Biasfaktor eine gerade Funktion bzgl. des Parameters der Verkippung ist. Ist der Biasfaktor eine ungerade Funktion, ergibt sich ein regulärer Ausdruck für das Integral. Daher ergibt sich ein nichtverschwindender Beitrag in Gestalt

$$I(\alpha = \frac{1}{2}) \equiv \lim_{\kappa \to 0} \Delta^2 \cos\left(\frac{1}{2}\pi - \kappa\pi\right) \int_0^\infty d\tau \, e^{-Q'(\tau)} \cos(\epsilon_0 \tau) f(\tau)$$

$$= \lim_{\kappa \to 0} \Delta^2 \sin(\pi\kappa) \int_0^\infty d\tau \, \frac{1}{(\omega_c \tau)^{1-2\kappa}} \cos(\epsilon_0 \tau) f(\tau) \qquad (4.42)$$

$$= \lim_{\kappa \to 0} \frac{\Delta^2}{\omega_c} f(0) \sin(\pi\kappa) \Gamma(2\kappa) = \frac{\pi}{2} \frac{\Delta^2}{\omega_c} = \gamma.$$

Die Funktion $f(\tau)$ steht abkürzend für den exponentiellen Faktor, der die Wechselwirkung des Dipols mit allen weiteren Ladungen beschreibt. Da ein Dipol mit verschwindender Länge keine Wechselwirkung mit anderen Ladungen erfährt, gilt f(0) = 1. Auf diese Eigenschaft wurde im letzten Umformungsschritt von Gleichung (4.42) zurückgegriffen Das Integral entspricht somit dem Ausdruck des effektiven Tunnelmatrixelements $\Delta_{\rm e}$. Die großkanonische Summe über die in einen ausgedehnten Sojourn der Länge *s* möglichen einfügbaren kollabierten Blips (KB) hat die Form

$$U_{\rm KB} = e^{-\gamma s} \,. \tag{4.43}$$

Entsprechend ergibt sich die großkanonische Summe für kollabierte Sojourns (KS) in einem für die Dauer τ anhaltenden Blipintervall,

$$U_{\rm KS} = e^{-\gamma \tau/2}$$
. (4.44)

Der Unterschied im Faktor Zwei in den Ausdrücken (4.43) und (4.44) rührt daher, dass das System nach einem kollabierten Sojourn wieder in den ursprünglichen Blipzustand aus dem es heraus gestartet ist, propagieren muss. Demgegenüber kann sich das System nach einem kollabierten Blip in einem der beiden Sojourns aufhalten. Mit diesen Überlegungen lässt sich nun der symmetrische Beitrag $\hat{K}_z^{(s)}(\lambda)$ berechnen. Für T = 0und $\alpha = \frac{1}{2}$ hat dieser die Gestalt [86]

$$\hat{K}_{z}^{(s)}(\lambda) = \lim_{\alpha \to 1/2} \Delta^{2} \cos(\pi \alpha) \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}\tau \, \frac{\mathrm{e}^{-\lambda \tau}}{(\omega_{\mathrm{c}} \tau)^{2\alpha}} = \gamma \,, \tag{4.45}$$

und somit nimmt die Laplacetransformierte des symmetrischen Beitrags der Population [vgl. hierzu entsprechend Gl. (1.146)] die Form $\langle \sigma_z(\lambda) \rangle = 1/[\lambda + \gamma]$ an. Im Zeitregime zeigt die Dynamik dementsprechend eine inkohärente, exponentielle Relaxation,

$$\langle \sigma_z \rangle_t = e^{-\gamma t} \,. \tag{4.46}$$

Der antisymmetrische Beitrag $P_{\rm a}(t)$ beschreibt die asymptotische Dynamik. Darin kommt die Influenzfunktion $F_m^{(-)}$ vor, die im Vergleich zu $F_m^{(+)}$ einen Faktor $\cos(\pi\alpha)$ weniger aufweist und die mit dem ungeraden Biasterm $B_m^{(a)}$ gewichtet wird. Aufgrund des Faktors ξ_1 in der Funktion $F_m^{(-)}$ ist der erste Blip ein lang anhaltender Blip von endlicher Dauer τ , der mit dem Biasfaktor $\sin(\epsilon_0 \tau)$ einhergeht. Während dieses Blipzustandes sind beliebig viele kollabierte Sojournaufenthalte des Systems möglich, denen aufsummiert durch den Faktor $U_{\rm KS}(\tau)$ (4.44) Rechnung getragen wird. Dem anfänglichen Blipzustand folgt für die Dauer der verbleibenden Zeit $s = t - \tau$ ein Sojourn, währenddessen wiederum eventuelle kollabierte Blipaufenthalte mit dem Faktor $U_{\rm KB}(s)$ (4.43) berücksichtigt werden müssen. Dies zusammengenommen und unter Berücksichtigung der Wechselwirkung der zwei verbleibenden Einzelladungen erhält man

$$P_{\rm a}(t) = \Delta^2 \int_0^\infty \mathrm{d}\tau \, \int_0^\infty \mathrm{d}s \,\Theta(t-\tau-s)\sin(\epsilon\tau) \mathrm{e}^{-Q'(\tau)} \mathrm{e}^{-\gamma\tau/2} \mathrm{e}^{-\gamma s} \,. \tag{4.47}$$

Vereint man nun die Ergebnisse (4.46), (4.47) und (1.95), ergibt sich mit $\alpha = 1/2$ für die Systemdynamik die bestimmende Gleichung

$$P(t) = e^{-\gamma t} + 2 \int_0^t \frac{d\tau}{\hbar\beta} \frac{\sin(\epsilon\tau)}{\sinh(\pi\tau/\hbar\beta)} [e^{-\gamma\tau/2} - e^{-\gamma\tau} e^{\gamma\tau/2}].$$
(4.48)

Im Fall eines zeitabhängigen Tunnelmatrixelements lässt sich Gleichung (4.48) verallgemeinern,

$$P(t) = \exp\left(-\int_0^t d\tau \,\gamma(\tau)\right) + P_{\rm a}(t) \quad \text{mit} \quad \gamma(\tau) = \frac{\pi}{2} \frac{\Delta^2(\tau)}{\omega_c} \,, \tag{4.49}$$

mit dem zugehörigen antisymmetrischen Beitrag

$$P_{a} = \int_{0}^{t} dt_{2} \Delta(t_{2}) \exp\left(-\int_{t_{2}}^{t} d\tau \gamma(\tau)\right) \\ \times \int_{0}^{t_{2}} dt_{1} \Delta(t_{1}) \sin\left[\vartheta(t_{2}, t_{1})\right] e^{-Q'(t_{2}-t_{1})} \exp\left(-\int_{t_{1}}^{t_{2}} d\tau \gamma(\tau)\right).$$
(4.50)

In der Folge wird nun wieder ein zeitunabhängiger Tunnelprozess angenommen. Im Langzeitlimes wird die Dynamik durch den antisymmetrischen Anteil bestimmt. Da das getriebene System nach einer gewissen Zeit ein periodisches Verhalten annimmt, kann der Ausdruck (4.47) in eine Fourierreihe zerlegt werden, deren Koeffizienten exakt bestimmbar sind,

$$p_m(\omega, \epsilon_1) = \frac{\Delta^2}{-\mathrm{i}m\omega + \gamma} \int_0^\infty \mathrm{d}\tau \,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\omega\tau - \gamma\tau/2 - Q'(\tau)} A_m^{(\mathrm{a})}(\tau) \,. \tag{4.51}$$



Abbildung 4.2: Exakte Lösung für $\alpha = 1/2$

Der darin vorkommende Ausdruck $A_m^{(a)}$ hat die in den Gleichungen (1.161) und (1.163) angegebenen Darstellungen.

Die renormierte Amplitude $\eta_1(\omega, \epsilon_1)$ [siehe Gl. (4.4) und Gl. (4.29)] kann als Ausdruck einer verallgemeinerten nichtlinearen Suszeptibilität $\chi_{\rm NL}(\omega, \epsilon_1)$ ausgelegt werden. Für stark nichtlineare treibende Felder, $\epsilon_1 > \epsilon_0$, fällt die Leistungsamplitude mit steigender Temperatur monoton ab. Mit schwächer werdender externer treibender Kraft zeigt sich in den Kurven bei kleinen Temperaturwerten ein Minimum, auf das ein Maximum folgt. Dies zeigt sich, sobald die statische Verkippung ϵ_0 gleich groß oder geringfügig größer wird als die äußere Frequenz sowie die Amplitude ϵ_1 der äußeren Kraft. Für noch kleinere Amplituden der äußeren Kraft kann im Rahmen der Linearen–Antwort–Theorie das Phänomen der quantenstochastischen Resonanz im nichtlinearen Regime analysiert werden. Innerhalb dieses Formalismus kann die lineare dynamische Suszeptibilität im Fall $\alpha = 1/2$ analytisch dargestellt werden,

$$\tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \frac{\gamma}{\gamma - i\omega} \frac{\phi(\omega)}{\hbar \omega}.$$
(4.52)

Hierin steht die Funktion $\phi(\omega)$ abkürzend für

$$\phi(\omega) = \psi(x_{+}) - \psi\left(x_{+} - i\frac{\hbar\beta\omega}{2\pi}\right) + \psi(x_{-}) - \psi\left(x_{-} - i\frac{\hbar\beta\omega}{2\pi}\right)$$
(4.53)

mit der Digammafunktion ψ und $x_{\pm} = \frac{1}{2} + \frac{\hbar\beta}{2\pi}(\gamma/2 \pm i\epsilon_0)$. Im linearen Regime wird das Minimum nicht mehr aufgelöst und nur das Maximum bleibt erhalten. Da im Fall eines ungetriebenen Zweizustandssystems die Dynamik bei einer Ankopplung ans Bad mit $\alpha = 1/2$ für $T \to 0$ stets inkohärent ist, ist nun hier interessant zu beobachten, dass das wesentliche Maximum bei einer Temperatur auftritt, für die die Relaxationsrate ins thermische Gleichgewicht maximal wird. Andererseits zeigt sich das Minimum im Verlauf von η_1 in dem Temperaturbereich, in dem kohärente, durch das äußere treibende Feld induzierte Tunnelprozesse vorherrschen. Daher zeigt die Leistungsamplitude η_1 als Funktion der Frequenz Resonanzen bei $\omega \approx \epsilon_0/n$ mit $n \in \mathbb{N}$. Dies ist ein rein nichtlinearer Effekt. Entsprechend handelt es sich in diesem Regime um eine intrinsisch nicht-markovsche Dynamik. Mit steigender Temperatur verschwinden die Kohärenzen zunehmend.

