

Thermodynamische Eigenschaften periodisch kontrollierter Quantensysteme

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

Vorgelegt von
Marcus Stollsteimer
aus Stuttgart

Hauptberichter:	Prof. Dr. G. Mahler
Mitberichter:	Prof. Dr. H.-R. Trebin
Tag der mündlichen Prüfung:	28. Juli 2006



Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart
2006

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1. Born-Markow-Mastergleichung	5
1.1. Herleitung der Mastergleichung für ein ungetriebenes System . . .	5
1.2. Eigenschaften der Dämpfungskonstanten	9
1.2.1. KMS-Bedingung	9
1.2.2. Spezielle Bad-Modelle	10
2. Floquet-Basis	11
2.1. Quasienergien und Floquet-Zustände	12
2.2. Floquet-Zustände einiger Qubit-Modelle	15
2.2.1. σ_z -Treiber	15
2.2.2. Rotating-Field-Treiber (<i>RF-Treiber</i>)	17
2.2.3. σ_x -Treiber	20
3. Floquet-Mastergleichung	23
3.1. Herleitung der Floquet-Mastergleichung	23
3.2. Unterschiede zur ungetriebenen Mastergleichung	27
3.3. Mastergleichung für generisches Spektrum	27
3.3.1. Dissipator-Matrixelemente	29
3.3.2. Pauli-Mastergleichung	31
3.4. Grenzfall des ungetriebenen Systems	32
3.5. Eigenschaften des Gleichgewichtszustandes	33
3.5.1. Allgemeine Eigenschaften	33
3.5.2. Gleichgewicht für $T \rightarrow \infty$	35
3.5.3. Gleichgewicht für $T \rightarrow 0$	36
3.6. Gleichgewicht für Qubit-Modelle	36
3.7. Adiabatischer Grenzfall	38
3.8. Grenzfall des schnellen Treibers	39
4. Effektive Temperatur	41
4.1. Effektive Temperatur für das Zwei-Niveau-System	42
4.2. Effektive Temperatur für ein d -Niveau-System	43

5. Getriebenes gedämpftes Qubit	45
5.1. Relaxation in den quasistationären Zustand	45
5.1.1. Floquet-Mastergleichung	46
5.1.2. Unitär modelliertes Bad	47
5.1.3. Mastergleichung mit vereinfachtem Bad-Modell	49
5.2. Eigenschaften des Gleichgewichtszustandes	51
5.2.1. Temperaturabhängigkeit	51
5.2.2. Abhängigkeit von den Treiberparametern	52
5.2.3. Zeitabhängigkeit der Gleichgewichtszustände	54
6. Lokal getriebene Spinkette	59
6.1. Modell	59
6.2. Effektive Temperatur	60
6.3. Parameterabhängigkeit der effektiven Temperatur	62
7. Getriebenes Teilchen im Potenzialtopf	65
7.1. Modell	66
7.2. Effektive Plateau-Temperatur	68
8. Ströme in periodisch getriebenen Systemen	73
8.1. Definition von Treiber- und Badstrom	73
8.2. Strom bei zwei Bädern	74
8.3. Ströme für einen allgemeinen quasistationären Zustand	75
8.4. Ströme im Floquet-Gleichgewicht	76
8.5. Beispiel: Qubit mit σ_z -Treiber	77
9. Wärmestrom durch eine getriebene Spinkette	81
9.1. Modell	82
9.2. Zur Beschreibbarkeit von Nichtgleichgewichts-Zuständen	82
9.3. Fouriersches Gesetz der Wärmeleitung	86
9.4. Parameterabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit	86
9.5. Diskussion	89
Zusammenfassung und Ausblick	91
English Overview	95
Anhang	103
A. Verallgemeinerter Blochvektor	103
B. Verwendete Darstellung der Pauli-Operatoren	103
C. Einige Maße für Zustände	104
D. Qubit-Gleichgewicht	105

E. Bessel-Funktionen	105
F. Eigenschaften der $\omega_{\alpha\beta k}$, $A_{\alpha\beta}(k)$ und $A(\omega)$	105
Literaturverzeichnis	107
Symbolverzeichnis	111
Danksagung	113

Einleitung

Das Konzept der Quanteninformationstheorie [31] hat in den letzten Jahren in vielen Bereichen der Physik für Impulse gesorgt. Auf experimenteller Seite wurden dabei enorme Fortschritte bei der kohärenten Kontrolle von Quantensystemen gemacht. Gleichzeitig wurde das Interesse erneut auf einige der grundlegendsten und ältesten Konzepte und Fragen der Quantentheorie gelenkt, wie Verschränkung, Dekohärenz oder die Problematik ihrer Interpretation.

Für die Realisierung eines Quantenrechners wurden die verschiedensten physikalischen Systeme vorgeschlagen, wie z. B. Spinresonanz [11, 17], Ionenfallen [9], Quantenpunkte [27] oder Josephson-Kontakte [43], um nur einige zu nennen. Verbindendes Element all dieser Systeme und ein großer Verdienst der QIT ist eine gemeinsame, abstrahierte Beschreibung durch einige idealisierte Elemente.

Der fundamentale materielle Baustein ist das Zwei-Niveau-System oder Qubit, aus dem größere Systeme (Quantenregister) modular aufgebaut werden können. Die Kontrolle geschieht in der Form von nur wenigen unitären Transformationen, die als logische Gatter wirken. Aus diesen können komplizierte Algorithmen gebildet werden, die von einem klassisch gesteuerten Kontrollsystem z. B. in der Form von Pulsfolgen auf das System ausgeübt werden.

Eine weitere Gemeinsamkeit aller Modelle und ein großes Hindernis für die praktische Umsetzung eines funktionierenden Quantenrechners ist die Dekohärenz, die unweigerlich durch die Einbettung des Quantensystems in eine Umgebung entsteht. Um dieses Problem zu lösen wurden Methoden der Fehlerkorrektur entwickelt [44, 45], ein weiterer Ansatz ist die Ausnutzung dekohärenzfreier Unterräume [50]. Beide Methoden sind mit einer Erhöhung der benötigten Ressourcen verbunden, da nur ein Teil des Hilbertraumes für die eigentliche Rechnung zur Verfügung steht. Ein weiterer Zugang sind aus der NMR entlehnte periodische Kontrollschemas, die zur Stabilisierung von Quantenzuständen gegenüber internen Wechselwirkungen [25, 46] oder Wechselwirkungen mit einer Umgebung [48] dienen können.

Eine weitere Entwicklung der letzten Jahre ist das Konzept der Quantenthermodynamik [16]. Deren Ziel ist die Begründung thermodynamischen Verhaltens aus der Quantenmechanik. Zentrale Frage ist dabei die Herleitung des Zweiten Hauptsatzes im Rahmen der unitären Theorie. Dazu kommen

die Definition thermodynamischer Größen wie Temperatur oder Druck, und die Erklärung fundamentaler thermodynamischer Prozesse wie z. B. die Thermalisierung zweier gekoppelter Systeme. Eine weitere Fragestellung ist die Emergenz statistischer Effekte in sehr kleinen Quantensystemen [23].

In einem gegenläufigen Prozess wurden in den letzten Jahren auch verstärkt Modelle aus der Thermodynamik in die Quantenmechanik übertragen. So wurde unter anderem die Frage aufgeworfen, bis auf welche Größe eine zyklisch arbeitende Wärmekraftmaschine hinunterskaliert werden kann. Diese Systeme können dabei autonom arbeiten [47], die meisten der vorgeschlagenen Modelle verwenden jedoch einen externen periodischen Treiber [14, 21].

Drei Merkmale spielen also in ganz unterschiedlichen Zusammenhängen immer wieder eine zentrale Rolle

- ein modular aufgebautes (kleines) Quantensystem
- ein externer periodischer Kontrollmechanismus
- eine Umgebung bzw. ein Bad

Wir wollen uns im Folgenden der Beschreibung dieser Art von Modellen zuwenden, und uns fragen, ob allgemeine Aussagen über Eigenschaften solcher Systeme getroffen werden können. Besondere Aufmerksamkeit liegt dabei im Verhalten über lange Zeiten und der Frage, wie gewisse Eigenschaften des ungetriebenen gedämpften Systems durch den Treiber beeinflusst werden.

Verschiedene Methoden wurden zur Behandlung offener Quantensysteme entwickelt [7, 49], wir werden hier die Beschreibung mittels einer Mastergleichung wählen. Für die Behandlung der hier vorliegenden periodisch getriebenen Systeme wird diese mit der Methode der Quasienergien bzw. Floquet-Zustände kombiniert, benannt nach einem Theorem des französischen Mathematikers Gaston Floquet (1847–1920).

Die vorliegende Arbeit ist folgendermaßen aufgebaut. In Kapitel 1 wird zunächst die Herleitung der quantenoptischen Born-Markow-Mastergleichung für das ungetriebene System kurz umrissen. In Kapitel 2 wird die Darstellung des getriebenen Systems über Floquet-Zustände eingeführt. Diese wird dann auf ein einfaches Modellsystem angewandt, einem unterschiedlich getriebenen Qubit. In Kapitel 3 wird die Mastergleichung für das getriebene System in der Darstellung der Floquet-Basis hergeleitet. Ferner werden Eigenschaften des resultierenden Gleichgewichtszustandes und Unterschiede zum ungetriebenen System diskutiert. Das Grenzverhalten für verschiedene Treiberparameter wird ebenfalls betrachtet. In Kapitel 4 wird eine effektive Temperatur zur Beschreibung der Verteilung der Besetzungszahlen im Floquet-Gleichgewicht definiert. Diese wird auch in den folgenden Kapiteln anhand spezieller Modelle

diskutiert. In Kapitel 5 wird die Floquet-Mastergleichung auf ein getriebenes Qubit angewandt. Die Voraussagen werden mit zwei weiteren Ansätzen verglichen, einem unitär modellierten Bad und einer vereinfachten Mastergleichung. Als weiteres Modell wird in Kapitel 6 eine getriebene Spinkette betrachtet, ferner wird an diesem Modell das Konzept der effektiven Temperatur näher diskutiert. In Kapitel 7 wird die Besetzungsverteilung eines getriebenen Teilchens im Potenzialtopf betrachtet. Diese lässt sich ebenfalls sehr gut durch eine effektive Temperatur beschreiben, wenn auch nur abschnittsweise. In Kapitel 8 werden die Energieströme diskutiert, die in einem allgemeinen getriebenen dissipativen System auftreten können. Der Wärmestrom durch eine Spinkette zwischen zwei Bädern wird dann in Kapitel 9 näher betrachtet. Hier zeigen sich auch einige Grenzen für die Anwendbarkeit der Floquet-Mastergleichung.

1. Born-Markow-Mastergleichung

Für die Beschreibung offener Quantensysteme gibt es zahlreiche Ansätze. Wir verwenden hier die Methode der Mastergleichung. Aus der unitären Dynamik des Gesamtsystems aus System und Umgebung wird dabei eine nicht-unitäre reduzierte Bewegungsgleichung für das eigentlich interessierende System abgeleitet. Die genaue Beschaffenheit des Bades bzw. der Umgebung geht in die reduzierte Beschreibung nur noch in der Form einiger weniger Parameter ein.

Im nächsten Abschnitt wird die Herleitung der Mastergleichung für ein ungetriebenes System kurz wiederholt, in Kapitel 3 wird diese dann auf das System mit periodischem Treiber erweitert. Die bei den später betrachteten Systemen verwendeten Bad-Modelle werden in Abschnitt 1.2 beschrieben.

1.1. Herleitung der Mastergleichung für ein ungetriebenes System

Wir folgen bei der Herleitung der quantenoptischen Mastergleichung der Darstellung in [7], mit besonderer Betonung auf den eingehenden Voraussetzungen und Näherungen.

Das betrachtete System zerfällt in zwei Teile: das eigentlich interessierende System S und eine (große) Umgebung, das Bad B . Zwischen beiden Teilsystemen soll eine schwache Kopplung wirken. Der Gesamt-Hamiltonoperator lautet also

$$H = H_S + H_B + H_{SB}. \quad (1.1)$$

Dabei bezeichnen H_S und H_B die Hamiltonoperatoren der jeweiligen Systeme. Die Kopplung zwischen System und Bad wird durch den Wechselwirkungsterm

$$H_{SB} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha} \quad (1.2)$$

beschrieben. Die Operatoren A_α wirken im Hilbertraum des Systems S, die Operatoren B_α im Raum des Bades (A_α, B_α seien hermitesch). Das Bad soll sich im thermischen Zustand $\rho_B = e^{-\beta H_B} / Z_B$ befinden.