4.2.4 Niedrige Frequenzen

Für hinreichend kleine Frequenzen, $\hbar\omega \ll 2\pi\alpha k_{\rm B}T$, ist die Näherung der Fourierkoeffizienten

$$k_m^{(s)}(-in\omega) \simeq k_m^{(s)}(0) \quad \text{und} \quad k_m^{(a)}(-in\omega) \simeq k_m^{(a)}(0)$$

$$(4.54)$$

zulässig. Damit vereinfachen sich die Funktionen (1.155)

$$\mathcal{F}(t) \to \gamma_{\alpha}(t) P_{\text{eq}}(t) \quad \text{und} \quad \mathcal{L}(t, t') \to \gamma_{\alpha}(t) \delta(t')$$

$$(4.55)$$

in Gleichung (1.154), wodurch diese in eine Ratengleichung übergeht,

$$\dot{P}_{\rm as}(t) = -\gamma_{\alpha}(t) \left[P(t) - P_{\infty}(t) \right] \,, \tag{4.56}$$

in der sowohl die Rate als auch der adiabatische Gleichgewichtsterm zeitabhängig sind,

$$\gamma_{\alpha}(t) = \operatorname{Re}[\Sigma(\epsilon(t))], \qquad (4.57)$$

$$P_{\infty}(t) = -\tan(\pi\alpha) \operatorname{Im}[\Sigma(\epsilon(t))]/\operatorname{Re}[\Sigma(\epsilon(t))].$$
(4.58)

 $\Sigma[\epsilon(t)]$ ist die bereits in Gleichung (4.41) eingeführte Funktion, jedoch hier mit zeitabhängigem Argument:

$$\Sigma[\epsilon(t)] = \frac{\Delta_{\rm e}}{\pi} \left(\frac{\hbar\beta\Delta_{\rm e}}{2\pi}\right)^{1-2\alpha} \frac{\Gamma(\alpha+i\,\hbar\beta\,\epsilon(t)/2\pi)}{\Gamma(1-\alpha+i\,\hbar\beta\,\epsilon(t)/2\pi)} \,. \tag{4.59}$$

Die Ratengleichung (4.56) kann mittels der Fourierreihenentwicklung (1.151) gelöst werden, deren Koeffizienten sich gemäß

$$p_{m}(\omega) = \frac{\omega}{2\pi} \int_{0}^{2\pi/\omega} dt_{0} \gamma_{\alpha}(t_{0}) P_{\infty}(t_{0}) e^{-im\omega t_{0}} \int_{0}^{\infty} dt_{1} e^{-im\omega t_{1}} \exp\left(-\int_{t_{0}}^{t_{0}+t_{1}} dt \gamma_{\alpha}(t)\right)$$
(4.60)

bestimmen lassen. Die gemeinsame Periodizität der Funktionen $\exp\{-im\omega t\}$ und $\gamma_{\alpha}(t)$ ermöglicht es, den Ausdruck (4.60) umzuformen,

$$p_{m}(\omega) = \frac{\omega}{2\pi} \frac{1}{1 - I(\omega)} \int_{0}^{2\pi/\omega} dt_{0} \gamma_{\alpha}(t_{0}) P_{\infty}(t_{0}) e^{-im\omega t_{0}} \times \int_{0}^{2\pi/\omega} dt_{1} e^{-im\omega t_{1}} \exp\left(-\int_{t_{0}}^{t_{0}+t_{1}} dt \gamma_{\alpha}(t)\right), \qquad (4.61)$$

105



Abbildung 4.3: Frequenzabhängigkeit von $\text{Im}[p_1(\omega)]$ für niedrige Frequenzen. T = 200, $\epsilon_0 = 20$, $\alpha = 1/1000$.

mit $I(\omega) = \exp\{-\int_0^{2\pi/\omega} dt \gamma_\alpha(t)\}$. Diese Form erleichtert die numerische Auswertung der Dynamik.² Die Abbildung 4.3 zeigt in doppelt logarithmischer Darstellung die Frequenzabhängigkeit von Im $[p_1(\omega)]$ für niedrige Frequenzen (vgl. [42, Abb. 4]). Innerhalb des Gültigkeitsbereichs der NIBA beschreibt Gleichung (4.60) die nichtlineare Dynamik und die dort mögliche stochastische Resonanz im Quantenregime bei tiefen Temperaturen. Dieser Gültigkeitsbereich liegt bei niedrigen Frequenzen dann vor, wenn das System gleichzeitig durch das Bad eine hohe Dämpfung widerfährt, $\alpha > 1$. Ist die Ankopplung an das Bad schwach, $\alpha < 1$, liefert die NIBA noch dann gute Ergebnisse, wenn die Systemparameter den Ungleichungen $2\pi\alpha k_{\rm B}T \ge \hbar\Delta_{\rm e}$ oder $|\epsilon(t)| > \Delta_{\rm e}$ gehorchen [40]. Für sehr schwache Dämpfungen ergibt sich eine Relaxationsrate

$$\gamma_{\alpha}(t) = \pi \alpha \Delta_{\rm e}^2 \frac{\epsilon(t)}{(2\pi \alpha k_{\rm B} T)^2 + \epsilon(t)^2} \coth\left[\frac{\hbar \epsilon(t)}{2k_{\rm B} T}\right]$$
(4.62)

und entsprechend der Gleichgewichtswert

$$P_{\infty}(t) = \tanh\left[\frac{\hbar\epsilon(t)}{2k_{\rm B}T}\right].$$
(4.63)

² Die Umformung beruht auf der Identität:

$$\int_{0}^{\infty} dt_{1} e^{-im\omega t_{1}} \exp\left(\int_{t_{0}}^{t_{0}+t_{1}} dt \gamma_{\alpha}(t)\right) = \int_{0}^{2\pi/\omega} dt_{1} e^{-im\omega t_{1}} \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\int_{t_{0}}^{t_{0}+t_{1}+n \, 2\pi/\omega} dt \gamma_{\alpha}(t)\right)$$
$$= \int_{0}^{2\pi/\omega} dt_{1} \frac{e^{-im\omega t_{1}}}{1-I(\omega)} \exp\left(-\int_{t_{0}}^{t_{0}+t_{1}} dt \gamma_{\alpha}(t)\right)$$
Der Term $2\pi \alpha k_{\rm B}T$ im Nenner der rechten Seite der Gleichung (4.62) gewährleistet auch bei starker Nichtlinearität des treibenden Feldes, $\varepsilon_1 \gg \varepsilon_0$, dass die Relaxationsrate stets endlich bleibt.

4.2.4.1 Rauschinduziertes Abschwächen höherer Fourierkoeffizienten

Bei sowohl niedrigen Frequenzen als auch einer hohen Amplitude der treibenden Kraft erfahren die höheren Koeffizienten der Fourierreihe eine durch das Rauschen induzierte Resonanzunterdrückung (engl. *NIS: noise-induced-suppression*). Wegen der Auswahlregel (siehe Abschnitt) ist p_3 bzw. η_3 die wesentliche Größe, an der dieses Verhalten studiert werden kann. Bei diesem Phänomen wird der Funktionswert von η_3 für die Resonanzfrequenz bzw. der damit verknüpften durch die Temperatur *T* vorgegebenen Rauschamplitude um mehrere Größenordnungen unterdrückt (s. Abb. 4.4, 4.5; vgl. [40, Abb. 6]). Gleichzeitig zeigt die zugehörige Phasenfunktion ϕ_3 an der Resonanzstelle einen signifikanten Sprung (s. Abb. 4.6; vgl. [40, Abb. 7]).



Abbildung 4.4: Temperaturabhängigkeit von η_1 . $\epsilon_0 = 20$, $\epsilon_1 = 10$, $\alpha = 0.1$, $\omega = 10^{-4}$.

4.2.4.2 QSR in adiabatischer Näherung

Bei tiefen Temperaturen, $k_{\rm B}T \leq E$, einer schwachen Kopplung zwischen System und Bad, $\alpha \ll 1$, sowie einer geringen tatsächlichen Verkippung, $|\epsilon(t)| \leq \Delta_{\rm e}$, sind die Voraussetzungen nicht mehr erfüllt, um die NIBA für die Langzeitdynamik anzuwenden, da unter diesen Bedingungen die Kopplungsstärke in erster Ordnung zur Dissipation beiträgt und somit nicht vernachlässigt werden kann. Jedoch kann im quantenkohärenten Regime bei tiefen Temperaturen die Dynamik mittels Störungstheorie erschlossen



Abbildung 4.5: Temperaturabhängigkeit von η_3 . $\epsilon_0 = 20$, $\epsilon_1 = 10$, $\alpha = 0.1$.



Abbildung 4.6: Temperaturabhängigkeit von φ_3 . $\epsilon_0 = 20$, $\epsilon_1 = 10$, $\alpha = 0.1$ und $\omega = 0.001$.

werden [60, 86]. Im Regime $\epsilon_1 \omega \ll \Delta^2$ kann die Tunneldynamik im adiabatischen Grenzfall behandelt werden [78]. Dann ist die asymptotische Population $P_{\rm as}(t)$ einfach mit der Funktion N(t) verknüpft, welche die Populationsdifferenz zwischen den beiden Eigenzuständen des getriebenen Zweizustandssystems beschreibt,

$$P^{(\mathrm{as})}(t) = \frac{\hbar\epsilon(t)}{E(t)} N(t), \qquad (4.64)$$

mit der zeitabhängigen Energiedifferenz zwischen den beiden Niveaus $E(t) = \hbar [\Delta_e^2 + \epsilon(t)^2]^{1/2}$. Es lässt sich zeigen, dass die Populationsdifferenz N(t) einer Differentialgleichung erster Ordnung gehorcht,

$$\dot{N}(t) = -\gamma_{\rm rel}(t) \left[N(t) - N_{\rm eq}(t) \right],$$
 (4.65)

welche die Gestalt einer Ratengleichung mit zeitabhängiger Relaxationsrate

$$\gamma_{\rm rel}(t) = \pi \alpha \frac{\hbar \Delta_{\rm e}^2}{E(t)} \coth\left[\frac{E(t)}{2k_{\rm B}T}\right]$$
(4.66)

sowie zeitabhängigem adiabatischen Gleichgewichtswert

$$N_{\rm eq}(t) = \tanh\left[\frac{E(t)}{2k_{\rm B}T}\right]$$
(4.67)

hat. Die Lösung von Gleichung (4.65), eingesetzt in (4.64), liefert für die Koeffizienten der Fourierreihenentwicklung der Funktion $P_{as}(t)$ den Ausdruck

$$p_m(\omega, \epsilon_1) = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \mathrm{d}t_0 \, \frac{\hbar \epsilon(t_0)}{E(t_0)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\omega t_0} \\ \times \int_0^\infty \mathrm{d}t_1 \, N_{\mathrm{eq}}(t_1) \gamma_{\mathrm{rel}}(t_1) \exp\left\{-\int_0^{t_0+t_1} \mathrm{d}t \, \gamma_{\mathrm{rel}}(t)\right\} \,.$$

$$(4.68)$$

4.2.5 Hohe Frequenzen

Das in Abschnitt 1.5 vorgestellte Verfahren, die Systemdynamik bei hohen Frequenzen zu erfassen, beruht auf der Mittelung der relevanten Größen über eine Periode der treibenden Kraft. Dies führt die Bestimmung der Dynamik zurück auf die Kenntnis des statischen Beitrags der Fourierreihenentwicklung (1.151) und entspricht einer Entwicklung von $P^{(as)}$ in Ordnung $(\tau_c \omega)^{-1}$. Dabei ist $\tau_c^{-1} \equiv \lim_{\epsilon_1 \to 0} k_0^{(s)}(0) = \gamma_{\alpha}$ der einzig nichtverschwindende Koeffizient $k_m^{(s)}$ in Gleichung (1.158) in Abwesenheit eines externen treibenden Feldes und bestimmt die Zeitskala, auf der das ungetriebene System thermisch equilibriert. Da die Gleichung (1.154) zusammen mit (1.155) innerhalb der NIBA exakt ist, lassen sich die Koeffizienten p_m von $P^{(as)}(t)$ bis zur Ordnung $(\tau_c \omega)^{-(s+1)}$, falls $m \neq 0$, bzw. bis zur Ordnung $(\tau_c \omega)^{-s}$, falls m = 0, durch die Koeffizienten p_k mit $|k| \in \{0, \ldots, s\}$ gemäß der Relation

$$p_m^{(s+1)}(\omega) = \frac{i}{m\omega} \left(k_m^{(a)}(-im\omega) + \sum_{|k| \le s} p_k^{(s-|k|)}(\omega) k_{m-k}^{(s)}(-im\omega) \right) \quad \text{für } m \ne 0 \quad (4.69)$$

mit dem statischen Koeffizienten in nullter Ordnung $p_0^{(0)} = k_0^{(a)}(0)/k_0^{(s)}(0)$ bestimmen [40]. Die höheren Ordnungen $p_0^{(s)}$ mit $s \neq 0$ erhält man, indem man für die Koeffizienten p_m in Gleichung (1.152) die rechte Seite der Relation (4.69) einsetzt.

4.2.6 Hochtemperaturnäherung

Eine weitere Näherungsmöglichkeit ist auf Ebene der Korrelationsfunktion Q(t) zugänglich. Ausgehend von der Darstellung im Skalenlimes (1.95), lässt sich unter der Bedingung $k_{\rm B}T > \hbar/(\pi |t|)$ eine Hochtemperaturnäherung finden,

$$Q(t) = Q'(t) + iQ''(t) = 2\alpha \left[\ln \left(\frac{\hbar\beta\omega_c}{2\pi} \right) + \frac{\pi |t|}{\hbar\beta} \right] + i\pi\alpha \operatorname{sgn}(t).$$
(4.70)

Diese Form (4.70) ist auch dann anwendbar, wenn die Dynamik des Systems für Zeiten $|t| > \hbar\beta/\pi$ betrachtet werden soll. Damit lassen sich die Integrationskerne (1.158, 1.159) auf ein endliches Intervall abbilden, sodass diese numerisch einfach ausgewertet werden können. Exemplarisch sei nun $k_1^{(a)}$ aufgeführt. Nach Einsetzen von (4.70) in den Ausdruck [siehe Gleichungen (1.159) und (1.163)]

$$k_1^{(a)}(\lambda) = \Delta^2 \int_0^\infty d\tau \, e^{-\lambda\tau} e^{-Q'(\tau)} \sin \left[Q''(\tau)\right] A_1^{(a)}(\tau)$$
(4.71)

mit

$$A_1^{(a)}(\tau) = e^{-i\omega\tau/2}\cos(\epsilon_0\tau)J_1\left(\frac{2\epsilon_1}{\omega}\sin(\omega\tau/2)\right)$$
(4.72)

erhält man für $k_1^{(a)}(-i\omega)$ die Darstellung

$$k_{1}^{(a)}(-i\omega) = \Delta^{2} \left(\frac{2\pi k_{\rm B}T}{\hbar\omega_{\rm c}}\right)^{2\alpha} \sin(\pi\alpha) \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}\tau \,\mathrm{e}^{i\omega\tau/2} J_{1}\left(\frac{2\epsilon_{1}}{\omega}\sin(\omega\tau/2)\right) \times \cos(\epsilon_{0}\tau) \exp\left\{-\frac{2\alpha\pi\tau k_{\rm B}T}{\hbar}\right\}.$$

$$(4.73)$$

Beachtet man nun, dass der Produktterm, $e^{i\omega\tau/2}J_1\left(\frac{2\epsilon_1}{\omega}\sin(\omega\tau/2)\right)$, im Integranden die Periode $2\pi/\omega$ aufweist³ und die verbleibende unendliche Reihe gemäß der Identität

$$\sum_{n=0}^{\infty} \cos(a+nb) e^{-nc} = \frac{\cos(a)e^c - \cos(a-b)}{2\left(\cosh(c) - \cos(b)\right)} \quad \text{mit} \quad \text{Re}[c] > 0 \tag{4.74}$$

zusammengefasst werden kann, ergibt sich die Integraldarstellung über ein endliches Integrationsintervall

$$k_{1}^{(a)}(-i\omega) = \Delta^{2} \left(\frac{2\pi k_{\rm B}T}{\hbar\omega_{\rm c}}\right)^{2\alpha} \sin(\pi\alpha) \int_{0}^{2\pi/\omega} \mathrm{d}\tau \,\mathrm{e}^{i\omega\tau/2} J_{1}\left(\frac{2\epsilon_{1}}{\omega}\sin(\omega\tau/2)\right) \\ \times \exp\left\{-\frac{2\alpha\pi\tau k_{\rm B}T}{\hbar}\right\} \frac{\cos\left[\epsilon_{0}(\tau-\frac{2\pi}{\omega}\right] - \mathrm{e}^{\frac{4\alpha\pi^{2}k_{\rm B}T}{\hbar\omega}}\cos(\epsilon_{0}\tau)}{2\left[\cos\left(\epsilon_{0}\frac{2\pi}{\omega}\right) - \cosh\left(\frac{4\alpha\pi^{2}k_{\rm B}T}{\hbar\omega}\right)\right]}.$$

$$(4.75)$$

³ Auch für allgemeines *m* findet sich diese Periodizität in den Ausdrücken für $k_m^{(s/a)}(-im\omega)$ in $e^{im\omega\tau/2}J_m\left(\frac{2\epsilon_1}{\omega}\sin(\omega\tau/2)\right)$ für gerades *m* bzw. $e^{im\omega\tau/2}J_{|m|}\left(\frac{2\epsilon_1}{\omega}\sin(\omega\tau/2)\right)$ für ungerades *m*.



Abbildung 4.7: Imaginärteil von p_1 als Funktion von ω mit den Parameterwerten T = 200, $\epsilon_0 = 400$, $\alpha = 1/1000$ sowie $\epsilon_1 \in \{100, 200, 400, 600, 800, 1000\}$.

In analoger Weise lassen sich die Ausdrücke $k_1^{(s)}$ sowie $k_0^{(s/a)}$ darstellen, wodurch eine numerische Auswertung des ersten Fourierkoeffizienten $p_1(\omega)$ zugänglich wird, dessen Verhalten des Imaginärteils für hohe Frequenzen in Abbildung 4.7 beispielhaft dargestellt ist. Man erkennt hier die bereits im Abschnitt 4.2.3 diskutierten Resonanzen für Frequenzen $\omega \approx \epsilon_0/n$ mit $n \in \mathbb{N}$.

4.3 QSR im Experiment

In einem realistischen Szenario wie dem im Kapitel 2 erläuterten Aufbau lassen sich die experimentell kontrollierbaren Parameter in gewissen Grenzen variieren. Für ein Bose–Einstein–Kondensat bestehend aus Rubidiumatomen des Isotops⁸⁷Rb legen die nachstehenden Intervalle den experimentell zugänglichen Parameterraum fest:

$$\alpha \to 0 \dots 0.01$$
, $\epsilon_0 \to 0 \dots 0.1 \text{ MHz}$, (4.76)

$$\omega \to 0 \dots 10^8 \,\mathrm{s}^{-1}, \qquad \epsilon_1 \to 0 \dots 0.1 \,\mathrm{MHz}, \qquad (4.77)$$

$$T \to 0.5 \dots 5 \,\mu\mathrm{K}, \qquad \Delta \to 0 \dots 0.1 \,\mathrm{MHz}.$$

$$(4.78)$$

Die Werte, die der Kopplungsparameter α annehmen kann, erlauben eine schwache Kopplung zwischen System und Bad. Somit widerfährt dem System auch eine schwache Dämpfung. Ferner wird der Wert der Cutoff–Frequenz mit $\omega_c \approx 10^5 s^{-1}$ angenommen. In der Folge werden, soweit nicht anders erwähnt, Frequenzen in Einheiten des effektiven Tunnelmatrixelements Δ_e und Temperaturen in Einheiten des Verhältnisses $\hbar \Delta_e/k_B$ Tunnelmatrix elements $\Delta_{\rm e}$ und Temperaturen in Einheiten des Verhältnisses $\hbar \Delta_{\rm e}/k_{\rm B}$ angegeben.