Nun betrachten wir die Zeitentwicklung des Gesamtsystems und leiten daraus eine Bewegungsgleichung für den reduzierten Dichteoperator ρ des eigentlichen Systems ab. Dafür erweist sich die Darstellung im Wechselwirkungsbild als vorteilhaft. Der Gesamtsystem-Dichteoperator ρ_{SB} lautet dort

$$\tilde{\rho}_{SB} = U^\dagger(t) \rho_{SB} U(t), \quad (1.3)$$

mit

$$U(t) = U_S \otimes U_B, \quad U_S(t) = e^{-iH_S t}. \quad (1.4)$$

Die ungestörte Zeitentwicklung der beiden Teilsysteme, die durch den Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ beschrieben wird, wird durch diesen Darstellungswechsel heraustransformiert. Für die Zeitentwicklung des Dichteoperators im Wechselwirkungsbild erhält man die Liouville-von-Neumann-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}_{SB} = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_{SB}, \tilde{\rho}_{SB}]. \quad (1.5)$$

(Im Folgenden soll $\hbar = 1$ angenommen werden.) Man erhält daraus für $\tilde{\rho}_{SB}$ folgende Integrodifferenzialgleichung

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}_{SB} = - \int_0^t ds [\tilde{H}_{SB}(t), [\tilde{H}_{SB}(s), \tilde{\rho}_{SB}(s)]] . \quad (1.6)$$

Diese Gleichung beinhaltet noch den Dichteoperator des gesamten Systems, außerdem hängt die momentane Änderung des Zustands von der vergangenen Zeitentwicklung ab. Für schwache Wechselwirkung zwischen System und Bad kann die Born-Näherung gemacht werden. Danach wird angenommen, dass das System nur schwach auf das Bad zurückwirkt, dieses also im kanonischen Zustand bleibt, und sich zwischen den beiden Systemen keine Verschränkung aufbaut,

$$\tilde{\rho}_{SB}(t) \approx \tilde{\rho}(t) \otimes \rho_B. \quad (1.7)$$

Da im thermischen Zustand keine Eigendynamik stattfindet ist dabei $\tilde{\rho}_B = \rho_B$.

Als weitere Vereinfachung wird die Markow-Annahme gemacht. Voraussetzung dafür ist, dass die Badkorrelationszeit klein gegenüber der Relaxationszeit des Systems ist, also $\tau_B \ll \tau_R$. Dann können im Bad auftretende Gedächtniseffekte vernachlässigt werden. Durch die Markow-Näherung wird zum

Einen erreicht, dass im Integrand von (1.6) nur noch der momentane Dichteoperator zur Zeit t auftritt, ferner kann die Integrationsgrenze auf Unendlich ausgedehnt werden, so dass die Bewegungsgleichung nicht mehr von einer Anfangsbedingung zur Zeit $t = 0$ abhängt.

Man erhält für die Zeitentwicklung des System-Dichteoperators $\tilde{\rho} = \text{Tr}_B(\tilde{\rho}_{\text{SB}})$ schließlich

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho} = -\text{Tr}_B \int_0^\infty d\tau [\tilde{H}_{\text{SB}}(t), [\tilde{H}_{\text{SB}}(t - \tau), \tilde{\rho}(t) \otimes \rho_B]]. \quad (1.8)$$

Wir betrachten an dieser Stelle die Transformation von H_{SB} in das Wechselwirkungs-Bild genauer. Diese ist besonders elegant durchzuführen, wenn man eine Zerlegung der Badoperatoren A in die Eigenoperatoren $A(\omega)$ von H_S vornimmt; diese ist gegeben durch

$$A = \sum_{\omega} A(\omega), \quad A(\omega) := \sum_{E' - E = \omega} \Pi_E A \Pi_{E'}. \quad (1.9)$$

Dabei nimmt ω alle (positiven und negativen) Übergangsfrequenzen im Eigensystem von H_S an. Die Operatoren Π_E und $\Pi_{E'}$ sind Projektoren auf die Eigenräume von H_S mit Energie E bzw. E' . Die Eigenoperatoren $A(\omega)$ erfüllen die Beziehungen

$$[H_S, A(\omega)] = -\omega A(\omega), \quad [H_S, A^\dagger(\omega)] = \omega A^\dagger(\omega). \quad (1.10)$$

Für die adjungierten Operatoren gilt

$$A(-\omega) = A^\dagger(\omega). \quad (1.11)$$

Daraus ergibt sich die Transformation der Eigenoperatoren in das Wechselwirkungs-Bild zu

$$U_S^\dagger A(\omega) U_S = e^{-i\omega t} A(\omega), \quad U_S^\dagger A^\dagger(\omega) U_S = e^{i\omega t} A^\dagger(\omega). \quad (1.12)$$

Für den Operator $\tilde{A}(t)$ erhält man also

$$\tilde{A}(t) = \sum_{\omega} e^{-i\omega t} A(\omega), \quad (1.13)$$

und damit durch Summation über alle in (1.2) auftretenden Kopplungsterme schließlich

$$\tilde{H}_{\text{SB}}(t) = \sum_{\omega, \alpha} e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \otimes \tilde{B}_\alpha(t). \quad (1.14)$$

Setzt man dies in Gleichung (1.8) ein, so erhält man durch Ausführen der Spur eine Gleichung für die Zeitentwicklung des Systems S

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho} = \sum_{\alpha\beta} \sum_{\omega\omega'} e^{-i(\omega-\omega')t} G_{\alpha\beta} (A_{\beta}(\omega)\tilde{\rho}A_{\alpha}^{\dagger}(\omega') - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega')A_{\beta}(\omega)\tilde{\rho}) + \text{h. c.}, \quad (1.15)$$

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \int_0^{\infty} ds e^{i\omega s} \text{Tr}_{\text{B}} \left(\tilde{B}_{\alpha}^{\dagger}(s) B_{\beta}(0) \rho_{\text{B}} \right) =: \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) + i S_{\alpha\beta}(\omega). \quad (1.16)$$

Die Eigenschaften des Bades gehen nur noch über die Parameter $G_{\alpha\beta}(\omega)$ in diese Bewegungsgleichung ein.

An dieser Stelle führen wir die *säkulare Näherung* durch: dabei werden in der Summe (1.15) nur Terme mit $\omega' = \omega$ behalten. Diese Näherung ist gerechtfertigt, wenn die im System auftretenden Zeiten τ_{S} (gegeben durch die inversen Frequenzdifferenzen $|\omega - \omega'|^{-1}$) kurz im Vergleich zur Relaxationszeit sind, also $\tau_{\text{S}} \ll \tau_{\text{R}}$. Die Terme mit $\omega \neq \omega'$ mitteln sich dann als schnell oszillierende Beiträge heraus.

Damit folgt schließlich die Mastergleichung in Lindblad-Form [18, 26]

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho} = -i[\tilde{H}_{\text{LS}}, \tilde{\rho}] + \mathcal{D}(\tilde{\rho}). \quad (1.17)$$

Die durch die Bad-Wechselwirkung verursachte Zeitentwicklung wird durch zwei Anteile bestimmt. Der inkohärente Anteil ist durch den Superoperator \mathcal{D} (*Dissipator*) gegeben

$$\mathcal{D}(\tilde{\rho}) = \sum_{\omega\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left(A_{\beta}(\omega)\tilde{\rho}A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \{A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)A_{\beta}(\omega), \tilde{\rho}\} \right), \quad (1.18)$$

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} \text{Tr}_{\text{B}} \left(\tilde{B}_{\alpha}^{\dagger}(s) B_{\beta}(0) \rho_{\text{B}} \right),$$

mit den Lindblad-Operatoren $A_{\alpha}(\omega)$ und den Dämpfungskonstanten $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$. Die Terme mit $\omega > 0$ beschreiben dabei Zerfallsprozesse mit einer Übergangsfrequenz ω , die Terme mit $\omega < 0$ entsprechende Anregungsprozesse. Die Dämpfungskonstanten folgen als Fourier-Transformierte der Badkorrelationsfunktionen und beinhalten auch die Abhängigkeit der Systemdynamik von der Badtemperatur T bzw. der *inversen Temperatur* $\beta = 1/k_{\text{B}}T$. Der kohärente Anteil der Dynamik ist durch den Lamb-Shift-Hamiltonian

$$\tilde{H}_{\text{LS}} = \sum_{\omega\alpha\beta} S_{\alpha\beta}(\omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega) \quad (1.19)$$

gegeben. Aus (1.10) folgt, dass dieser mit dem Systemhamiltonian vertauscht

$$[H_S, \tilde{H}_{LS}] = 0. \quad (1.20)$$

Im quantenoptischen Fall kann der Lamb-Shift-Hamiltonian vernachlässigt werden.

Wir werden die Mastergleichung später in der Regel direkt im Wechselwirkungs-Bild betrachten und gegebenenfalls die erhaltenen Zustände zurücktransformieren. Der Vollständigkeit halber soll hier aber auch noch die Form der Mastergleichung im Schrödinger-Bild angegeben werden. Transformiert man Gleichung (1.17) zurück, so erhält man zunächst

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[H_S + U_S \tilde{H}_{LS} U_S^\dagger, \rho] + U_S \mathcal{D}(\tilde{\rho}) U_S^\dagger. \quad (1.21)$$

Wegen (1.20) ist $H_{LS} = \tilde{H}_{LS}$. Mit (1.12) erhält man dann

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[H_S + H_{LS}, \rho] + \mathcal{D}(\rho). \quad (1.22)$$

Der Superoperator \mathcal{D} ist also in beiden Bildern identisch. Dies ist eine Folge daraus, dass die Lindblad-Operatoren Eigenoperatoren sind: die auftretenden Phasenfaktoren $e^{i\omega t}$ und $e^{-i\omega t}$ der transformierten Eigenoperatoren heben sich jeweils paarweise auf.

1.2. Eigenschaften der Dämpfungskonstanten

Die Dämpfungskonstanten $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ müssen im Prinzip aus einer mikroskopischen Theorie des Bades bestimmt werden, oft werden jedoch auch empirische Ansätze verwendet. Die für die späteren numerischen Rechnungen verwendeten Funktionen werden in Abschnitt 1.2.2 angegeben, eine grundlegende Eigenschaft aller Bad-Modelle folgt im nächsten Abschnitt.

1.2.1. KMS-Bedingung

Für ein Bad mit kanonischer Verteilung folgt aus der Kubo-Martin-Schwinger-Bedingung eine Beziehung zwischen den Raten von Zerfalls- und Anregungsprozessen derselben Frequenz [7]

$$\gamma_{\alpha\beta}(-\omega) = e^{-\beta\hbar\omega} \gamma_{\beta\alpha}(\omega). \quad (1.23)$$

Damit gilt insbesondere für hohe Temperaturen ($T \rightarrow \infty$ bzw. $\beta \rightarrow 0$)

$$\gamma_{\alpha\beta}(-\omega) = \gamma_{\beta\alpha}(\omega). \quad (1.24)$$

Wie bekannt sind in diesem Fall die Raten für Absorptions- und Emissionsprozesse identisch.

1.2.2. Spezielle Bad-Modelle

Zur Charakterisierung der verwendeten Bad-Modelle verwenden wir eine (empirisch motivierte) Beschreibung über die spektrale Dichte [39], für die die folgende Form angenommen wird

$$I(\omega) \propto \omega^\xi \theta(\omega). \quad (1.25)$$

Dabei ist $\theta(\omega)$ die Heaviside-Funktion. Die Dämpfungsrate soll dann durch

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} \gamma(\omega) \quad (1.26)$$

gegeben sein, mit

$$\gamma(\omega) = \frac{I(-\omega) - I(\omega)}{e^{-\beta\hbar\omega} - 1}. \quad (1.27)$$

Der Parameter ξ nimmt dabei für verschiedene Bad-Typen unterschiedliche Werte an:

- Für das dreidimensionale quantisierte Strahlungsfeld [7] erhält man ein Bad mit $\xi = 3$

$$\gamma(\omega) = \gamma_0 \frac{\omega^3}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad \gamma_0 = \frac{4}{\hbar c^3}. \quad (1.28)$$

- Für die Annahme einer konstanter Zustandsdichte [5, 22] mit $\xi = 0$ folgt

$$\gamma(\omega) = \gamma_0 \left| \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right|. \quad (1.29)$$

Mit Ausnahme von Kapitel 7 wird für alle späteren numerischen Rechnungen die Dämpfungskonstante (1.28) des quantisierten Strahlungsfeldes verwendet.

2. Floquet-Basis

Wir wenden uns nun dem getriebenen System zu. Ein semiklassischer Treiber, der selbst nicht als quantenmechanisches System modelliert ist, äußert sich in der expliziten Zeitabhängigkeit bestimmter Systemparameter, wie z. B. eines magnetischen Feldes. Der Hamiltonoperator lautet nun

$$H_S(t) = H_0 + H_{\text{dr}}(t). \quad (2.1)$$

Die einzige Forderung an das System sei eine Beschränkung auf periodische Treiber mit der Treiberfrequenz Ω , also

$$H_{\text{dr}}(t + \tau) = H_{\text{dr}}(t), \quad \tau = 2\pi/\Omega. \quad (2.2)$$

Die Aufteilung in einen ungestörten Hamiltonian und einen Treiberhamiltonian ist dabei einer gewissen Willkür unterworfen, und wird auch für die restlichen Betrachtungen dieses Kapitels nicht benötigt. Eine naheliegende Möglichkeit ist, alle konstanten Beiträge in H_0 zusammenzufassen, so dass

$$\frac{1}{\tau} \int_0^\tau H_{\text{dr}}(t) dt = 0. \quad (2.3)$$

Zur Beschreibung dieses Modells bieten sich die Floquet-Zustände an, die eine dem periodischen System angepasste Basis darstellen. Dieser Zugang ist nicht auf spezielle Modelle beschränkt, wie etwa Treiber, die nur eine kleine Störung darstellen, die Floquet-Zustände müssen dann aber in der Regel numerisch bestimmt werden. Der Effekt des Treibers auf die Dynamik des Systems ist dafür allerdings exakt in der Beschreibung enthalten, und der Zeitentwicklungsoperator kann in einer relativ einfachen Form dargestellt werden.