Da die Lebensdauer eines Kondensats einige Zehntelsekunden nicht übersteigt, ist es wichtig, die Zeitskala des Einschwingverhaltens zu analysieren und damit die effektive Beobachtungszeit, in der eine annähernd asymptotische Systemdynamik vorliegt, abzuschätzen. Wie bereits im Abschnitt 1.3.1 diskutiert, liefern die Nullstellen der Gleichung (1.150) Auskunft über die charakteristische Zeitskala des Einschwingverhaltens.



Abbildung 4.8: η_1 , $4\pi |\chi_{\text{koh}}|^2$ und $4\pi |\chi_{\text{rel}}|^2$ als Funktion der Temperatur. $\epsilon_0 = 2$, $\alpha = 0.01$, $\omega = 0.05$.

4.3.1 Lineare Antwort

Die Wahl der Parameterwerte $\epsilon_0 = 2$, $\alpha = 0.01$, $\omega = 0.05$, $\Delta = 10$ kHz sowie $\epsilon_1 = 0.01$ erlaubt ein Lösen der Systemdynamik durch die Theorie der linearen Antwort. Die Gleichungen (4.33-4.35, 4.39) verwendend lässt sich die dynamische Suszeptibilität als Funktion der Temperatur darstellen. In der Abbildung 4.8 erkennt man ein Maximum der Funktion η_1 bei nicht verschwindender Temperatur und somit nicht verschwindender Rauschamplitude. Diese Signatur zeigt an, dass bei den gewählten Parameterwerten das Phänomen der QSR beobachtbar sein sollte. Die zugehörigen Einschwingzeiten liegen alle im Bereich von Bruchteilen von Millisekunden, wie aus Abbildung 4.9 ersichtlich wird.



Abbildung 4.9: Temperaturabhängigkeit des Einschwingverhaltens für $\epsilon_0=2,\,\alpha=0.01$ und $\omega=0.05.$

4.3.2 Niedrige Frequenzen

Für größere Amplituden des dynamischen Bias bei geringer treibender Frequenz lässt sich die Dynamik im Niederfrequenzregime analysieren (siehe Abschnitt 4.2.4). Mit $\epsilon_0 = 10, \alpha = 0.01, \omega = 10^{-4}, \Delta = 10 \text{ kHz}$ sowie $\epsilon_1 = 1$ lässt sich die quantenstochastische Resonanz im Rahmen des vorgeschlagenen Experiments beobachten [vgl. Abb. 4.10]. Die rauschinduzierte Unterdrückung höherer Harmonischer ist ebenfalls beobachtbar.



Abbildung 4.10: Temperaturabhängigkeit von η_1 . $\epsilon_0 = 10$, $\epsilon_1 = 1$, $\alpha = 0.01$.

Dieses im Abschnitt 4.2.4.1 diskutierte und abkürzend NIS genannte Verhalten ist, wenn auch schwach ausgeprägt, in Abbildung 4.11 zu erkennen. Die Übergangsdynamik des Systems ist bei den gegebenen Parametern im relevanten Temperaturbereich, in dem die Resonanz zu erwarten ist, nach spätestens 0.2ms abgeklungen [vgl. Abb. 4.12].



Abbildung 4.11: Temperaturabhängigkeit von η_3 . $\epsilon_0 = 10$, $\epsilon_1 = 1$, $\alpha = 0.01$.



Abbildung 4.12: Temperaturabhängigkeit des Einschwingverhaltens für $\epsilon_0 = 10, \epsilon_1 = 1, \omega = 10^{-4}$ und $\alpha = 0.01$.

4.3.3 Hohe Frequenzen

Auch hohe Frequenzen der äußeren treibenden Kraft lassen sich im vorgeschlagenen Experiment realisieren. Die Abbildung 4.13 zeigt den Verlauf der Funktion $\eta_1(T)$ in Abhängigkeit der Temperatur für $\epsilon_0 = 15$, $\alpha = 0.01$. Man erkennt ein breites



Abbildung 4.13: Temperaturabhängigkeit von $\eta_1(T)$ für $\epsilon_0 = 15$, $\epsilon_1 = 5$ und $\omega = 10$.

Maximum bei tiefen Temperaturen. Zum Vergleich ist die selbe Funktion für eine stärkere Badankopplung dargestellt. Daraus wird ersichtlich, dass sich das Maximum mit größer werdendem Kopplungsparameter α zu höheren Temperaturen hin verschiebt. Die Einschwingzeit bei den gegebenen Parameterwerten beträgt maximal 30 ms [vgl. Abb. 4.14]. Anstelle der Temperatur lässt sich experimentell auch die Frequenz der treibenden Kraft variieren. Zu erwarten sind in dem Fall die im Abschnitt 4.2.6 diskutierten kohärenten Übergänge für ganzzahlige Brüche $\omega = \epsilon_0/n$ mit $n = 1, 2, \ldots$ Mit $\epsilon_0 = 50$, T = 50 und $\alpha = 0.01$ findet man die in Abbildung 4.15 dargestellte Frequenzabhängigkeit von Im $[p_1(\omega)]$. Abbildung 4.16 zeigt die zugehörigen Einschwingzeiten als Funktion der treibenden Frequenz.



Abbildung 4.14: Temperaturabhängigkeit des Einschwingverhaltens für $\epsilon_0 = 15$, $\epsilon_1 = 5$, $\omega = 10$ und $\alpha = 0.01$.



Abbildung 4.15: Frequenzabhängigkeit von Im $[p_1(\omega)]$ für hohe Frequenzen. $T = 50, \epsilon_0 = 50, \alpha = 0.01.$



Abbildung 4.16: Frequenzabhängigkeit des Einschwingverhaltens für $\epsilon_0 = 50$, $\epsilon_1 = 50$ und $\alpha = 0.01$.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In den vorangehenden Kapiteln dieser Arbeit wird ein Experiment mit ultrakalten Quantengasen konzipiert, welches es ermöglicht, das Spin-Boson-Modell in einem weiten Parameterbereich zu studieren. Eingehend werden der experimentelle Aufbau sowie die theoretische Beschreibung der im Experiment manipulierten Systeme dargestellt. Ausführlich werden die Transformationen erläutert, die das theoretische Modell des Experiments auf das Spin–Boson–Modell abbilden. Dabei wird auch deren Gültigkeitsbereich und somit gleichzeitig die Limitationen der Abbildungsvorschrift diskutiert. Die Analysen zeigen, dass alle relevanten Parameter des Spin-Boson-Modells innerhalb des Experiments gut kontrolliert und auch in einem weiten Bereich variiert werden können. Ebenfalls gut lässt sich die System-Bad Kopplung einstellen. Das Experiment erlaubt es, die Wechselwirkung zwischen dem Spin und dem bosonischen Bad derart zu kontrollieren, dass sowohl eine völlige Entkopplung als auch schwache Ankopplungen möglich sind. Darüber hinaus demonstrieren die angestellten Überlegungen sowie die aufwendigen numerischen Simulationen auch, dass der Aufbau vielversprechend erscheint, erstmalig das Phänomen der stochastischen Resonanz im tiefen Quantenregime zuverlässig beobachten zu können. Sowohl lineare als auch nichtlineare Signaturen der quantenstochastischen Resonanz können im Rahmen des Experiments studiert werden und dienen damit der Verifikation eines der grundlegenden theoretischen Modelle offener Quantensysteme - dem Spin-Boson-Modell. Zusätzlich könnte das skizzierte Experiment hilfreich bei der Beantwortung weiterer Fragestellungen sein, die sich im Kontext getriebener Quantensysteme stellen. Interessant in dieser Hinsicht dürften beispielsweise Untersuchungen der Quanten–Jarzinsky–Relation und daraus abgeleiteter Zusammenhänge sein, die in dieser Arbeit jedoch nicht behandelt worden sind.

Mögliche, wenn auch zum gegenwärtigen Zeitpunkt nur recht vage abzuschätzende Anwendungen könnten im Bereich der Quanteninformationsverarbeitung liegen. Da in einem Quantencomputer die Grundbausteine der Recheneinheit, die sog. Qubits, nicht völlig entkoppelt von ihrer Umgebung präpariert werden können, werden die aus ihnen zusammengesetzten Quantengatter einer Dämpfung sowie einem störenden Rauschen ausgesetzt sein. Der Erkenntnisgewinn aus dem vorgeschlagenen Experiment und dem aus der Beobachtung der quantenstochastischen Resonanz resultierenden besseren Verständnis der Prozesse in offenen Quantensystemen könnte hilfreich bei der Konzeption von Quantensignalverstärkern sein. Diese würden es erlauben, die Berechnungszustände im Quantengatter über einen längeren Zeitraum kohärent zu manipulieren und somit die zur Verfügung stehende Rechenzeit auszudehnen, bevor sie im Rauschen untergehen bzw. die Rechenzustände durch einen Quantenrepeater neu präpariert werden müssen.

A Pfadintegralformalismus

Die Einführung in den Pfadintegralformalismus, die hier gegeben wird, ist ein kurzer Abriss dessen, was in den zahlreichen Lehrbüchern zu diesem Thema [53, 77, 80, 89] dargelegt wird. Die zeitabhängige Schrödinger Gleichung im nichtrelativistischen Fall lautet

$$\hat{H} \left| \psi(t) \right\rangle = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left| \psi(t) \right\rangle,$$

deren Lösung in der Form

$$|\psi(t_b)\rangle = \hat{U}(t_b, t_a) |\psi(t_a)\rangle$$
 mit $t_b > t_a$

geschrieben werden kann. Hierin ist $\hat{U}(t_b, t_a)$ der Zeitentwicklungsoperator. Mit diesem lässt sich die Übergangsamplitude K eines freien Teilchens beschreiben, welches zur Zeit t_a aus dem lokalisierten Zustand x_a startet und in den Zustand x_b zum späteren Zeitpunkt t_b übergeht. Symbolisch entspricht dies der Schreibweise

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b | U(t_b, t_a) | x_a \rangle, \quad t_b > t_a.$$
(A.1)

Der Einfachheit halber sei die Raumkoordinate x eindimensional. Aufgrund der fundamentalen Regeln bzgl. der Zusammensetzung von Zeitentwicklungsoperatoren¹ kann die Übergangsamplitude (A.1) in viele, N + 1-Stück, die Zeitdauer $\epsilon = t_n - t_{n-1} = (t_b - t_a)/(N + 1)$ weilende Entwicklungsoperatoren unterteilt werden:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \left\langle x_b \left| \hat{U}_{b,N} \hat{U}_{N,N-1} \cdots \hat{U}_{n,n-1} \cdots \hat{U}_{t_2,t_1} \hat{U}_{t_1,t_a} \right| x_a \right\rangle,$$
(A.2)

wobei zur kompakteren Notation die Abkürzung $\hat{U}_{p,q} := \hat{U}(t_p, t_q)$ eingeführt wurde. Fügt man nun zwischen jedes Paar der unitären Operatoren \hat{U} einen kompletten Satz von Zuständen ein,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_n \left| x_n \right\rangle \left\langle x_n \right| = \hat{1},$$

kann man die Übergangsamplitude als Produkt von N Integralen darstellen

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \prod_{n=1}^{N} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}),$$
(A.3)

 1 so gilt im Allgemeinen:

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{U}(t_b, t_i)\hat{U}(t_i, t_a) \quad \forall t_i \in]t_a, t_b[$$

wobei $x_{N+1} := x_b, t_{N+1} := t_b$ und $x_0 := x_a, t_0 := t_0$ gesetzt wurden. Der Integrand in Gleichung (A.3) besteht aus einem Produkt aus Übergangsamplituden für infinitesimale Zeitintervalle ϵ

$$K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) = \langle x_n | e^{-i\epsilon \hat{H}(t_n)/\hbar} | x_{n-1} \rangle,$$

mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H}(t) = H(\hat{p}, \hat{x}, t). \tag{A.4}$$

Angenommen, die Hamiltonfunktion H in Gleichung (A.4) besitze die Standardform als Summe aus kinetischer und potentieller Energie

$$H(p, x, t) = T(p, t) + V(x, t)$$
 (A.5)

dann kann für ein hinreichend kleines Zeitintervall, $\epsilon \ll 1$, der Zeitentwicklungsoperator

$$e^{-i\epsilon \hat{H}/\hbar} = e^{-i\epsilon (\hat{T}+\hat{V})/\hbar}$$

in faktorisierter Form dargestellt werden. Es lässt sich in diesem Fall die sog. Baker– Campbell–Hausdorff Formel anwenden,

$$e^{-i\epsilon(\hat{T}+\hat{V})/\hbar} = e^{-i\epsilon\hat{V}/\hbar} e^{-i\epsilon\hat{T}/\hbar} e^{-i\epsilon^2\hat{X}/\hbar^2}$$

In dieser Gleichung hat der Operator \hat{X} die Form einer Potenzreihe in ϵ bestehend aus Einfach- und Mehrfachkommutatoren

$$\hat{X} = \frac{i}{2}[\hat{V}, \hat{T}] - \frac{\epsilon}{\hbar} \left(\frac{1}{6} [\hat{V}, [\hat{V}, \hat{T}]] - \frac{1}{3} [[\hat{V}, \hat{T}], \hat{T}] \right) + \dots$$

Vernachlässigt man nun den Term \hat{X} , der durch den quadratischen Faktor ϵ^2 im Grenzfall $\epsilon \to 0$ ohnehin sehr rasch unterdrückt wird, kann die Übergangsamplitude approximiert werden. Man erhält die Näherung

$$\langle x_n \left| e^{-i\epsilon H(\hat{p},\hat{x},t_n)/\hbar} \right| x_{n-1} \rangle$$

$$\approx \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x \,\mathrm{d}p_n}{2\pi\hbar} \left\langle x_n \left| e^{-i\epsilon V(\hat{x},t_n)} \right| x \right\rangle \left\langle x \left| e^{-i\epsilon T(\hat{p},t_n)/\hbar} \right| p_n \right\rangle \left\langle p_n | x_{n-1} \right\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left\langle x_n \left| e^{-i\epsilon V(\hat{x},t_n)} \right| x \right\rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_n}{2\pi\hbar} e^{ip_n (x-x_{n-1})/\hbar} e^{-i\epsilon T(p_n,t_n)/\hbar}$$

$$(A.6)$$

Nach Berechnung der Matrixelemente

$$\langle x_n \left| e^{-i\epsilon V(\hat{x},t_n)} \right| x \rangle = \delta(x_n - x) e^{-i\epsilon V(x,t_n)},$$

kann der Ausdruck (A.6) auf die Form

$$\left\langle x_{n} \left| \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon H(\hat{p},\hat{x},t_{n})/\hbar} \right| x_{n-1} \right\rangle$$

$$\approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_{n}}{2\pi\hbar} \exp\left\{ \mathrm{i}p_{n} \frac{x_{n} - x_{n-1}}{\hbar} - \mathrm{i}\epsilon \frac{T(p_{n},t_{n}) + V(x_{n},t_{n})}{\hbar} \right\}$$
(A.7)

gebracht werden. Setzt man dies wiederum in die ursprüngliche Gleichung (A.3), erhält man das Mehrfachintegral

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) \approx \prod_{n=1}^{N} \left[\int_{\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_n}{2\pi\hbar} \right] \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \mathcal{A}^N \right\}, \qquad (A.8)$$

in welchem die Wirkungsgröße \mathcal{A}^N durch die Summe

$$\mathcal{A}^{N} = \sum_{n=1}^{N+1} \left[p_{n}(x_{n} - x_{n-1}) - \epsilon H(p_{n}, x_{n}, t_{n}) \right]$$
(A.9)

gegeben ist.

Geht man zusätzlich davon aus, dass die kinetische Energie die übliche Form $T(p, t) = \frac{p^2}{2M}$ besitzt — und damit die Hamiltonfunktion (A.5) zu

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(x,t)$$

wird, nimmt der Wirkungsterm (A.9) die Gestalt

$$\mathcal{A}^{N} = \sum_{n=1}^{N+1} \left[p_{n}(x_{n} - x_{n-1}) - \epsilon \, \frac{p_{n}^{2}}{2M} - \epsilon \, V(x_{n}, t_{n}) \right]$$

an. Quadratisches Ergänzen führt auf die Form

$$\mathcal{A}^{N} = \sum_{n=1}^{N+1} \left[-\frac{\epsilon}{2M} \left(p_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} M \right)^2 + \epsilon \frac{M}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 - \epsilon V(x_n, t_n) \right].$$

Das darin enthaltene Integral über den kanonischen Impuls p_n kann der Fresnel'schen Formel [35] folgend ausgewertet werden, und man erhält demnach

$$\int_{\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_n}{2\pi\hbar} \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{\epsilon}{2M} \left(p_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon}M\right)^2\right] = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{i}\,2\pi\hbar\epsilon/M}}$$

Damit kann man den Ausdruck (A.8) kompakter formulieren

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) \approx \frac{1}{\sqrt{i \, 2\pi\hbar\epsilon/M}} \prod_{n=1}^N \left[\int_\infty^\infty \frac{\mathrm{d}x_n}{\sqrt{i \, 2\pi\hbar\epsilon/M}} \right] \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{A}^N\right\}.$$
 (A.10)

Hierin wird der Wirkungsterm \mathcal{A}^N nun durch die Summe

$$\mathcal{A}^{N} = \epsilon \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_n, t_n) \right]$$
(A.11)

repräsentiert, wobei die Randwerte $x_{N+1} = x_b$ und $x_0 = x_a$ gesetzt werden. Die Integration im Ausdruck (A.10) erfolgt über alle Pfade im sog. Konfigurationsraum, die dem Teilchen erlauben, vom Anfangspunkt x_a zum Endpunkt x_b zu gelangen. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für jeden dieser Wege beträgt $\exp\{i\mathcal{A}^N/\hbar\}$. Im Kontinuumsgrenzfall $N \to \infty$ geht die Summe (A.11) in die lagrangesche Form der Wirkung über, d. h. in ein Funktional in Abhängigkeit der generalisierten Koordinaten q und \dot{q} hier x und \dot{x} :

$$\mathcal{A}[x] = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) \right] = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \, L(x, \dot{x}) \, .$$

Im Grenzfall schreibt man nun die Wahrscheinlichkeitsamplitude (A.10) als Pfadintegral

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathfrak{D}x \,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathcal{A}[x]/\hbar} \,.$$

Hierin steht das Symbol $\int \mathcal{D}x$ für ein im Grenzfall unendlichfaches Integral:

$$\int \mathcal{D}x \stackrel{\frown}{=} \lim_{N \to \infty} \frac{\prod_{n=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_n}{\sqrt{\mathrm{i} \, 2\pi \hbar \epsilon / M}^{N+1}}.$$

Im Gegensatz zum Operatorenkalkül im Schrödinger-, Heisenberg- oder Wechselwirkungsbild bietet der Pfadintegralformalismus einen anschaulichen Zugang zur Quantenphysik. Leider wird sich die Anschaulichkeit dieser Methode durch einen aufwendigeren mathematischen Rahmen erkauft, der den diesbezüglichen Berechnungen zu Grunde liegt. Jedoch existieren sowohl in manchen Fällen einfache Rekursionsmethoden [5, 18, 25] zur Auswertung der Pfadintegrale als auch hilfreiche Tabellenwerke [44], in denen für spezielle Formen der kinetischen und potentiellen Energie die expliziten Ausdrücke der entsprechenden Pfadintegrale zusammengetragen worden sind.

B Kubo Formalismus und Fluktuations–Dissipations–Theorem

Innerhalb der Linearen–Antwort–Theorie (auch als Kubo Formalismus bekannt) lässt sich das Fluktuations–Dissipations–Theorem herleiten. Dieses setzt die Relaxation eines schwach gestörten Systems mit dessen Fluktuationen im thermischen Gleichgewicht in Beziehung.