Explizit zeitabhängige Systeme können nach ihrer Komplexität grob kategorisiert werden. Am einfachsten sind Systeme zu behandeln, bei denen der Hamiltonoperator mit seiner Zeitableitung vertauscht. Dies sind gerade die Modelle, bei denen nur die Energieeigenwerte zeitabhängig sind, während das Eigensystem konstant bleibt. Dann lässt sich der Zeitentwicklungsoperator ganz analog zum ungetriebenen Fall angeben [10]

$$[H_S'(t), H_S(t)] = 0 \quad \Rightarrow \quad U_S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H_S(t') dt'}. \quad (2.4)$$

Für beliebige Hamiltonoperatoren nimmt der Zeitentwicklungsoperator jedoch nicht diese einfache Form an, da $\frac{d}{dt}e^{F(t)} = F'(t)e^{F(t)}$ im Allgemeinen nur für $[F'(t), F(t)] = 0$ gilt. Ferner gibt es Systeme, die diese Bedingung nicht erfüllen, bei denen aber durch einen Übergang in ein mitrotierendes Koordinatensystem (*Rotating Frame*) die explizite Zeitabhängigkeit des Hamiltonoperators heraustransformiert werden kann. In den meisten Fällen sind zeitabhängige Systeme jedoch nicht geschlossen lösbar.

Für jeden dieser drei Fälle wird in Abschnitt 2.2 ein einfaches Beispiel betrachtet.

2.1. Quasienergien und Floquet-Zustände

Die Methode der Floquet-Zustände hat ihren Ursprung in der magnetischen Resonanz, wo sie zur Beschreibung von Spinsystemen in oszillierenden magnetischen Feldern entwickelt wurde. Einige grundlegende Eigenschaften dieser Zustände sollen hier zusammengefasst werden, ausführlichere Darstellungen finden sich in [41, 42].

Wir betrachten also ein System mit periodischer Zeitabhängigkeit des Hamiltonoperators,

$$H_S(t + \tau) = H_S(t), \quad \tau = 2\pi/\Omega. \quad (2.5)$$

Wir beschränken uns dabei auf Systeme mit endlich-dimensionalem Hilbertraum. Für diese existieren Lösungen der Schrödingergleichung der Form

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\mathcal{E}t/\hbar} |\mathcal{E}(t)\rangle. \quad (2.6)$$

Der reelle Parameter \mathcal{E} wird als *Quasienergie* bezeichnet. Diese Form folgt direkt aus dem Floquet-Theorem für lineare Differenzialgleichungen mit periodischen Koeffizienten. Bei unendlich-dimensionalen Systemen können Lösungen dieser Form ebenfalls existieren, nicht aber notwendigerweise, siehe [33, 40]. Die *Floquet-Zustände* $|\mathcal{E}(t)\rangle$ bilden für jede Zeit t eine vollständige orthonormale Basis des System-Hilbertraumes und erfüllen die Bedingung

$$|\mathcal{E}(t + \tau)\rangle = |\mathcal{E}(t)\rangle, \quad (2.7)$$

sie zeigen also dieselbe Periodizität wie der Treiberhamiltonian, so dass jeweils nach einer Treiberperiode τ bis auf eine Phase wieder derselbe Zustand vorliegt. Sie können daher als *quasistationäre* Zustände betrachtet werden, die für das getriebene System an die Stelle der Eigenzustände treten. Entartete Floquet-Zustände bilden einen quasistationären Unterraum des vollständigen System-Hilbertraumes.

Nun soll eine Bestimmungsgleichung für die Quasienergien und Floquet-Zustände abgeleitet werden. Dazu betrachten wir die zeitabhängige Schrödingergleichung, die mit (2.6) die folgende Form annimmt

$$\mathcal{H}_F |\mathcal{E}(t)\rangle = \mathcal{E} |\mathcal{E}(t)\rangle, \quad \text{mit } \mathcal{H}_F := H_S(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (2.8)$$

Dabei ist \mathcal{H}_F der so genannte *Floquet-Hamiltonian*. Aufgrund ihrer Periodizität können $|\mathcal{E}(t)\rangle$ und $H_S(t)$ als Fourierreihen geschrieben werden

$$|\mathcal{E}(t)\rangle = \sum_{q=-\infty}^{\infty} e^{iq\Omega t} |u^{(q)}\rangle, \quad (2.9)$$

$$H_S(t) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} e^{iq\Omega t} H^{(q)}, \quad \text{mit } H^{(-q)} = [H^{(q)}]^\dagger, \quad (2.10)$$

wobei die letzte Bedingung gewährleistet, dass $H_S(t)$ selbstadjungiert ist; zur vollständigen Bestimmung des Hamiltonoperators genügt also die Angabe der Koeffizienten mit $q \geq 0$. Umgekehrt ergeben sich die Koeffizienten der Fourierreihe aus

$$|u^{(q)}\rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau e^{-iq\Omega t} |\mathcal{E}(t)\rangle dt, \quad H^{(q)} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau e^{-iq\Omega t} H_S(t) dt. \quad (2.11)$$

Man erhält nun aus (2.8) eine zeitunabhängige Eigenwertgleichung für den Floquet-Hamiltonian

$$\sum_j \left(H^{(k-j)} + \delta_{kj} k \hbar \Omega \right) |u^{(j)}\rangle = \mathcal{E} |u^{(k)}\rangle. \quad (2.12)$$

Die Quasienergien und Floquet-Zustände können also über das Eigenwertproblem des unendlich-dimensionalen Floquet-Hamiltonians bestimmt werden. Die Matrix-Darstellung von \mathcal{H}_F ist gegeben durch

$$(\mathcal{H}_F) = \begin{pmatrix} \dots & & & & & \\ H^{(0)} + 2\hbar\Omega & H^{(1)} & H^{(2)} & H^{(3)} & H^{(4)} & \\ H^{(-1)} & H^{(0)} + \hbar\Omega & H^{(1)} & H^{(2)} & H^{(3)} & \\ H^{(-2)} & H^{(-1)} & H^{(0)} & H^{(1)} & H^{(2)} & \\ H^{(-3)} & H^{(-2)} & H^{(-1)} & H^{(0)} - \hbar\Omega & H^{(1)} & \\ H^{(-4)} & H^{(-3)} & H^{(-2)} & H^{(-1)} & H^{(0)} - 2\hbar\Omega & \\ & & & & \dots & \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Für numerische Rechnungen wird die Fourierreihe bei einer endlichen Grenze abgebrochen, die Summation erfolgt dann bis zur Ordnung $\pm q_{\max}$.

Die periodische Struktur von \mathcal{H}_F führt auch zu einer Periodizität der Eigenwerte: wenn \mathcal{E} Eigenwert ist, dann auch $\mathcal{E} + n\hbar\Omega$ mit $n \in \mathbb{Z}$. Die zugehörigen Zustände $|\mathcal{E}\rangle$ und $|\mathcal{E} + n\hbar\Omega\rangle$ sind jedoch physikalisch äquivalent, wobei zwischen ihnen der Zusammenhang

$$|\mathcal{E} + n\hbar\Omega\rangle = e^{in\Omega t} |\mathcal{E}\rangle \quad (2.14)$$

besteht. (Dies entspricht einer „Verschiebung“ der Fourier-Koeffizienten um n Positionen.) Die Floquet-Zustände können daher so gewählt werden, dass sämtliche Quasienergien in einem Bereich der Breite $\hbar\Omega$ liegen, z. B. in der Zone

$$0 \leq \mathcal{E} < \hbar\Omega. \quad (2.15)$$

Für ungetriebene Systeme mit $H_S = \text{konst}$ fallen die Floquet-Zustände und Quasienergien mit den Energie-Eigenzuständen bzw. -Eigenwerten zusammen. Diese erfüllen Gleichung (2.6) mit $|\mathcal{E}(t)\rangle = |E\rangle = \text{konst}$. Allerdings ist für diesen Fall kein Ω definiert, eine freie Wahl einer Zone wie in Gleichung (2.15) ist nicht möglich.

Das Normquadrat der Floquet-Zustände lässt sich darstellen als

$$\langle \mathcal{E}(t) | \mathcal{E}(t) \rangle = \sum_q \mathcal{N}^{2(q)} e^{iq\Omega t}, \quad \text{wobei } \mathcal{N}^{2(q)} := \sum_k \langle u^{(k)} | u^{(k+q)} \rangle. \quad (2.16)$$

Da es sich um Lösungen der Schrödingergleichung handelt, ist die Norm erhalten, es muss somit $\mathcal{N}^{2(q)} = 0$ für $q \neq 0$ gelten. Daher folgt $\langle \mathcal{E}(t) | \mathcal{E}(t) \rangle = \mathcal{N}^{2(0)}$. Die Normierungsbedingung für die Floquet-Zustände lautet also

$$\langle \mathcal{E}(t) | \mathcal{E}(t) \rangle = \sum_k \langle u^{(k)} | u^{(k)} \rangle = 1. \quad (2.17)$$

Bei einem getriebenen System verlieren die Energieeigenwerte ihre Bedeutung, stattdessen kann jedoch eine mittlere Energie eingeführt werden [13], mit (2.8) erhält man

$$\bar{E} := \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \langle \mathcal{E}(t) | H_S(t) | \mathcal{E}(t) \rangle dt = \sum_q (\mathcal{E} - q\hbar\Omega) \langle u^{(q)} | u^{(q)} \rangle \quad (2.18)$$

$$= \mathcal{E} - \sum_q q\hbar\Omega \langle u^{(q)} | u^{(q)} \rangle. \quad (2.19)$$

Schließlich lässt sich der Zeitentwicklungsoperator U_S des getriebenen Systems mithilfe der Floquet-Zustände in eine besonders einfache Form bringen

$$U_S(t) = \sum_{\alpha} e^{-i\mathcal{E}_{\alpha}t/\hbar} |\mathcal{E}_{\alpha}(t)\rangle \langle \mathcal{E}_{\alpha}(0)|. \quad (2.20)$$

2.2. Floquet-Zustände einiger Qubit-Modelle

Die Floquet-Zustände für einige einfache Systeme, nämlich ein Qubit mit unterschiedlichen Treiber-Typen, sollen nun etwas näher betrachtet werden. Man erhält hier eine Basis aus zwei zeitabhängigen Floquet-Zuständen, für die sich eine Darstellung über den Blochvektor anbietet, siehe dazu auch Anhang A. Die Floquet-Zustände sind zu jeder Zeit orthogonal zueinander, die zugehörigen Blochvektoren λ_+ und λ_- erfüllen daher die Beziehung

$$\lambda_-(t) = -\lambda_+(t). \quad (2.21)$$

Die Zeitentwicklung dieser Zustände lässt sich sehr anschaulich durch die Trajektorien der Blochvektoren auf der Blochkugel darstellen.

Die im Folgenden betrachteten Modelle können zum Teil exakt gelöst werden, im Regelfall müssen die Floquet-Zustände jedoch numerisch bestimmt werden. Der ungestörte Hamiltonoperator lautet in allen Fällen

$$H_0 = \hbar \frac{\nu}{2} \sigma_z. \quad (2.22)$$

Dies entspricht einem Qubit mit Energieaufspaltung ν . Dessen Eigenzustände werden mit $|-\rangle$ und $|+\rangle$ bezeichnet. Der Einfachheit halber werden nur Treiber-Modelle mit einer sinus- oder kosinusförmigen Zeitabhängigkeit betrachtet, so dass in der Fourierreihe für $H_S(t)$ nur die Komponenten $H^{(0)}$ (der ungestörte Hamiltonian) und $H^{(\pm 1)}$ (der Treiber) auftreten. Die verschiedenen Treiber lassen sich dann nach der Form von $H^{(1)}$ unterscheiden.

2.2.1. σ_z -Treiber

Eine periodische Änderung der Energieaufspaltung soll wegen der entsprechenden Form des Treiberhamiltonians $H_{\text{dr}} \propto \sigma_z$ als „ σ_z -Treiber“ bezeichnet werden. Dieses Modell ist insofern ausgezeichnet, als die Eigenzustände durch die Treiberdynamik nicht verändert werden. Es erfüllt die Bedingung (2.4) und ist daher für beliebige Form der Zeitabhängigkeit exakt lösbar. Wir behandeln zunächst die allgemeine Lösung und kommen später wieder auf den speziell sinusförmigen Treiber zurück. Der Hamiltonian lautet dann

$$H_S = \hbar \left\{ \frac{\nu}{2} + g(t) \right\} \sigma_z, \quad \text{wobei } g(t) = \frac{d}{dt} G(t). \quad (2.23)$$

Die Funktion $G(t)$ soll dabei die Bedingung $G(t + \tau) = G(t)$ erfüllen, somit ist $g(t)$ ebenfalls periodisch mit Ω und dem zeitlichen Mittelwert Null.