Betrachtet wird ein System, von dem angenommen wird, dass es seinen kanonischen Gleichgewichtszustand erreicht hat. Beschrieben wird es durch einen Hamiltonoperator \hat{H} . Nun wird zu einem gegebenen Zeitpunkt eine schwache externe Kraft δf_{ext} eingeschaltet, die auf die Systemkoordinate q wirkt und wodurch das System aus seinem Gleichgewichtszustand gebracht wird. Die zusätzliche Kraft führt zu einem zeitabhängigen Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{H} + \delta \hat{H}(t) = \hat{H} - q \,\delta f_{\text{ext}}(t) \,. \tag{B.1}$$

Mittels der Dichtematrix $\hat{\rho}(t)$ lässt sich die Zeitentwicklung von $\langle \hat{q}(t) \rangle$ für einen gemischten Anfangszustand gemäß

$$\langle \hat{q}(t) \rangle = \operatorname{tr}\{\hat{\rho}(t)\,\hat{q}\}$$
 (B.2)

bestimmen. Hierbei bezeichnet tr{...} die Spuroperation, für die im Fall der Dichtematrix die Invarianz tr{ $\hat{\rho}(t)$ } = 1 gilt. Die Dichtematrix erfüllt die Bewegungsgleichung

$$i\hbar\dot{\rho}(t) = [\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\rho}(t)] = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + [\delta\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)].$$
 (B.3)

Zum Einschaltzeitpunkt der Störung $\delta \hat{H}(t)$ sei das System im thermischen Gleichgewicht. Dies bedeutet für die Dichtematrix und den Erwartungswert der Zeitentwicklung,

$$\lim_{t \to -\infty} \hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_{\text{eq}} = e^{-\beta \hat{H}} / Z , \qquad (B.4)$$

$$\lim_{t \to -\infty} \hat{q}(t) = \langle \hat{q} \rangle_{\beta} = \operatorname{tr} \{ \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} \} / Z , \qquad (B.5)$$

$$Z = \operatorname{tr}\{\mathrm{e}^{-\beta \hat{H}}\}. \tag{B.6}$$

Bei hinreichend schwacher Störung lässt sich die mittlere Verschiebung der Ortskoordinate aus ihrer Position im Gleichgewicht als lineares Funktional der zeitlichen Entwicklung der externen Kraft δf_{ext} darstellen,

$$\delta \langle \hat{q}(t) \rangle = \langle \hat{q}(t) \rangle - \langle q \rangle_{\beta} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t' \,\chi(t-t') \delta f_{\mathrm{ext}}(t') \,. \tag{B.7}$$

Die in diesem Ausdruck vorkommende kausale Antwortfunktion $\chi(t)$ bezeichnet man als verallgemeinerte Suszeptibilität. Um diese zu bestimmen, setzt man zunächst

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_{eq} + \delta \hat{\rho}(t) \,. \tag{B.8}$$

Fügt man nun (B.8) in die Bewegungsgleichung (B.3) ein, erhält man in linearer Näherung

$$i\hbar\delta\hat{\rho}(t) = [\delta\hat{H}(t), \hat{\rho}_{eq}] + [\hat{H}, \delta\hat{\rho}(t)].$$
(B.9)

Sie besitzt die allgemeine Lösung

$$\delta\hat{\rho}(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t')/\hbar} [\delta\hat{H}(t'), \hat{\rho}_{\mathrm{eq}}] \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}(t-t')/\hbar} \,. \tag{B.10}$$

Diese wiederum kann im linken Ausdruck von Gleichung (B.7) eingesetzt werden, da mit (B.8) und aufgrund der Linearität der Spuroperation die Relation

$$\delta\langle \hat{q}(t)\rangle = \langle \hat{q}(t)\rangle - \langle q\rangle_{\beta} = \operatorname{tr}\{\hat{\rho}(t)q\} - \operatorname{tr}\{\hat{\rho}_{\mathrm{eq}}q\} = \operatorname{tr}\{\delta\hat{\rho}(t)q\}$$
(B.11)

gilt. Man findet für $\chi(t)$ einen Ausdruck, der mit dem antisymmetrischen Teil der Autokorrelationsfunktion des Ortes im thermischen Gleichgewicht verknüpft ist,

$$\chi(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \Theta(t) \langle [\hat{q}(t), \hat{q}(0)] \rangle_{\beta}.$$
 (B.12)

Die Stufenfunktion dient zur Erhaltung der Kausalität, da die Funktion $\chi(t)$ die lineare Antwort des Systems im Gleichgewicht auf eine externe Kraft darstellt, die erst nach dem Einschalten dieser Kraft physikalisch sinnvolle Ergebnisse liefern sollte. Die Gleichung (B.12) besitzt allgmeine Gültigkeit, da keine spezifischen Systemeigenschaften bei ihrer Herleitung verwendet worden sind.

Im weiteren werden nun Autokorrelationsfunktionen der Ortskoordinate definiert, wobei durch einen geeignet gewählten Zusatzterm gewährleistet wird, dass die Ausdrücke im Langzeitlimes gegen Null tendieren und somit deren Fouriertransformierte existiert,

$$C^{+}(t) \equiv C_{qq}(t) \equiv \langle \hat{q}(t)\hat{q}(0)\rangle_{\beta} - \langle \hat{q}(t)\rangle_{\beta} \langle \hat{q}(0)\rangle_{\beta}, \qquad (B.13)$$

$$C^{-}(t) \equiv C_{qq}(-t) \equiv \langle \hat{q}(0)\hat{q}(t)\rangle_{\beta} - \langle \hat{q}(0)\rangle_{\beta} \langle \hat{q}(t)\rangle_{\beta}.$$
(B.14)

Die thermischen Erwartungswerte $\langle \hat{q}(t) \rangle_{\beta}$ sind unabhängig von der Zeit. Daher gilt $\langle \hat{q}(t) \rangle_{\beta} = \langle \hat{q}(0) \rangle_{\beta}$. Da die Gleichungen (B.13) und (B.14) zueinander im Verhältnis $C^{+*}(t) = C^{-}(t)$ stehen, haben sie gleiche Real- und Imaginärteile

$$C^{\pm}(t) = S(t) \pm iA(t).$$
 (B.15)

Der Realteil S(t) entspricht der symmetrischen Autokorrelationsfunktion und kann durch den Antikommutator auf die kompakte Form

$$S(t) = S(-t) = \frac{1}{2} \langle [\hat{q}(t), \hat{q}(0)]_{+} \rangle_{\beta} - \langle \hat{q}(0) \rangle_{\beta}^{2}$$
(B.16)

gebracht werden, während der Imaginärteil sich als Erwartungswert des Kommutators ausdrücken lässt,

$$A(t) = -A(-t) = \frac{1}{2i} \langle [\hat{q}(t), \hat{q}(0)] \rangle.$$
 (B.17)

Vergleicht man nun die Gleichungen (B.12) und (B.17), erkennt man den Zusammenhang

$$\chi(t) = -\frac{2}{\hbar} \Theta(t) A(t) . \qquad (B.18)$$

Geht man in den Fourierraum und betrachtet die Ausdrücke

$$\tilde{C}^{\pm}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \, C^{\pm}(t) \,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} = \tilde{S}(\omega) \pm \mathrm{i}\tilde{A}(\omega) \tag{B.19}$$

$$\tilde{\chi}(\omega) \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}t \,\chi(t) \,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$$
(B.20)

ergibt sich für Gleichung (B.18) die Darstellung

$$\tilde{\chi}''(\omega) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \tilde{A}(\omega) = \frac{1}{2\hbar} \left(\tilde{C}^+(\omega) - \tilde{C}^-(\omega) \right) , \qquad (B.21)$$

wobei die Suszeptibilität in Real-, $\chi'(t)$, und Imaginärteil, $\chi''(t)$, aufgespalten wurde, $\chi(t) = \chi'(t) + i\chi''(t)$.

Um nun das Dissipations–Fluktuations–Theorem zu demonstrieren, ist es zunächst hilfreich, den kanonischen Operator $e^{-\beta \hat{H}} = e^{i\hat{H}\tau/\hbar}$ als Zeitentwicklungsoperator mit der Imaginärzeit $\tau = -i\hbar\beta$ aufzufassen. Damit gilt $e^{-\beta \hat{H}}\hat{q}(0)e^{\beta \hat{H}} = \hat{q}(i\hbar\beta)$. Verwendet man diese Schreibweise und benutzt die Invarianz der Spurbildung unter zyklischen Vertauschungen, ergibt sich

$$\operatorname{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\hat{q}(0)\hat{q}(t)\right\} = \operatorname{tr}\left\{\hat{q}(\mathrm{i}\hbar\beta\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\hat{q}(t)\right\} = \operatorname{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\hat{q}(t)\hat{q}(\mathrm{i}\hbar\beta)\right\}.$$
 (B.22)

Die Korrelationen im thermischen Gleichgewicht sind invariant gegenüber zeitlichen Translationen,

$$\langle \hat{q}(t)\hat{q}(t')\rangle_{\beta} = \langle q(t-t')q(0)\rangle_{\beta}, \qquad (B.23)$$

womit unter Verwendung von Gleichung (B.22) die Beziehung

$$C^{-}(t) = C^{+}(t - i\hbar\beta) \tag{B.24}$$

hergeleitet werden kann. Im Fourierraum entspricht dieser Zusammenhang dem bedeutsamen Ergebnis

$$\tilde{C}^{-}(\omega) = e^{-\omega\hbar\beta}\tilde{C}^{+}(\omega).$$
(B.25)

Setzt man nun diesen Ausdruck (B.25) in Gleichung (B.21) ein, erhält man das Fluktuations–Dissipations–Theorem nach Callen und Welton [12]

$$\tilde{\chi}''(\omega) = \frac{1}{2\hbar} \left(1 - e^{-\omega\hbar\beta} \right) \tilde{C}^+(\omega) \,. \tag{B.26}$$

Es ist auch möglich, die Fouriertransformierte der symmetrisierten Autokorrelationsfunktion mit dem Imaginärteil der Suszeptibilität, $\chi''(t)$ zu verknüpfen. Die Relation $\tilde{S}(\omega) = \frac{1}{2}[\tilde{C}^+(\omega) + \tilde{C}^-(\omega)]$ sowie Gleichung (B.25) führen auf

$$\tilde{S}(\omega) = \hbar \coth(\omega\hbar\beta/2)\tilde{\chi}''(\omega)$$
. (B.27)

Dieses quantenmechanische Fluktuations–Dissipations–Theorem lässt nun zwei Grenzfallbetrachtungen zu. Im tiefen Quantenregime, $k_{\rm B}T \ll \hbar\omega$, dominieren reine Quantenfluktuationen,

$$\tilde{S}(\omega) = \hbar |\tilde{\chi}''(\omega)| . \tag{B.28}$$

Der weitere Grenzfall für niedrige Frequenzen bzw. hohe Temperaturen, $\hbar\omega \ll k_{\rm B}T$, entspricht dem klassischen Bild,

$$\tilde{S}(\omega) = 2k_{\rm B}T \frac{\tilde{\chi}''(\omega)}{\omega}.$$
(B.29)

Die FDT–Relationen (B.26) und (B.27) sind ohne Verwendung spezieller Eigenschaften linearer Systeme abgeleitet worden. Sie sind somit für alle offenen Quantensysteme im thermischen Gleichgewicht gültig.

Literaturverzeichnis

- [1] http:/scholar.google.com
- [2] ABO-SHAEER, J. R.; RAMAN, C.; VOGELS, J. M.; KETTERLE, W.: Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates. In: *Science* 292 (2001), S. 5516
- [3] ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I.: Handbook of Mathematical Functions. 5th. New York : Dover Publications, 1968
- [4] ANDREWS, M. R.; TOWNSEND, C. G.; MIESNER, H.-J.; DURFEE, D. S.; KURN, D. M.; KETTERLE, W.: Observation of Interference Between Two Bose Condensates. In: *Science* 275 (1997), S. 5300
- [5] BARONE, F. A.; BOSCHI-FILHO, H.; FARINA, C.: Three Methods for Computing the Feynman Propagator. Mai 2002. arXiv:quant-ph/0205085
- [6] BENEDETTO, John J.; ZIMMERMANN, Georg: Sampling multipliers and the Poisson Summation Formula. In: *Journal of Fourier Analysis and Applications* 3 (1997), S. 505–523
- [7] BENZI, Roberto; SUTERA, Alfonso; VULPIANI, Angelo: The mechanism fo stochastic resonance. In: Journal of Physics A: Mathematical and General 14 (1981), S. L453–L457
- [8] BLOCH, I.; HÄNSCH, T. W.; ESSLINGER, T.: Measurement of the spatial coherence of a trapped Bose gas at the phase transition. In: *Nature* 403 (2000), S. 166–170
- BLOCH, Immanuel: Ultracold quantum gases in optical lattices. In: Nature physics 1 (2005), S. 23–30
- [10] BOSE, N.S.: Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. In: Zeitschrift für Physik 178–181 (1924), S. 26
- [11] CALDEIRA, A. O.; LEGGETT, A. J.: Quantum Tunnelling in a Dissipative System. In: Annals of Physics (N. Y.) 149 (1983), S. 374
- [12] CALLEN, Herbert B.; WELTON, Theodore A.: Irreversibility and Generalized Noise. In: *Phys. Rev.* 83 (1951), Jul, Nr. 1, S. 34–40
- [13] COHEN-TANNOUDJI, Claude ; DIU, Bernhard ; LALOË, Franck: Quantenmechanik. de Gruyter, 1999

- [14] COHEN-TANNOUDJI, Claude ; DUPONT-ROC, Jacques ; GRYNBERG, Gilbert: Atom-photon interactions: basic processes and applications. Wiley-VCH, 2004
- [15] COLLINS, James J.: Fishing for function in noise. In: Nature 402 (1999), S. 241–242
- [16] DAKHNOVSKII, Yuri: Dynamics of a two-level system with Ohmic dissipation in a time-dependent field. In: *Phys. Rev. B* 49 (1994), Feb, Nr. 7, S. 4649–4657
- [17] DALFOVO, F.; GIORINI, S.; PITAEVSKII, P.; STRINGARI, S.: Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. In: *Rev. Mod. Phys.* 71 (1999), S. 463
- [18] DITTRICH, W.; REUTER, M.: Classical and quantum dynamics: form classical paths to path integrals. 3. Auflage. Springer Verlag, 2001
- [19] DOUGLASS, John K.; WILKENS, Lon; PANTAZELOU, Eleni; MOSS, Frank: Noise enhancement of information transfer in crayfish mechanoreceptors by stochastic resonance. In: *Nature* 365 (1993), S. 337–340
- [20] EFETOV, K. B.; LARKIN, A. I.: Correlation functions in one-dimensional systems with a strong interaction. In: *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 69 (1975), S. 764–776
- [21] EFETOV, K. B.; LARKIN, A. I.: Correlation functions in one-dimensional systems with a strong interaction. In: Sov. Phys. JETP 42 (1975), S. 390–396
- [22] EINSTEIN, Albert: Quantentheorie des idealen einatomigen Gases. In: Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. (1925), S. 261
- [23] FESHBACH, Herman: Unified theory of nuclear reactions. In: Annals of Physics 5 (1958), Nr. 4, S. 357 – 390
- [24] FESHBACH, Herman: A unified theory of nuclear reactions. II. In: Annals of Physics 19 (1962), Nr. 2, S. 287 – 313
- [25] FEYNMAN, R. P.: Statistical Mechanics A Set of Lectures. W. A. Benjamin, Inc., 1972 (A Lecture Note and Reprint Series)
- [26] FEYNMAN, R. P. ; VERNON, F. L.: The Theory of a General Quantum System Interacting with a Linear Dissipative System. In: Annals of Physics 24 (1963), S. 118–173
- [27] FOOT, Christopher J. (Hrsg.): Atomic Physics. Oxford University Press, 2009
- [28] GAMMAITONI, Luca; HÄNGGI, Peter; JUNG, Peter; MARCHESONI, Fabio: Stochastic resonance. In: *Rev. Mod. Phys.* 70 (1998), Jan, Nr. 1, S. 223–287
- [29] GARCÍA-RIPOLL, Juan J.; CIRAC, Juan I.: Spin dynamics for bosons in an optical lattice. In: New Journal of Physics 5 (2003), S. 76.1–76.13

- [30] GERBIER, Fabrice ; WIDERA, Artur ; FÖLLING, Simon ; MANDEL, Olaf ; GERICKE, Tatjana ; BLOCH, Immanuel: Interference pattern and visibility of a Mott insulator. In: *Physical Review A* 72 (2005), S. 053606–1–053606–6
- [31] GERBIER, Fabrice ; WIDERA, Artur ; FÖLLING, Simon ; MANDEL, Olaf ; GERICKE, Tatjana ; BLOCH, Immanuel: Phase Coherence of an Atomic Mott Insulator. In: *Physical Review Letters* 95 (2005), S. 050404–1–050404–4
- [32] GIRARDEAU, M.: Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension. In: *Journal of Mathematical Physics* 1 (1960), Nr. 6, S. 516–523
- [33] GOYCHUK, I. A.; PETROV, E. G.; MAY, V.: Bridge-assisted electron transfer driven by dichotomically fluctuating tunneling coupling. In: *The Journal of Chemical Physics* 103 (1995), Nr. 12, S. 4937–4944
- [34] GRABERT, H.; SCHRAMM, P.; INGOLD, G.-L.: Quantum Brownian motion: The functional integral approach. In: *Physics Reports* 168 (1988), Nr. 115, S. 115–207
- [35] GRADSHTEYN, I. S.; RYZHIK, I. M.: Table of Integrals, Series, and Integrals. 6. Auflage. Academic Press, 2000
- [36] GREINER, M. ; MANDEL, O. ; ROM, T. ; ALTMEYER, A. ; WIDERA, A. ; HÄNSCH, T. W. ; BLOCH, I.: Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in an ultracold gas of atoms. In: *Physica B* 329–333 (2003), S. 11–12
- [37] GREINER, Markus; MANDEL, Olaf; ESSLINGER, Tilman; HÄNSCH, Theodor W.
 ; BLOCH, Immanuel: Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. In: *Nature* 415 (2002), S. 39–44
- [38] GREINER, Markus ; REGAL, Cindy A. ; JIN, Deborah S.: Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas. In: *Nature* 426 (2003), S. 537–540
- [39] GRIFONI, Milena: Dynamics of the dissipative two-state system under ac modulation of bias and coupling energy. In: *Phys. Rev. E* 54 (1996), Oct, Nr. 4, S. R3086–R3089
- [40] GRIFONI, Milena ; HÄNGGI, Peter: Nonlinear quantum stochastic resonance. In: *Physical Review E* 54 (1996), Nr. 2, S. 1390–1401
- [41] GRIFONI, Milena; SASSETTI, Maura; HÄNGGI, Peter; WEISS, Ulrich: Cooperative effects in the nonlinearly driven spin-boson system. In: *Physical Review E* 52 (1995), S. 3596–3607
- [42] GRIFONI, Milena; SASSETTI, Maura; STOCKBURGER, Jürgen; WEISS, Ulrich: Nonlinear response of a periodically driven damped two-state system. In: *Phys. Rev. E* 48 (1993), Nov, Nr. 5, S. 3497–3509

- [43] GRIFONI, Milena; WINTERSTETTER, Manfred; WEISS, Ulrich: Coherences and populations in the driven damped two-state system. In: *Phys. Rev. E* 56 (1997), Jul, Nr. 1, S. 334–345
- [44] GROSCHE, C.; STEINER, F.: Springer Tracts in Modern Physics. Bd. 145: Handbook of Feynman path integrals. Springer Verlag, 1998
- [45] GROSSMANN, F.; DITTRICH, T.; JUNG, P.; HÄNGGI, P.: Coherent destruction of tunneling. In: Phys. Rev. Lett. 67 (1991), Jul, Nr. 4, S. 516–519
- [46] GROSSMANN, F. ; HÄNGGI, P.: Localization in a Driven Two-Level Dynamics. In: EPL (Europhysics Letters) 18 (1992), Nr. 7, S. 571–576
- [47] GUINEA, F.: Dynamics of simple dissipative systems. In: *Physical Review B* 32 (1985), S. 4486–4491
- [48] HALDANE, F. D. M.: Effective Harmonic-Fluid Approach to Low-Energy Properties of One-Dimensional Quantum Fluids. In: *Phys. Rev. Lett.* 47 (1981), Dec, Nr. 25, S. 1840–1843
- [49] HALDANE, F. D. M.: 'Luttinger liquid theory' of one-dimensional quantum fluids. I. Properties of the Luttinger model and their extension to the general 1D interacting spinless Fermi gas. In: Journal of Physics C: Solid State Physics 14 (1981), Nr. 19, S. 2585–2609
- [50] HUANG, K.: Statistical Mechanis. 2nd. Wiley, 1988
- [51] JOCHIM, S.; BARTENSTEIN, M.; ALTMEYER, A.; HENDL, G.; RIEDL, S. ; CHIN, C.; DENSCHLAG, J. H.; GRIMM, R.: Bose-Einstein Condensation of Molecules. In: Science 302 (2003), S. 5653
- [52] KETTERLE, W. ; DRUTEN, N. van: Bose-Einstein Condensation of a Finite Number of Particles Trapped in One or Three Dimensions. In: *Physical Review A* 54 (1996), S. 656
- [53] KLEINERT, Hagen: Pfadintegrale in Quantenmechanik, Statistik und Polymerphysik. BI Wissenschaftsverlag, 1993
- [54] KUBO, Ryogo: Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems. In: *Journal* of the Physical Society of Japan 12 (1957), Nr. 6, S. 570–586
- [55] KUBO, Ryogo ; TODA, Morikazu ; HASHITSUME, Natsuki: Springer Series in Solid-State Sciences. Bd. 31: Statistical Physics II Nonequilibrium Statistical Mechanics. 2nd, corr. 3rd printing. Springer Verlag, 1998. – 279 S.
- [56] LAN, Yueheng; PAPOIAN, Garegin: Stochastic Resonant Signaling in Enzyme Cascades. In: *Physical Review Letters* 98 (2007), S. 228301