Mit dem Ansatz

$$|\mathcal{E}_-\rangle = f_-(t) |-\rangle, \quad |\mathcal{E}_+\rangle = f_+(t) |+\rangle, \quad (2.24)$$

erhält man aus der Schrödingergleichung (2.8) folgende Lösung für die Funktionen f_{\pm}

$$f_{\pm}(t) = e^{\mp i\{(\frac{\nu}{2} \mp \mathcal{E}_{\pm}/\hbar)t + G(t)\}}. \quad (2.25)$$

Damit die Periodizität der Floquet-Zustände gegeben ist, muss die Bedingung $f_{\pm}(t + \tau) = f_{\pm}(t)$ erfüllt sein. Damit folgt für die Quasienergien

$$\mathcal{E}_{\pm} = \hbar(k_{\pm}\Omega \pm \frac{\nu}{2}), \quad k_{\pm} \in \mathbb{Z}. \quad (2.26)$$

Man erhält also mit der Wahl $k_{\pm} = 0$

$$\mathcal{E}_- = -\frac{\hbar\nu}{2}, \quad |\mathcal{E}_-(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{+iG(t)} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

$$\mathcal{E}_+ = +\frac{\hbar\nu}{2}, \quad |\mathcal{E}_+(t)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-iG(t)} \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

Die Floquet-Zustände unterscheiden sich also nur durch eine Phase von den Eigenzuständen. Damit stimmen insbesondere alle Erwartungswerte mit den Erwartungswerten der ungestörten Eigenzustände überein. Man erhält für die mittleren (und gleichzeitig auch momentanen) Energieerwartungswerte daher

$$\overline{E}_{\pm} = \pm \frac{\hbar\nu}{2}. \quad (2.29)$$

Wir betrachten nun noch die Fourier-Koeffizienten $|u^{(q)}\rangle$ der Floquet-Zustände. Dazu sei der Treiber nun wieder sinusförmig, mit

$$g(t) = g \sin \Omega t, \quad \text{also } G(t) = -\frac{g}{\Omega} \cos \Omega t. \quad (2.30)$$

Die Fourier-Komponenten des Hamiltonoperators sind dann

$$H^{(0)} = \hbar \frac{\nu}{2} \sigma_z, \quad H^{(1)} = \frac{\hbar}{2i} g \sigma_z. \quad (2.31)$$

Für die Komponenten der Floquet-Zustände erhält man aus (2.11)

$$\begin{aligned} |u_{\pm}^{(q)}\rangle &= \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} e^{-iq\Omega t} e^{\mp iG(t)} |\pm\rangle dt = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-iqx + i(\pm g/\Omega) \cos x} dx |\pm\rangle \\ &= e^{\frac{iq\pi}{2}} J_q(\pm g/\Omega) |\pm\rangle, \end{aligned} \quad (2.32)$$

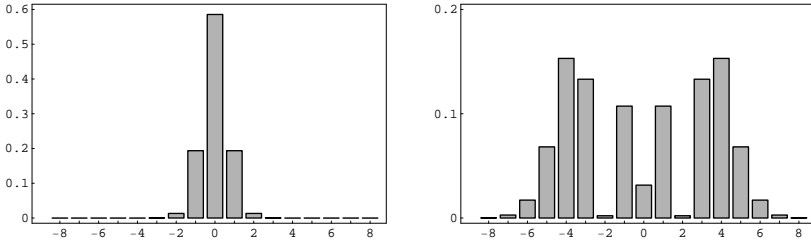


Abbildung 2.1: Floquet-Zustände für σ_z -Treiber: Normquadrate der Fourier-Komponenten $|u^{(q)}\rangle$ für verschiedene Treiberparameter. links: $g/\Omega = 1$, rechts: $g/\Omega = 5$.

mit den Bessel-Funktionen 1. Gattung, $J_n(z)$. Einige Eigenschaften dieser Funktionen sind in Anhang E angegeben. Die Fourier-Koeffizienten sind also

$$|u_{-}^{(q)}\rangle = e^{\frac{iq\pi}{2}} J_q(-g/\Omega) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |u_{+}^{(q)}\rangle = e^{\frac{iq\pi}{2}} J_q(g/\Omega) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Die Normquadrate der $|u_{\pm}^{(q)}\rangle$ sind damit für beide Floquet-Zustände identisch

$$\langle u^{(q)} | u^{(q)} \rangle = J_q^2(g/\Omega). \quad (2.34)$$

Die Verteilung der Fourier-Komponenten ist in Abbildung 2.1 für verschiedene Treiberparameter gezeigt. Für einen tendenziell schwachen oder schnellen Treiber mit $g/\Omega \lesssim 1$ treten nur Komponenten dicht bei $q = 0$ auf; im Grenzfall $g/\Omega \rightarrow 0$ verschwinden alle Beiträge mit $q \neq 0$, dann geht $|\mathcal{E}(t)\rangle$ gegen $|u_{\pm}^{(0)}\rangle = \text{konst}$, und die Floquet-Zustände fallen mit den ungestörten Eigenzuständen zusammen, $|\mathcal{E}_{\pm}\rangle = |\pm\rangle$. Für $g/\Omega \gg 1$ verbreitert sich das Spektrum beteiligter Fourier-Komponenten.

2.2.2. Rotating-Field-Treiber (RF-Treiber)

Ein weiteres geschlossen lösbares Modell ist der Hamiltonian

$$H_S = \hbar \left\{ \frac{\nu}{2} \sigma_z + g(\sigma_x \cos \Omega t + \sigma_y \sin \Omega t) \right\} \quad (2.35)$$

$$= \hbar \left\{ \frac{\nu}{2} \sigma_z + g(\sigma_{+} e^{-i\Omega t} + \sigma_{-} e^{i\Omega t}) \right\}. \quad (2.36)$$

Dieses Modell ist aus der Spinresonanz wohlbekannt [36] und beschreibt ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen in einem sich drehenden Magnetfeld. Denselben Hamiltonian erhält man auch für ein optisch getriebenes System in Dipol-Näherung, vgl. (2.49), wenn man die *Rotating Wave Approximation* (RWA) durchführt.

Die Fourier-Komponenten dieses Hamiltonians sind

$$H^{(0)} = \hbar \frac{\nu}{2} \sigma_z, \quad H^{(1)} = \hbar g \sigma_- . \quad (2.37)$$

Durch den Übergang in ein mitrotierendes Koordinatensystem kann die explizite Zeitabhängigkeit heraustransformiert werden [37]. Wir wählen also für die Floquet-Zustände den Ansatz

$$|\mathcal{E}\rangle = e^{-i\Omega t \sigma_z / 2} \begin{pmatrix} f_1(t) \\ f_2(t) \end{pmatrix} . \quad (2.38)$$

Mit der Größe

$$\delta := \frac{1}{2}(\nu - \Omega) \quad (2.39)$$

als Maß für die Verstimmung zwischen Treiber- und Resonanzfrequenz des Qubits lautet die Schrödingergleichung (2.8)

$$\begin{pmatrix} \dot{f}_1 \\ \dot{f}_2 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} \mathcal{E}/\hbar + \delta & -g \\ -g & \mathcal{E}/\hbar - \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} . \quad (2.40)$$

Die beiden Floquet-Zustände $|\mathcal{E}_\pm\rangle$ folgen aus der Lösung dieser Gleichung; dabei muss berücksichtigt werden, dass die Bedingung der Periodizität der Floquet-Zustände erfüllt sein muss. Man erhält dann

$$\mathcal{E}_- = \hbar \left(\frac{\Omega}{2} - \sqrt{g^2 + \delta^2} \right), \quad |\mathcal{E}_-(t)\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \begin{pmatrix} -g e^{i\Omega t} \\ -\delta + \sqrt{g^2 + \delta^2} \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

$$\mathcal{E}_+ = \hbar \left(-\frac{\Omega}{2} + \sqrt{g^2 + \delta^2} \right), \quad |\mathcal{E}_+(t)\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \begin{pmatrix} -\delta + \sqrt{g^2 + \delta^2} \\ g e^{-i\Omega t} \end{pmatrix}, \quad (2.42)$$

mit der Normierung

$$\mathcal{N}^2 = 2(g^2 + \delta^2 - \delta \sqrt{g^2 + \delta^2}). \quad (2.43)$$

Die Abhängigkeit der Quasienergien von der Treiberstärke g ist in Abbildung 2.2 gezeigt. Für die Blochvektoren $\boldsymbol{\lambda}_\pm(t)$ der beiden Floquet-Zustände folgt

$$\boldsymbol{\lambda}_\pm(t) = \pm \frac{1}{\sqrt{g^2 + \delta^2}} \begin{pmatrix} g \cos \Omega t \\ g \sin \Omega t \\ \delta \end{pmatrix} . \quad (2.44)$$

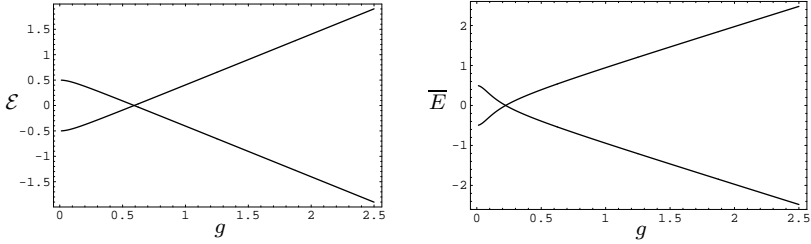


Abbildung 2.2: RF-Treiber: \mathcal{E} und \overline{E} in Abhängigkeit von g ($\nu = 1$, $\Omega = 1.2$).

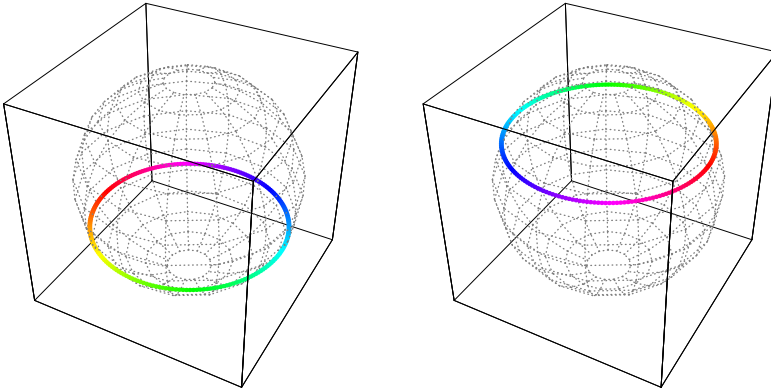


Abbildung 2.3: Zeitentwicklung der Floquet-Zustände für RF-Treiber: $|\mathcal{E}_-\rangle$ (links) und $|\mathcal{E}_+\rangle$ (rechts), für $\delta/g = 1/2$ (Blochkugel im Schrödinger-Bild). Die Zeitentwicklung ist farbkodiert: von rot ($t = 0$) über gelb, grün, blau zu violett ($t = \tau$).

Ihre Zeitentwicklung ist exemplarisch in Abbildung 2.3 gezeigt: dargestellt ist die Trajektorie auf der Blochkugel im Schrödinger-Bild für eine Treiberperiode τ .

Für die Fourierreihe erhält man hier für (2.41) und (2.42) jeweils nur zwei Beiträge in der Fourierreihe, im Gegensatz zum σ_z -Treiber mit unendlich vielen Koeffizienten. Die entsprechenden Normquadrate ergeben sich zu

$$\langle u_-^{(0)} | u_-^{(0)} \rangle = \frac{1}{2} - \frac{\delta}{2\sqrt{g^2 + \delta^2}} = \langle u_+^{(0)} | u_+^{(0)} \rangle, \quad (2.45)$$

$$\langle u_-^{(1)} | u_-^{(1)} \rangle = \frac{1}{2} + \frac{\delta}{2\sqrt{g^2 + \delta^2}} = \langle u_+^{(-1)} | u_+^{(-1)} \rangle. \quad (2.46)$$

Die mittleren Energien der beiden Floquet-Zustände sind

$$\bar{E}_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \frac{\Omega\delta + 2(g^2 + \delta^2)}{\sqrt{g^2 + \delta^2}}, \quad (2.47)$$

speziell für $\delta = 0$ hängt diese nur noch von der Treiberstärke g ab, dann ist

$$\bar{E}_{\pm} = \pm \hbar g. \quad (2.48)$$

2.2.3. σ_x -Treiber

Die in den letzten beiden Abschnitten besprochenen Modelle nehmen insofern eine Sonderstellung ein, als sie geschlossen lösbar sind. Für allgemeinere Treiber-Typen und kompliziertere Zeitabhängigkeiten haben die Quasienergien und Floquet-Zustände keine so einfache Struktur mehr wie in diesen Fällen.

Als Beispiel für ein etwas allgemeineres Modell betrachten wir den Hamiltonian

$$H_S = \hbar \left\{ \frac{\nu}{2} \sigma_z + g \sigma_x \sin \Omega t \right\}. \quad (2.49)$$

Dieser Hamiltonian beschreibt z. B. ein Qubit im linear polarisierten elektromagnetischen Feld bei Dipol-Näherung [1]. Führt man hier die RWA durch, erhält man das Modell des letzten Abschnitts.

Die Fourier-Komponenten dieses Hamiltonoperators sind

$$H^{(0)} = \hbar \frac{\nu}{2} \sigma_z, \quad H^{(1)} = \frac{\hbar}{2i} g \sigma_x, \quad (2.50)$$

und die momentanen Eigenenergien

$$E_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \sqrt{\nu^2 + 4g^2 \sin^2 \Omega t}. \quad (2.51)$$

Die Quasienergien und Koeffizienten der Floquet-Zustände können numerisch durch Diagonalisieren des Floquet-Hamiltonians (2.13) berechnet werden. Die Quasienergien als Funktion der Treiberstärke g und die mittleren Energien der entsprechenden Floquet-Zustände sind in Abbildung 2.4 gezeigt. Erwartungsgemäß stimmen für $g = 0$ die Quasienergien und mittleren Energien mit den ungestörten Eigenenergien $\pm \nu/2$ überein.

Die Normquadrate der Fourier-Koeffizienten sind in Abbildung 2.5 gezeigt, die Zeitentwicklung der Floquet-Zustände für dieselben Parameter in Abbildung 2.6.

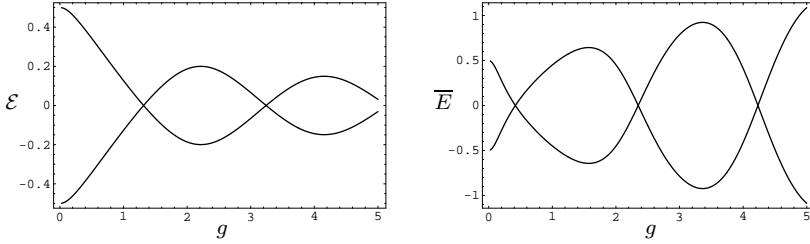


Abbildung 2.4: σ_x -Treiber: \mathcal{E} und \overline{E} in Abhängigkeit von g ($\nu = 1$, $\Omega = 1.2$).