- [57] LANG, Gunther: Langzeitverhalten von Erwartungswerten und Korrelationsfunktionen in dissipativen Quantensystemen, Universität Stuttgart, Diss., 2000
- [58] LANG, Gunther; PALADINO, Elisabetta; WEISS, Ulrich: Coherence correlations in the dissipative two-state system. In: *Physical Review E* 58 (1998), S. 4288–4298
- [59] LANG, Gunther ; PALADINO, Elisabetta ; WEISS, Ulrich: Decay of correlations in the dissipative two-state system. In: *Europhysics Letters* 43 (1998), S. 117–122
- [60] LEGGETT, A. J.; CHAKRAVARTY, S.; DORSEY, A. T.; FISHER, Matthew P. A.; GARG, Anupam; ZWERGER, W.: Dynamics of the dissipative two-state system. In: *Rev. Mod. Phys.* 59 (1987), Jan, Nr. 1, S. 1–85
- [61] LEGGETT, Anthony J.; CHAKRAVARTY, S.; DORSEY, A. T.; FISHER, Matthew P. A.; GARG, Anupam; ZWERGER, W.: Erratum: Dynamics of the dissipative two-state system. In: *Rev. Mod. Phys.* 67 (1995), Jul, Nr. 3, S. 725–726
- [62] LIEB, Elliott H.: Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. II. The Excitation Spectrum. In: Phys. Rev. 130 (1963), May, Nr. 4, S. 1616–1624
- [63] LIEB, Elliott H.; LINIGER, Werner: Exact Analysis of an Interacting Bose Gas.
 I. The General Solution and the Ground State. In: *Phys. Rev.* 130 (1963), May, Nr. 4, S. 1605–1616
- [64] MADISON, K. W.; CHEVY, F.; WOHLLEBEN, W.; DALIBARD, J.: Vortex Formation in a Stirred Bose-Einstein Condensate. In: *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000), Jan, Nr. 5, S. 806–809
- [65] MAGNUS, W.; OBERHETTINGER, F.; TRICOMI, F. G.: Higher transcendental functions. McGraw-Hill Book Company, Inc., 1955
- [66] MANOUKIAN, E. B.: Quantum Theory. Springer Verlag, 2006
- [67] MATTHEWS, M. R. ; ANDERSON, B. P. ; HALJAN, P. C. ; HALL, D. S. ; WIEMAN, C. E. ; CORNELL, E. A.: Vortices in a Bose-Einstein Condensate. In: *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999), Sep. Nr. 13, S. 2498–2501
- [68] MATTIS, Daniel C.; LIEB, Elliot H.: Exact Solution of a Many-Fermion System and Its Associated Boson Field. In: J. Math. Phys. 6 (1965), S. 304–312
- [69] MURALI, K. ; SINHA, Sudeshna ; DITTO, William L. ; BULSARA, Adi R.: Reliable Logic Circuit Elements that Exploit Nonlinearity in the Presence of a Noise Floor. In: *Physical Review Letters* 102 (2009), Nr. 10, S. 104101
- [70] OLSHANII, M.: Atomic Scattering in the Presence of an External Confinement and a Gas of Impenetrable Bosons. In: *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998), Aug, Nr. 5, S. 938–941

- [71] PETHICK, C. ; SMITH, H.: Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases. 1st. Cambridge University Press, 2002
- [72] RECATI, A.; FEDICHEV, P. O.; ZWERGER, W.; DELFT, J. von; ZOLLER, P.: Atomic Quantum Dots Coupled to a Reservoir of a Superfluid Bose–Einstein Condensate. In: *Phys. Rev. Lett.* 94 (2005), S. 040404
- [73] RECATI, A.; FUCHS, J. N.; aÇA, C. S.; ZWERGER, W.: Casimir forces between defects in one-dimensional quantum liquids. In: *Phys. Rev. A* 72 (2005), Aug, Nr. 2, S. 023616
- [74] RUSSEL, David F.; WILKENS, Lon A.; MOSS, Frank: Use of behavioural stochastic resonance by paddle fish for feeding. In: *Nature* 402 (1999), S. 291–294
- [75] SAKURAI, J. J.: Modern Quantum Mechanics. Korrigierte Auflage. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1994
- [76] SASSETTI, Maura ; WEISS, Ulrich: Correlation functions for dissipative two-state systems: Effects of the initial preparation. In: *Physical Review A* 41 (1990), S. 5383–5393
- [77] SCHULMAN, L. S.: Techniques and Applications of Path Integration. John Wiley & Sons, Inc., 1981
- [78] STOCKBURGER, Jürgen T.; GRIFONI, Milena; SASSETTI, Maura: Nonlinear acoustic response of glasses in the tunneling model. In: *Phys. Rev. B* 51 (1995), Feb, Nr. 5, S. 2835–2843
- [79] STOCKBURGER, Jürgen: Kalte metallische Gläser, Universität Stuttgart, Diss., 1996
- [80] SWANSON, Mark: Path Integrals and Quantum Processes. Academic Press Limited, 1992
- [81] TIMMERMANS, E. ; TOMMASINI, P. ; HUSSEIN, M. ; KERMAN, A.: Feshbach resonances in atomic Bose-Einstein condensates. In: *Physics Reports* 315 (July 1999), S. 199–230(32)
- [82] TOMONAGA, Sin-Itiro: Remarks on Bloch's Method of Sound Waves applied to Many-Fermion Problems. In: Progress of Theoretical Physics 5 (1950), S. 544–569
- [83] WEBERRUSS, Volker A.: Quantenphysik im Überblick. R. Oldenbourg Verlag, München Wien, 1998
- [84] WEISS, U.; GRABERT, H.; HÄNGGI, P.; RISEBOROUGH, P.: Incoherent tunneling in a double well. In: *Physical Review B* 35 (1987), S. 9535
- [85] WEISS, U.; HÄFFNER, W.: Complex-time path integrals beyond the stationaryphase approximation: Decay of metastable states and quantum statistical metastability. In: *Physical Review D* 27 (1983), S. 2916

- [86] WEISS, Ulrich: Series in Modern Condensed Matter Physics. Bd. 10: Quantum Dissipative Systems. 3. Auflage. World Scientific, Singapore, 2008
- [87] WELLENS, Thomas ; SHATOKHIN, Vyacheslav ; BUCHLEITNER, Andreas: Stochastic resonance. In: *Reports on Progress in Physics* 67 (2004), Nr. 1, S. 45–105
- [88] WÜRTZ, Peter ; LANGEN, Tim ; GERICKE, Tatjana ; KOGLBAUER, Andreas ; OTT, Herwig: Experimental Demonstration of Single-Site Addressability in a Two-Dimensional Optical Lattice. In: *Physical Review Letters* 103 (2009), Nr. 8, S. 080404
- [89] ZINN-JUSTIN, Jean: Path Integrals in Quantum Mechanics. Oxford University Press, 2005
- [90] ZWIERLEIN, M. W.; STAN, C. A.; SCHUNCK, C. H.; RAUPACH, S. M. F.; GUPTA, S.; HADZIBABIC, Z.; KETTERLE, W.: Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules. In: *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003), Dec, Nr. 25, S. 250401

Lebenslauf

Name:	Roman Bedau	
Geburtsdatum:	01.01.1977	
Geburtsort:	Neustadt an der	Weinstraße
Schule:	1983 - 1987	Grundschule in Deidesheim
	1987 - 1996	Kurfürst–Ruprecht–Gymnasium in Neustadt an der Weinstraße
Studium:	1997 - 2002	Studium der Physik an der Universität Stuttgart
	März 2003	Diplom der Physik
	Seit Mai 2003	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am II. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart

Danksagung

Zu dem Gelingen dieser Arbeit haben viele beigetragen:

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. Ulrich Weiß, der mir diese Dissertation ermöglicht und sie mit förderndem Interesse begleitet hat. Seine wissenschaftliche Erfahrung, die wertvollen Diskussionen sowie die mir gewährte Freiheit habe ich stets genossen. Für sechs Jahre war ich zudem als wissenschaftlicher Mitarbeiter in den regen Gedankenaustausch am Lehrstuhl von Prof. Dr. Udo Seifert eingebunden. Die Erörterung von Detailfragen mit meinen Kollegen Dr. Gabriele Campagnano und Dr. Peter Nägele halfen mir bei der Lösung von Einzelproblemen meiner Arbeit.

Auch Prof. Dr. Günter Mahler sei herzlich für die Übernahme und rasche Anfertigung des Mitberichts gedankt.

Frau Anja Steinhauser und Frau Wiltrud Meyer–Haake danke ich für die freundliche Hilfe in organisatorischen Belangen.

Allen Mitgliedern des Instituts bin ich für die stets angenehme Atmosphäre dankbar.

Meinen Eltern Roswitha und Ernst Bedau sowie meinen Geschwistern Janos und Maren danke ich für die liebevolle und geduldige Unterstützung während der gesamten Zeit. Kaya Deniz bin ich für die schöne Gestaltung der Umschlagsseite sehr dankbar. Ohne den Rückhalt meines Freundeskreises wäre der Dissertationsalltag gelegentlich grau gewesen. Stellvertretend danke ich Daniel Belcher, Moritz Bommer, Steffen Kehl und Simone Merkle für ihre Aufmunterungen.