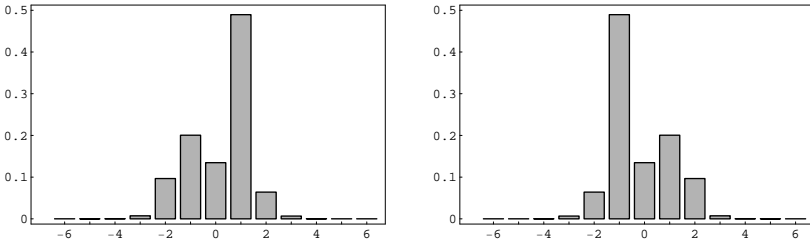


Abbildung 2.5: Floquet-Zustände für σ_x -Treiber: Normquadrate der Fourier-Komponenten $|u_-^{(q)}\rangle$ (links) und $|u_+^{(q)}\rangle$ (rechts) für $g = 2$, (sonstige Parameter wie in Abb.2.4). Quasienergien: $\mathcal{E}_\pm = \pm 0.186$.

Wie alle hier diskutierten Qubit-Modelle erfüllen die Fourier-Komponenten der Floquet-Zustände die Beziehung

$$\langle u_-^{(q)} | u_-^{(q)} \rangle = \langle u_+^{(-q)} | u_+^{(-q)} \rangle. \quad (2.52)$$

Dies liegt an der Symmetrie des ungestörten Hamiltonoperators und der gewählten Treiber. Da die Quasienergien so gewählt worden sind, dass $\mathcal{E}_- = -\mathcal{E}_+$ gilt, erhält man mit Gleichung (2.19) für die mittleren Energien der beiden Zustände

$$\overline{E}_- = -\overline{E}_+. \quad (2.53)$$

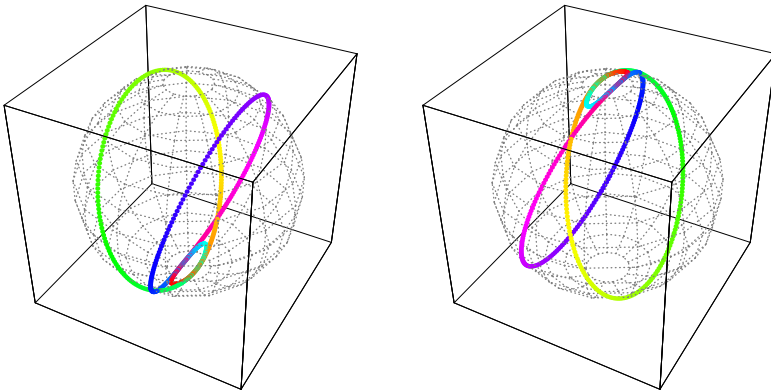


Abbildung 2.6: Zeitentwicklung der Floquet-Zustände für σ_x -Treiber: $|\mathcal{E}_-\rangle$ (links) und $|\mathcal{E}_+\rangle$ (rechts) (Schrödinger-Bild), Parameter wie in Abb. 2.5.

3. Floquet-Mastergleichung

Mithilfe der im letzten Kapitel eingeführten Floquet-Zustände wird nun die Born-Markow-Mastergleichung auf ein explizit zeitabhängiges, periodisches System verallgemeinert. Dieser Zugang ist unter anderem bekannt aus der Beschreibung von getriebenen Rydberg-Atomen [2, 3] und des getriebenen harmonischen Oszillators [24].

In Abschnitt 3.1 geben wir die Floquet-Mastergleichung für allgemeine Systeme an und diskutieren einige Unterschiede zur gewöhnlichen Born-Markow-Mastergleichung. Unter bestimmten Voraussetzungen kann eine Pauli-Mastergleichung abgeleitet werden, dies wird in Abschnitt 3.3 diskutiert. In Abschnitt 3.5 werden einige allgemeine Eigenschaften des resultierenden Gleichgewichtszustandes besprochen. Anschließend betrachten wir das Verhalten für die Grenzfälle sehr großer und kleiner Treiberfrequenzen.

3.1. Herleitung der Floquet-Mastergleichung

Der System-Hamiltonoperator sei nun explizit zeitabhängig, also

$$H = H_S(t) + H_B + H_{SB}, \quad (3.1)$$

wobei $H_S(t)$ die Periodizitätsbedingung

$$H_S(t + \tau) = H_S(t), \quad \tau = 2\pi/\Omega, \quad (3.2)$$

erfüllen soll. In der angepassten Basis der Floquet-Zustände nimmt der Zeitentwicklungsoperator des d -dimensionalen Systems S die einfache Form (2.20) an

$$U_S(t) = \sum_{\alpha=1}^d e^{-i\mathcal{E}_\alpha t} |\mathcal{E}_\alpha(t)\rangle \langle \mathcal{E}_\alpha(0)|, \quad (3.3)$$

wobei sich die Floquet-Zustände als Fourierreihen schreiben lassen

$$|\mathcal{E}_\alpha(t)\rangle = \sum_q e^{iq\Omega t} |u_\alpha^{(q)}\rangle. \quad (3.4)$$

Für allgemeine Hamilton-Modelle müssen die Floquet-Zustände bzw. deren Fourier-Komponenten $|u^{(q)}\rangle$ in der Regel numerisch bestimmt werden. Solange die Zeitabhängigkeit des Treibers eine einfache Form hat, wie z. B. die später ausschließlich verwendete sinusförmige Zeitabhängigkeit, verschwinden auch bei den Floquet-Zuständen die Komponenten zu hohen Frequenzen. Die unendliche Fourierreihe kann dann bei einer oberen und unteren Grenze abgeschnitten werden, und läuft dann über

$$q = -q_{\max}, \dots, q_{\max}. \quad (3.5)$$

Damit kann nun die Transformation der Badoperatoren A aus (1.2) in das Wechselwirkungs-Bild bzw. Floquet-Bild durchgeführt werden. Mit der Definition

$$\Gamma_{\alpha\beta} := |\mathcal{E}_\alpha(0)\rangle \langle \mathcal{E}_\beta(0)| \quad (3.6)$$

folgt

$$\tilde{A}(t) = U_S^\dagger(t) A U_S(t) = \sum_{\alpha\beta} e^{i(\mathcal{E}_\alpha - \mathcal{E}_\beta)t} \langle \mathcal{E}_\alpha(t) | A | \mathcal{E}_\beta(t) \rangle \Gamma_{\alpha\beta} \quad (3.7)$$

$$= \sum_{\alpha\beta k} e^{-i\omega_{\alpha\beta k} t} A_{\alpha\beta}(k) \Gamma_{\alpha\beta}. \quad (3.8)$$

Dabei wurden die Übergangsfrequenzen

$$\omega_{\alpha\beta k} := -(\mathcal{E}_\alpha - \mathcal{E}_\beta + k\Omega) \quad (3.9)$$

und die Matrixelemente

$$A_{\alpha\beta}(k) := \sum_q \langle u_\alpha^{(q)} | A | u_\beta^{(q+k)} \rangle \quad (3.10)$$

eingeführt. Die Indizes α, β laufen über sämtliche Basiszustände, k läuft von $-\infty$ bis ∞ . Für numerische Rechnungen erhält man nach Gleichung (3.5) aus dem abgeschnittenen Spektrum Beiträge mit $-2q_{\max} \leq k \leq 2q_{\max}$.

Für die in die Mastergleichung eingehenden Lindblad-Operatoren $A(\omega)$ werden alle Beiträge mit derselben Frequenz zusammengefasst, vergleiche (1.9). Zu einer gegebenen Übergangsfrequenz werden also alle Operatoren $\Gamma_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta}(k)$ summiert, für die die Bedingung $\omega_{\alpha\beta k} = \omega$ gilt,

$$A(\omega) := \sum_{\omega_{\alpha\beta k} = \omega} \Gamma_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta}(k). \quad (3.11)$$

Man erhält dann $\tilde{A}(t)$ nach Gleichung (3.8) wieder als Summe über alle auftretenden Frequenzen

$$\tilde{A}(t) = \sum_{\omega} e^{-i\omega t} A(\omega). \quad (3.12)$$

Die Badoperatoren nehmen also im Wechselwirkungs-Bild dieselbe Form wie beim ungetriebenen System mit konstantem H_S an, vergleiche mit (1.13). Die Operatoren $A(\omega)$ erfüllen dabei einige wesentliche Eigenschaften der ungetriebenen Eigenoperatoren, insbesondere gilt

$$A(-\omega) = A^\dagger(\omega), \quad \text{und} \quad A = \sum_{\omega} A(\omega). \quad (3.13)$$

Weitere Eigenschaften sind in Anhang F angegeben. Anders als beim ungetriebenen System sind die Operatoren $A(\omega)$ für das getriebene System allerdings keine Eigenoperatoren zu $H_S(t)$. Daraus ergeben sich einige Unterschiede, auf die in Abschnitt 3.2 genauer eingegangen wird.

Die weitere Ableitung der Born-Markow-Mastergleichung kann nun formal wie in Kapitel 1 durchgeführt werden. Man erhält analog die Mastergleichung für den System-Dichteoperator im Floquet-Bild

$$\dot{\tilde{\rho}} = \mathcal{D}(\tilde{\rho}) \quad (3.14)$$

mit dem Dissipator (1.18)

$$\mathcal{D}(\tilde{\rho}) = \sum_{\omega} \gamma(\omega) \left(A(\omega) \tilde{\rho} A^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{A^\dagger(\omega) A(\omega), \tilde{\rho}\} \right). \quad (3.15)$$

Durch den Übergang in das Floquet-Bild erhält man also für den Dichteoperator trotz der expliziten Zeitabhängigkeit des Hamiltonoperators eine Differenzialgleichung, die nicht mehr explizit von der Zeit abhängt. Der Gleichgewichtszustand ergibt sich dann aus

$$\mathcal{D}(\tilde{\rho}) = 0. \quad (3.16)$$

Die in das Schrödinger-Bild zurücktransformierte Mastergleichung folgt aus Gleichung (1.21) bei Vernachlässigung des Lamb-Shift-Hamiltonians zu

$$\dot{\rho} = -i [H_S(t), \rho] + \mathcal{D}^{(S)}(\rho, t). \quad (3.17)$$

Der Superoperator $\mathcal{D}^{(S)}$ im Schrödinger-Bild lautet dabei¹

$$\mathcal{D}^{(S)}(\rho, t) = \sum_{\omega} \gamma(\omega) \left(A^{(S)}(\omega) \rho A^{\dagger(S)}(\omega) - \frac{1}{2} \{A^{\dagger(S)}(\omega) A^{(S)}(\omega), \rho\} \right), \quad (3.18)$$

mit den transformierten Lindblad-Operatoren

$$A^{(S)}(\omega) := U_S(t) A(\omega) U_S^{\dagger}(t) = A^{(S)}(\omega, t). \quad (3.19)$$

Der Dissipator hängt damit in der Regel explizit von der Zeit ab.

Die Lindblad-Operatoren $A(\omega)$ beschreiben Übergänge zwischen den Floquet-Zuständen $|\mathcal{E}_i\rangle$. Dabei treten nach (3.9) nicht nur Übergänge mit den entsprechenden Quasienergie-Differenzen auf, sondern auch durch den Treiber induzierte Übergänge unter Aufnahme oder Abgabe von $k\Omega$. Die Raten dieser voneinander unabhängig wirkenden Dämpfungskanäle werden zum Einen durch die spektrale Badfunktion $\gamma(\omega)$ bestimmt, zum Anderen durch die in (3.10) definierten Matrixelemente $A_{\alpha\beta}(k)$, in die auch die Wechselwirkung zwischen Treiber und System in Form der Fourier-Komponenten der Floquet-Zustände eingeht. Das zunächst unbeschränkte Spektrum der Übergangsfrequenzen wird daher für „normale“ Modellsysteme auf einen Bereich von einigen Bändern eingeschränkt. Beispiele dafür sind in Abbildung 3.3 auf Seite 33 zu sehen.

Nun soll noch auf die relevanten Zeitskalen eingegangen werden. Zu den bereits in der Herleitung der ungetriebenen Born-Markow-Mastergleichung betrachteten typischen Zeitskalen der Badkorrelationen (τ_B), der Eigendynamik des Systems (τ_S) und der Relaxation in das Gleichgewicht (τ_R) kommt beim getriebenen System die Treiber-Periodendauer τ . Da System und Treiber beim Floquet-Ansatz als Einheit fungieren, tritt τ einfach als weitere typische Zeitskala der Systemdynamik auf. Für die säkulare Näherung muss also auch die Bedingung $\tau \ll \tau_R$ erfüllt sein. Zusammen mit der Bedingung für die Markow-Näherung muss also folgende Beziehung der Zeitskalen untereinander gelten

$$\tau_B, \tau_S, \tau \ll \tau_R. \quad (3.20)$$

¹In den folgenden Kapiteln wird der Superskript beim Dissipator weggelassen; in den wenigen Fällen, in denen \mathcal{D} ausdrücklich den Dissipator im Schrödinger-Bild bezeichnet, geht dies aus dem Kontext hervor.

3.2. Unterschiede zur ungetriebenen Mastergleichung

Auch wenn die Herleitung der Floquet-Mastergleichung in weiten Teilen formal mit der Herleitung der ungetriebenen Mastergleichung übereinstimmt, gibt es doch einige prinzipielle Unterschiede zwischen diesen beiden Fällen. Das liegt insbesondere daran, dass die Operatoren $A(\omega)$ für das getriebene System keine Eigenoperatoren zu H_S sind, es gilt im Allgemeinen also

$$[H_S(t), A(\omega)] \neq -\omega A(\omega), \quad [H_S(t), A^\dagger(\omega)] \neq \omega A^\dagger(\omega), \quad (3.21)$$

im Gegensatz zu Gleichung (1.10). Ebenso wenig gilt hier die einfache Beziehung (1.12) zwischen der Darstellung der Lindblad-Operatoren $A(\omega)$ im Wechselwirkungs- und im Schrödinger-Bild. Das hat unter anderem zur Folge, dass der Lamb-Shift-Hamiltonian, sofern er nicht vernachlässigt wird, im Allgemeinen nicht mehr mit dem Systemhamiltonian vertauscht

$$[H_S, \tilde{H}_{LS}] \neq 0, \quad (3.22)$$

vergleiche dazu Gleichung (1.20).

Ein weiterer wesentlicher Unterschied, der sich aus Gleichung (3.21) ergibt, betrifft die Zeitabhängigkeit des Dissipators. Im ungetriebenen Fall ist er weder im Schrödinger- noch im Wechselwirkungs-Bild explizit zeitabhängig, wegen der Relation (1.12) nimmt er in beiden Bildern sogar dieselbe Form an, siehe (1.22). Bei der Floquet-Mastergleichung unterscheidet sich der Dissipator in den beiden Bildern: im Wechselwirkungs-Bild erhält man einen Superoperator, der nicht explizit von der Zeit abhängt, im Schrödinger-Bild folgt jedoch ein explizit zeitabhängiger Dissipator (3.18).

3.3. Mastergleichung für generisches Spektrum

Der Dissipator (3.15) nimmt eine besonders einfache Form an, wenn die in Gleichung (3.9) definierten Übergangsfrequenzen $\omega_{\alpha\beta k}$ bestimmte Voraussetzungen erfüllen. Um dies zu zeigen, betrachten wir das typische Spektrum dieser Frequenzen etwas genauer, zunächst der Einfachheit halber für den Fall eines Zwei-Niveau-Systems (Qubit). Dort erhält man zwei Quasienergien, $\mathcal{E}_2 \geq \mathcal{E}_1$, mit der Quasienergie-Differenz $\Delta := \mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_1$. Aus

$$\omega_{\alpha\beta k} = -(\mathcal{E}_\alpha - \mathcal{E}_\beta + k\Omega) \quad (3.23)$$

erhält man systematisch entartete Niveaus für $\alpha = \beta$

$$\omega_{11,k} = \omega_{22,k} = -k\Omega. \quad (3.24)$$

Darüber und darunter befinden sich jeweils im Abstand Δ die Niveaus $\omega_{12,k}$ und $\omega_{21,k}$. Die Niveaus zu einem bestimmten k bilden also sozusagen „Bänder“, die sich im Abstand Ω wiederholen (siehe Abbildung 3.1). Für größere

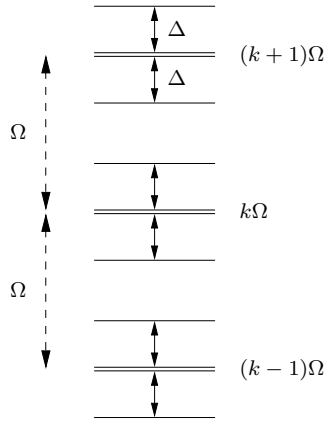


Abbildung 3.1: Spektrum der $\omega_{\alpha\beta k}$ für ein Zwei-Niveau-System.

Systeme erhält man ein ähnliches Bild: bei einem d -Niveau-System ergibt sich in jedem Band ein d -fach entartetes zentrales Niveau und $d(d-1)$ Seitenlinien, entsprechend den $d(d-1)$ möglichen Quasienergie-Differenzen (siehe Abbildung 3.2).

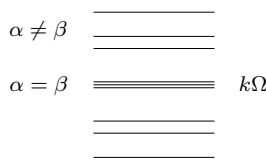


Abbildung 3.2: Ein Band des Spektrums $\omega_{\alpha\beta k}$ für ein Drei-Niveau-System.

Diese Bänder können sich natürlich im Allgemeinen überlappen, ferner können weitere Entartungen auftreten, sowohl innerhalb eines Bandes als auch zwischen Niveaus verschiedener Bänder. Wenn ausschließlich die durch (3.24) gegebenen systematischen Entartungen vorliegen, soll das Spektrum als *generisches Spektrum* bezeichnet werden.

3.3.1. Dissipator-Matrixelemente

Die Matrixelemente des Dissipators können für den Fall eines generischen Spektrums direkt angegeben werden. Der Dissipator nach Gleichung (3.15),

$$\mathcal{D}(\tilde{\rho}) = \sum_{\omega} \gamma(\omega) \left(A(\omega) \tilde{\rho} A^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \{A^{\dagger}(\omega) A(\omega), \tilde{\rho}\} \right), \quad (3.25)$$

setzt sich aus den Beiträgen für alle Übergangsfrequenzen zusammen. Wir betrachten zunächst für ein gegebenes ω die Matrixelemente eines einzelnen Summanden $D := A \tilde{\rho} A^{\dagger} - \frac{1}{2} \{A^{\dagger} A, \tilde{\rho}\}$,

$$\langle i | D | j \rangle = \sum_{kl} A_{ik} A_{jl}^* \tilde{\rho}_{kl} - \frac{1}{2} (A_{ki}^* A_{kl} \tilde{\rho}_{lj} + A_{lk}^* A_{lj} \tilde{\rho}_{ik}). \quad (3.26)$$

Da keine zusätzlichen Entartungen vorliegen, können dabei nach Abbildung 3.2 für die Operatoren A nur zwei Fälle auftreten:

- A ist diagonal ($\alpha = \beta$).
Dieser Fall tritt für das systematisch entartete zentrale Niveau auf. Für A folgt in diesem Fall

$$A = \sum_{\alpha} A_{\alpha\alpha} \Gamma_{\alpha\alpha}. \quad (3.27)$$

Mit $A_{ij} = \delta_{ij} A_{ii}$ erhält man damit für den Beitrag des entarteten Niveaus zum Dissipator-Matrixelement

$$\langle i | D_I | j \rangle = \{A_{ii} A_{jj}^* - \frac{1}{2} (|A_{ii}|^2 + |A_{jj}|^2)\} \tilde{\rho}_{ij}. \quad (3.28)$$

- Genau ein Nichtdiagonalelement ist von Null verschieden ($\alpha \neq \beta$).
Dies ist für die Seitenlinien der Fall. Für jedes Niveau erhält man den Lindblad-Operator

$$A = A_{\alpha\beta} \Gamma_{\alpha\beta}. \quad (3.29)$$

Mit $A_{ij} = A_{\alpha\beta} \delta_{i\alpha} \delta_{j\beta}$ folgt für den Beitrag der nicht-entarteten Niveaus zum Dissipator-Matrixelement

$$\langle i | D_{II} | j \rangle = |A_{\alpha\beta}|^2 \left\{ \delta_{i\alpha} \delta_{j\alpha} \tilde{\rho}_{\beta\beta} - \frac{1}{2} (\delta_{i\beta} \tilde{\rho}_{\beta j} + \delta_{j\beta} \tilde{\rho}_{i\beta}) \right\}. \quad (3.30)$$

Insgesamt erhält man also für jedes Band mit gegebenem k einen Beitrag $\mathcal{D}(k)$ mit

$$\langle i | \mathcal{D}(k) | j \rangle = \gamma(\omega_k) \langle i | D_I | j \rangle + \sum_{\alpha \neq \beta} \gamma(\omega_{\alpha\beta k}) \langle i | D_{II} | j \rangle, \quad (3.31)$$

dabei soll ω_k die Frequenz des zentralen Niveaus bezeichnen. Mit den Gleichungen (3.28) und (3.30) folgt also

$$\langle i | \mathcal{D}(k) | j \rangle = \gamma(\omega_k) \left\{ A_{ii} A_{jj}^* - \frac{1}{2} (|A_{ii}|^2 + |A_{jj}|^2) \right\} \tilde{\rho}_{ij} \quad (3.32)$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \gamma(\omega_{\alpha\beta k}) |A_{\alpha\beta}|^2 (\delta_{i\beta} + \delta_{j\beta}) \tilde{\rho}_{ij} \quad (3.33)$$

$$+ \sum_{\alpha \neq \beta} \gamma(\omega_{\alpha\beta k}) |A_{\alpha\beta}|^2 \delta_{i\alpha} \delta_{j\alpha} \tilde{\rho}_{\beta\beta}. \quad (3.34)$$

Nun muss nur noch über alle k summiert werden. Für Diagonal- und Nichtdiagonalelemente verschwindet jeweils ein Teil der Terme, wir betrachten diese Fälle daher getrennt.

- Diagonalelemente:

In diesem Fall verschwindet der erste Term, (3.32), die Operatoren A für $\alpha = \beta$ liefern somit keinen Beitrag zu den Diagonalelementen des Dissipators (und beeinflussen damit also nur die Relaxation der Nichtdiagonalelemente). Die Summen über $\alpha \neq \beta$ im zweiten und dritten Term können auf $\alpha = \beta$ ausgedehnt werden, da diese Terme für die Diagonalelemente keinen Beitrag liefern. Man erhält schließlich

$$\mathcal{D}_{ii} = \sum_{jk} \left\{ \gamma(\omega_{ijk}) |A_{ij}(k)|^2 \tilde{\rho}_{jj} - \gamma(\omega_{jik}) |A_{ji}(k)|^2 \tilde{\rho}_{ii} \right\}. \quad (3.35)$$

Die Diagonalelemente des Dissipators hängen also nur von den Diagonalelementen des Dichteoperators $\tilde{\rho}$ ab.

- Nichtdiagonalelemente:

In diesem Fall verschwindet der dritte Term, (3.34), man erhält

$$\mathcal{D}_{ij} = \tilde{\rho}_{ij} \sum_k \left\{ \gamma(\omega_k) A_{ii}(k) A_{jj}^*(k) - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \gamma(\omega_{\alpha ik}) |A_{\alpha i}(k)|^2 + \gamma(\omega_{\alpha jk}) |A_{\alpha j}(k)|^2 \right\}. \quad (3.36)$$

Es gilt also insbesondere

$$\mathcal{D}_{ij} \propto \tilde{\rho}_{ij}. \quad (3.37)$$

Wegen (3.35) und (3.37) entkoppeln also die Bewegungsgleichungen (3.14) für die Diagonal- und Nichtdiagonalelemente des Dichteoperators.

Ein entsprechendes Resultat wurde bereits in [2] angegeben, allerdings unter Vernachlässigung der generisch auftretenden Entartungen. Dies hat zwar keine Auswirkung auf die Diagonalelemente des Dissipators, liefert jedoch ein anderes Relaxationsverhalten der Nichtdiagonalelemente, da der erste Term in (3.36) fehlt.

3.3.2. Pauli-Mastergleichung

Wie im letzten Abschnitt besprochen entkoppeln also für ein generisches Spektrum die Bewegungsgleichungen für die Diagonalelemente und die Nichtdiagonalelemente von $\tilde{\rho}$. Oft sind nur die Diagonalelemente von Interesse, also die Besetzungszahlen der Floquet-Zustände $|\mathcal{E}_i\rangle$,

$$P_i := \tilde{\rho}_{ii}, \quad (3.38)$$

wir betrachten daher deren Bewegungsgleichungen genauer. Mit der Definition der Übergangsraten

$$w_{ij} := \sum_k \gamma(\omega_{ijk}) |A_{ij}(k)|^2 \quad (3.39)$$

folgt aus (3.35) eine Pauli-Mastergleichung für die Besetzungszahlen

$$\dot{P}_i = \sum_j (w_{ij} P_j - w_{ji} P_i), \quad (3.40)$$

oder

$$\dot{P}_i = W_{ij} P_j, \quad W_{ij} := w_{ij} - \delta_{ij} \sum_k w_{ki}. \quad (3.41)$$

Der Gleichgewichtszustand $\dot{P}_i = 0$ ergibt sich dann aus

$$W_{ij} P_j = 0. \quad (3.42)$$

Die Bedingung der *Detailed Balance*,

$$w_{ij} P_j = w_{ji} P_i, \quad (3.43)$$

ist in der Regel beim getriebenen System nicht erfüllt.

Aus Gleichung (3.40) wird deutlich, dass die Raten w_{ii} zu $w_{ii} = 0$ gewählt werden können. Die Beiträge $A_{ii}(k)$ haben daher keinen Einfluss auf die Dynamik der Besetzungszahlen P_i .

Die Raten w_{ij} beschreiben also Übergänge vom Zustand $|\mathcal{E}_j\rangle$ zum Zustand $|\mathcal{E}_i\rangle$. Für $\omega > 0$ entspricht dies einer Relaxation unter Abgabe der entsprechenden Übergangsenergie. Mit der Badeigenschaft (1.23) und den in Anhang F angegebenen Symmetrieeigenschaften folgt aus (3.39) für die Rate des umgekehrten Übergangs

$$w_{ji} = \sum_k e^{-\beta\omega_{ijk}} \gamma(\omega_{ijk}) |A_{ij}(k)|^2. \quad (3.44)$$

3.4. Grenzfall des ungetriebenen Systems

Die hier abgeleitete Mastergleichung beinhaltet auch den Grenzfall des ungetriebenen Systems mit $H_S = \text{konst}$. In der hier verwendeten Notation entspricht dies einer Treiberstärke von $g = 0$.

Die in Kapitel 2 eingeführte Darstellung behält auch in diesem Fall ihre Gültigkeit, dabei treten die Eigenzustände an die Stelle der Floquet-Zustände, und die Eigenenergien an die Stelle der Quasienergien,

$$|\mathcal{E}_i(t)\rangle := |E_i\rangle = \text{konst} = |\mathcal{E}_i(t + \tau)\rangle. \quad (3.45)$$

Die Darstellung der Operatoren im Floquet-Bild entspricht dann der Darstellung in der Eigenbasis von H_S .

In den entsprechenden Fourierreihen treten in diesem Fall nur die konstanten Terme auf, also $q_{\max} = 0$. Man erhält für die Übergangsfrequenzen $\omega_{\alpha\beta k}$ daher auch nur das zu $k = 0$ gehörende Band. Damit ergeben sich die bekannten Übergangswahrscheinlichkeiten der Pauli-Mastergleichung, vgl. (3.39),

$$w_{ij} = \gamma(\omega_{ij}) |A_{ij}|^2, \quad w_{ji} = e^{-\beta\omega_{ij}} w_{ij}. \quad (3.46)$$

Lösung ist der kanonische Zustand mit

$$\frac{P_j}{P_i} = \frac{w_{ji}}{w_{ij}} = e^{-\beta\omega_{ij}}, \quad (3.47)$$

also

$$P_j \propto e^{-\beta E_j}. \quad (3.48)$$

Dieser hängt anders als beim getriebenen System insbesondere nicht von der speziellen Form der Dämpfungskonstante $\gamma(\omega)$ ab.

In Abbildung 3.3 wird der Übergang zum ungetriebenen System noch einmal deutlich. Gezeigt sind die Normen der Operatoren $A(\omega)$ für ein getriebenes Qubit bei verschiedenen Treiberstärken. Für größere Treiberstärken erhält

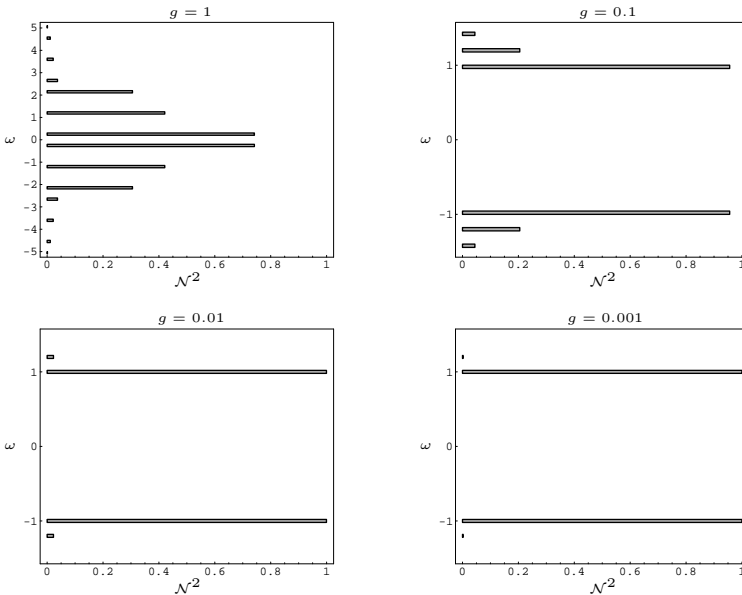


Abbildung 3.3: Qubit mit σ_x -Treiber: Spektralnorm der Operatoren $A(\omega)$ für abnehmende Treiberstärke g ($\nu = 1$, $\Omega = 1.2$). Genauere Beschreibung des Modells in Kapitel 5.

man relevante Beiträge auch zu höheren Übergangsfrequenzen, eine direkte Konsequenz des breit gefächerten Spektrums $|u^{(g)}\rangle$ der Floquet-Zustände. Diese Übergänge verschwinden für kleiner werdende Treiberstärke, bei $g = 0$ treten dann nur noch die bekannten Übergänge zu $\omega = \pm\nu$ auf, also die Übergänge zwischen den beiden ungestörten Eigenzuständen.

3.5. Eigenschaften des Gleichgewichtszustandes

Aus der speziellen Form der Floquet-Mastergleichung folgen einige interessante Eigenschaften des resultierenden Gleichgewichtszustandes.

3.5.1. Allgemeine Eigenschaften

Für ein generisches Spektrum folgt der Gleichgewichtszustand (oder „quasi-stationäre Zustand“) aus der Pauli-Mastergleichung für die Besetzungszahlen,

als Lösung der Gleichung

$$\dot{P}_i = W_{ij}P_j = 0. \quad (3.49)$$

Die Nichtdiagonalelemente des Dichteoperators verschwinden für diesen Fall wegen (3.37), der Gleichgewichtszustand ist somit ein statistisches Gemisch aus Floquet-Zuständen,

$$\tilde{\rho}^{\text{qs}} = \sum_i \tilde{\rho}_{ii} \Gamma_{ii} = \sum_i P_i |\mathcal{E}_i(0)\rangle \langle \mathcal{E}_i(0)|. \quad (3.50)$$

Für ein Spektrum mit weiteren Entartungen muss die allgemeinere Form (3.14) der Floquet-Mastergleichung verwendet werden, das Gleichgewicht folgt dann aus

$$\mathcal{D}(\tilde{\rho}) = \dot{\tilde{\rho}} = 0. \quad (3.51)$$

Die Modelle für die numerischen Rechnungen wurden in der Regel generisch gewählt. Auch bei den betrachteten Modellen mit nicht-generischem Spektrum lieferte die Floquet-Mastergleichung immer einen diagonalen Zustand der Form (3.50). Typischerweise ist also die Diagonalität des quasistationären Zustands in der Floquet-Darstellung gewährleistet. Dies soll daher für die folgenden Diskussionen der Eigenschaften des quasistationären Zustands auch ohne allgemeinen Beweis vorausgesetzt werden.

Die spezielle Form (3.50) des Gleichgewichts bedeutet auch, dass sich sämtliche Erwartungswerte additiv aus den entsprechenden Erwartungswerten der Floquet-Zustände zusammensetzen. Speziell folgt so z. B. für den mittleren Energieerwartungswert des Systems

$$\langle E_S \rangle_\tau := \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \langle H_S(t) \rangle dt \quad (3.52)$$

$$= \sum_i P_i \bar{E}_i, \quad (3.53)$$

mit den in Gleichung (2.19) definierten mittleren Energien \bar{E}_i der Floquet-Zustände $|\mathcal{E}_i\rangle$.

Im Schrödinger-Bild lautet der quasistationäre Zustand

$$\rho^{\text{qs}}(t) = U_S(t) \tilde{\rho}^{\text{qs}} U_S^\dagger(t) \quad (3.54)$$

$$= \sum_i P_i |\mathcal{E}_i(t)\rangle \langle \mathcal{E}_i(t)|, \quad (3.55)$$

oder in der Bloch-Darstellung

$$\boldsymbol{\lambda}^{\text{qs}}(t) = \sum_i P_i \boldsymbol{\lambda}_i(t), \quad (3.56)$$

mit den Blochvektoren $\boldsymbol{\lambda}_i(t)$ der Floquet-Zustände. Der Gleichgewichtszustand ist also zeitabhängig und insbesondere ebenfalls periodisch mit der Treiberfrequenz,

$$\rho^{\text{qs}}(t + \tau) = \rho^{\text{qs}}(t). \quad (3.57)$$

Da im Gleichgewicht $\mathcal{D} = 0$ gilt, verhält sich das System so, als ob kein Bad mehr vorhanden wäre. Sobald also der quasistationäre Zustand erreicht ist, folgt das System nur noch der durch den Treiber induzierten unitären Dynamik.

Das bedeutet auch, dass der Gleichgewichtszustand nicht von der Stärke der Badankopplung abhängt, diese geht nur in das Relaxationsverhalten ein.

3.5.2. Gleichgewicht für $T \rightarrow \infty$

Wie im ungetriebenen System geht das Floquet-Gleichgewicht für große Temperaturen gegen den vollständig gemischten Zustand. Für $T \rightarrow \infty$ bzw. $\beta \rightarrow 0$ erfüllt das Bad wegen (1.24) die Bedingung

$$\gamma(-\omega) = \gamma(\omega). \quad (3.58)$$

Damit lässt sich der Dissipator zum vollständig gemischten Zustand $\frac{1}{d} \hat{1}$ schreiben als

$$\begin{aligned} \mathcal{D} = \frac{1}{d} \sum_{\omega > 0} \gamma(\omega) & \left(A(\omega) A^\dagger(\omega) - A^\dagger(\omega) A(\omega) \right. \\ & \left. + A(-\omega) A^\dagger(-\omega) - A^\dagger(-\omega) A(-\omega) \right). \end{aligned} \quad (3.59)$$

Der Term zu $\omega = 0$ verschwindet wegen der Hermitizität von $A(0)$. Aus der Symmetrie (F.4) der Lindblad-Operatoren $A(\omega)$ folgt also

$$\mathcal{D}\left(\frac{1}{d} \hat{1}\right) = 0. \quad (3.60)$$

Wie im ungetriebenen System ist also auch hier das Gleichgewicht für sehr große Temperaturen der vollständig gemischte Zustand

$$\tilde{\rho}^{\text{qs}} = \frac{1}{d} \hat{1} = \rho^{\text{qs}}. \quad (3.61)$$

Für die Übergangsraten der Pauli-Mastergleichung (3.40) gilt in diesem Fall wegen (3.44)

$$w_{ji} = w_{ij}, \quad (3.62)$$

woraus derselbe stationäre Zustand mit $P_i = 1/d$ folgt.

3.5.3. Gleichgewicht für $T \rightarrow 0$

Für sehr kleine Temperaturen gilt wegen (1.23)

$$\gamma(-\omega) \ll \gamma(\omega), \quad \text{für } \omega > 0, \quad (3.63)$$

so dass nur der Teil des Spektrums aus Abbildung 3.1 mit $\omega > 0$ zum Dissipator beiträgt. Beim ungetriebenen System bedeutet dies, dass Übergänge von niedrigeren in höhere Eigenzustände unterbunden werden, da diese Übergänge in der unteren Hälfte des Bandes für $k = 0$ liegen. Das System relaxiert daher in den Grundzustand.

Beim getriebenen System können Übergänge in höhere Niveaus jedoch im Allgemeinen treiberunterstützt stattfinden, da die entsprechenden Terme in höher liegenden Bändern Beiträge liefern können. Die Übergangsraten w_{ij} der Pauli-Mastergleichung mit $\mathcal{E}_j < \mathcal{E}_i$ verschwinden also in der Regel nicht, siehe (3.39). Das getriebene System nimmt daher im Gegensatz zum ungetriebenen System auch für Temperatur Null in der Regel einen gemischten Zustand ein, der zudem von den Badeigenschaften abhängt, die sich in der genauen Form von $\gamma(\omega)$ äußern.

Einige Beispiele für das Temperaturverhalten eines getriebenen Qubits sind in Abbildung 5.7 auf Seite 51 zu sehen. Daraus wird noch einmal deutlich, dass die Unterschiede zwischen getriebenem und ungetriebenem System insbesondere bei tiefen Temperaturen zum Tragen kommen, während für sehr große Temperaturen beide Systeme gegen den vollständig gemischten Zustand gehen.

3.6. Gleichgewicht für Qubit-Modelle

Für das Qubit erhält man zwei Floquet-Zustände $|\mathcal{E}_1\rangle := |\mathcal{E}_-\rangle$ und $|\mathcal{E}_2\rangle := |\mathcal{E}_+\rangle$. Das generische Spektrum ist in Abbildung 3.1 auf Seite 28 gezeigt. Die Übergangsraten der Pauli-Mastergleichung sind nach (3.39)

$$w_{12} = \sum_k \gamma(\omega_{12,k}) |A_{12}(k)|^2, \quad w_{21} = \sum_k \gamma(\omega_{21,k}) |A_{21}(k)|^2. \quad (3.64)$$

Damit erhält man für die Besetzungszahlen der Floquet-Zustände im Gleichgewicht

$$P_- = \frac{w_{12}}{w_{12} + w_{21}}, \quad \text{und } P_+ = \frac{w_{21}}{w_{12} + w_{21}} = 1 - P_-. \quad (3.65)$$

Im Floquet-Bild erhält man also den quasistationären Zustand

$$\tilde{\rho}^{\text{qs}} = \begin{pmatrix} P_- & 0 \\ 0 & P_+ \end{pmatrix}, \quad (3.66)$$

oder in der Bloch-Darstellung

$$\tilde{\lambda}^{\text{qs}} = (0, 0, P_+ - P_-) = \left(0, 0, -\frac{w_{12} - w_{21}}{w_{12} + w_{21}} \right). \quad (3.67)$$

Zu den Besetzungszahlen P_{\pm} lässt sich eine effektive Temperatur definieren, diese wird in Kapitel 4 eingeführt.

Im Schrödinger-Bild erhält man für das Qubit aus (3.56) und der Beziehung $\lambda_- = -\lambda_+$, siehe Gleichung (2.21), den Gleichgewichtszustand

$$\lambda^{\text{qs}}(t) = (P_+ - P_-)\lambda_+(t). \quad (3.68)$$

Qubit mit σ_z -Treiber

Beim σ_z -Treiber stimmen die Floquet-Zustände nach (2.27) bis auf eine durch den Treiber gegebene Phase mit den Eigenzuständen $|+\rangle$ und $|-\rangle$ überein. Mit

$$|\mathcal{E}_-(t)\rangle = e^{+iG(t)} |-\rangle, \quad |\mathcal{E}_+(t)\rangle = e^{-iG(t)} |+\rangle, \quad (3.69)$$

bzw.

$$\lambda_{\pm} = \pm (0, 0, 1) \quad (3.70)$$

ergibt sich für die Bloch-Darstellung des Gleichgewichtszustandes daher

$$\lambda^{\text{qs}} = (0, 0, P_+ - P_-). \quad (3.71)$$

Man erhält also einen konstanten Zustand, wie für das ungetriebene System. Dies ist eine weitere Besonderheit dieses speziellen Modells. (Die Besetzungszahlen unterscheiden sich jedoch in der Regel von denen des ungetriebenen Gleichgewichts.)

Qubit mit RF-Treiber

Für den RF-Treiber erhält man analog mit den Floquet-Zuständen (2.44) den Gleichgewichtszustand

$$\lambda^{\text{qs}}(t) = \frac{P_+ - P_-}{\sqrt{g^2 + \delta^2}} \begin{pmatrix} g \cos \Omega t \\ g \sin \Omega t \\ \delta \end{pmatrix}. \quad (3.72)$$

3.7. Adiabatischer Grenzfall ($\Omega \ll 1/\tau_R$)

Wir betrachten nun den Grenzfall eines sehr langsam („adiabatisch“) getriebenen Systems. Es soll also angenommen werden, dass die Treiberdynamik so langsam im Vergleich zur Relaxationszeit verläuft, dass sich im System zu jedem Zeitpunkt der momentane Gleichgewichtszustand einstellt, also der zu den momentanen Eigenzuständen gehörende kanonische Zustand. Diese Situation widerspricht den für die Herleitung der Floquet-Mastergleichung getroffenen Annahmen über die relevanten Zeitskalen. Um die säkulare Näherung durchführen zu können, wird nach (3.20) vorausgesetzt, dass die Relaxation des Systems über viele Treiberperioden erfolgt, also $\tau \ll \tau_R$. Für einen adiabatischen Treiber gilt im Gegensatz dazu jedoch $\tau \gg \tau_R$.

Dass die Floquet-Mastergleichung auf diesen Grenzfall im Allgemeinen nicht angewandt werden kann, soll am Beispiel des Qubits mit σ_z -Treiber illustriert werden. Dieses sehr einfache Modell eignet sich dafür besonders, da man hier für die beiden verschiedenen Zugänge ein qualitativ unterschiedliches Verhalten des Gleichgewichtszustandes erhält.

Der „adiabatische“ Gleichgewichtszustand ergibt sich aus der kanonischen Besetzung der Eigenzustände $|+\rangle$ und $|-\rangle$ gemäß der momentanen Energieaufspaltung. Aus dem Hamiltonoperator (2.23) folgen die zeitabhängigen Energieeigenwerte zu

$$E_{\pm}(t) = \pm \hbar \left(\frac{\nu}{2} + g(t) \right) = \pm \frac{\hbar \nu(t)}{2}. \quad (3.73)$$

Damit erhält man die momentane Energieaufspaltung

$$\nu(t) = \nu + 2g(t). \quad (3.74)$$

Die Energieaufspaltung bestimmt nach der Boltzmann-Verteilung das Verhältnis der Besetzungszahlen der beiden Eigenzustände, nach Gleichung (D.1) folgt der Gleichgewichtszustand

$$\lambda(t) = \left(0, 0, -\tanh \frac{\hbar \beta \nu(t)}{2} \right). \quad (3.75)$$

Nun zum Vergleich der sich aus der Floquet-Mastergleichung ergebende Gleichgewichtszustand. Aus der Lösung der Pauli-Mastergleichung erhält man die Besetzungszahlen P_{\pm} der beiden Floquet-Zustände. Diese hängen von den gegebenen Systemparametern ab; hier ist jedoch nur von Bedeutung, dass P_+ und P_- nicht von der Zeit abhängen. Nach (3.71) erhält man den Gleichgewichtszustand

$$\lambda = (0, 0, P_+ - P_-). \quad (3.76)$$

Die Floquet-Mastergleichung liefert also im Gegensatz zu (3.75) einen konstanten Zustand, unabhängig von allen Parametern.

Das bedeutet jedoch nicht, dass für den adiabatischen Fall die Floquet-Mastergleichung für jedes Modell ihre Gültigkeit verlieren muss. So liefert z. B. die Mastergleichung für das in Abschnitt 2.2.2 beschriebene Qubit mit RF-Treiber für $\Omega \rightarrow 0$ denselben Gleichgewichtszustand wie die Annahme eines momentanen Gleichgewichts.

3.8. Grenzfall des schnellen Treibers ($\Omega \gg 1/\tau_S$)

Der entgegengesetzte Grenzfall ist der eines sehr schnellen Treibers, der nun ebenfalls genauer betrachtet werden soll. Anders als beim adiabatisch getriebenen System tritt in diesem Fall kein prinzipieller Widerspruch zu den Voraussetzungen der Floquet-Mastergleichung auf. Die Bedingung (3.20) an die Zeitskalen wird weiterhin erfüllt, die Mastergleichung ist also weiterhin anwendbar.

Darüber hinaus zeigt das System für diesen Fall ein besonders einfaches Verhalten, das sich anschaulich verstehen lässt: für große Treiberfrequenzen, d. h. fern aller Resonanzen des Systems, wird der Einfluss des Treibers bei zunehmender Frequenz immer geringer, solange die Stärke des Treibers nicht in gleichem Maße wächst. Das System ist sozusagen zu „träge“, um noch auf den Treiber reagieren zu können. Das Verhalten wird daher gegen das Verhalten des ungestörten Systems gehen.

Dies soll explizit am Beispiel der Qubit-Modelle gezeigt werden. Dazu werden die Floquet-Zustände in Abhängigkeit von der Treiberstärke betrachtet, bzw. deren Zusammensetzung aus den Fourier-Komponenten $|u_{\pm}^{(g)}\rangle$. Wie bereits in Kapitel 3.4 angesprochen, erhält man für das ungetriebene System nur die konstante Komponente $|u_{\pm}^{(0)}\rangle$, daher soll deren Verhalten nun näher betrachtet werden. Für die behandelten Modelle sind die Normquadrate dieser Beiträge nach (2.52) identisch für beide Floquet-Zustände, wir lassen daher die Indizes weg.

Für das Qubit mit σ_z -Treiber erhält man nach (2.34)

$$\langle u^{(0)} | u^{(0)} \rangle = J_0^2(g/\Omega), \quad (3.77)$$

die Zusammensetzung der Floquet-Zustände hängt also nur von dem Verhältnis g/Ω ab.

Ähnliches gilt für das Modell mit RF-Treiber. Dessen Floquet-Zustände hängen zunächst von Ω , g und ν ab. Wir betrachten nun die Aufspaltung ν als fest vorgegebene Systemeigenschaft (durch die auch die charakteristische Systemzeit τ_S gegeben ist). Wenn dann der Treiber so gewählt wird, dass $\Omega \gg \nu$

gilt, erhält man mit $\delta \approx -\Omega/2$ aus Gleichung (2.45)

$$\langle u^{(0)} | u^{(0)} \rangle \approx \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + 4(g/\Omega)^2}} \right). \quad (3.78)$$

Dieser Ausdruck hängt ebenfalls nur noch von g/Ω ab.

In beiden Fällen gilt also

$$\langle u^{(0)} | u^{(0)} \rangle \rightarrow 1, \quad \text{für } g/\Omega \rightarrow 0. \quad (3.79)$$

Aus Abbildung 3.4 wird deutlich, dass auch für σ_x -Treiber ein vergleichbares Verhalten vorliegt. Für große Ω , also $\Omega \gg g$, verschwinden somit alle anderen Fourier-Komponenten $|u^{(q)}\rangle$ der Floquet-Zustände, die dann mit den ungestörten Eigenzuständen zusammenfallen. Wie erwartet verhält sich das System somit wie im ungetriebenen Fall.

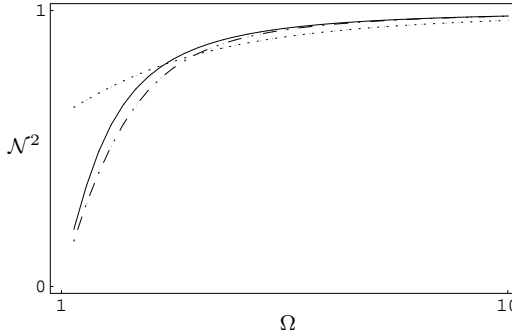


Abbildung 3.4: Normquadrat von $|u^{(0)}\rangle$ für Qubit mit σ_z -Treiber (—), RF-Treiber (.....) und σ_x -Treiber (-.-.-). Parameter $\nu = 1$, $g = 2$.

Dieses Ergebnis lässt sich auch im Zusammenhang mit der aus der magnetischen Resonanz bekannten *Average Hamiltonian Theory* verstehen [12, 20]. Eine „stroboskopisch“ beobachtete Zeitentwicklung des Systems kann in nullter Näherung durch den zeitlich gemittelten Hamiltonoperator beschrieben werden. Dazu kommen weitere Terme, die aus den Kommutatoren des System-Hamiltonoperators zu verschiedenen Zeiten resultieren. Bei gleichbleibender Treiberstärke wird die alleinige Beschreibung durch den mittleren Hamiltonian für zunehmende Treiberfrequenzen immer besser.

4. Effektive Temperatur

Wie im letzten Kapitel gezeigt wurde, verhält sich also das getriebene System in manchen Aspekten ganz ähnlich wie das ungetriebene System. So werden wie im ungetriebenen Fall die Nichtdiagonalelemente des Dichteoperators (in einer geeigneten Darstellung) weggedämpft, so dass der Gleichgewichtszustand ein statistisches Gemisch der Basiszustände bildet.

Worin sich der getriebene Fall jedoch unterscheidet, ist die Verteilung, mit der diese Zustände besetzt werden. Für ein ungetriebenes System gilt für die Besetzungszahlen der Eigenzustände im Gleichgewicht die kanonische Verteilung (Boltzmann-Verteilung)

$$P_i \propto e^{-\beta E_i} \quad \text{oder} \quad \ln P_i = -\beta E_i + c. \quad (4.1)$$

Beim getriebenen System erhält man jedoch in der Regel keine Boltzmann-Verteilung mit der Temperatur der Umgebung. Das liegt vor allem daran, dass wie in Kapitel 3.3.2 diskutiert die Bedingung der *Detailed Balance* nicht erfüllt wird.

Dennoch kann es sinnvoll sein, die Besetzung der Floquet-Zustände durch eine *effektive Temperatur* β_{eff} zu charakterisieren. Dabei stellt sich zunächst einmal das Problem, welche Größe an die Stelle der Eigenenergien treten soll, die für das zeitabhängige System ihre Bedeutung verlieren.

Die sich zunächst anbietenden Quasienergien sind allerdings nicht zur Charakterisierung der Verteilung geeignet, da sie (in gewissen Grenzen) willkürlich gewählt werden können, und somit keine absolute Ordnung der Floquet-Zustände festlegen. (Auch eine Beschränkung der Quasienergien auf eine bestimmte Zone der Breite Ω löst dieses Problem nicht, da der Nullpunkt der Zone physikalisch nicht ausgezeichnet ist und willkürlich gewählt werden kann). Wir verwenden daher die *mittleren Energien* der Floquet-Zustände, siehe (2.19)

$$\bar{E}_i := \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \langle \mathcal{E}_i(t) | H_S(t) | \mathcal{E}_i(t) \rangle dt. \quad (4.2)$$

Diese sind unabhängig von der Wahl der Quasienergien und stimmen im Grenzfall eines sehr schwachen Treibers mit den Eigenenergien überein.

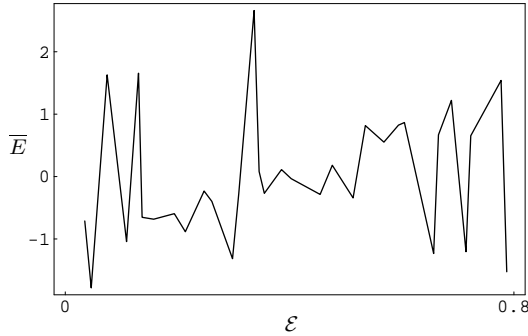


Abbildung 4.1: Mittlere Energie für Floquet-Zustände mit Quasienergie \mathcal{E} , am Beispiel der in Kapitel 6 diskutierten Spinkette ($n = 5$, $\Omega = 0.8$).

Dass im Regelfall zwischen mittleren Energien und Quasienergien kein einfacher Zusammenhang besteht, illustriert Abbildung 4.1. Gezeigt sind die mittleren Energien in Abhängigkeit von den Quasienergien für eine Kette aus fünf Spins. Dieses Modell wird auch in Abschnitt 4.2 als Beispiel dienen.

In den folgenden Abschnitten werden wir die effektive Temperatur anhand der Verteilung der Besetzungszahlen P_i als Funktion der mittleren Energien der Floquet-Zustände einführen, zunächst für den Fall eines getriebenen Qubits, anschließend für größere Systeme.

4.1. Effektive Temperatur für das Zwei-Niveau-System

Für ein Zwei-Niveau-System bzw. Qubit kann durch eine geeignete Wahl der Temperatur immer eine Boltzmann-Verteilung an die gegebenen Besetzungszahlen angepasst werden. Wir verwenden die Bezeichnungen aus Kapitel 3.6, mit den Besetzungszahlen P_{\pm} der Floquet-Zustände und deren mittlerer Energie \bar{E}_{\pm} . Analog zum ungetriebenen Qubit, siehe (D.3), kann die effektive Temperatur dann definiert werden als

$$\beta_{\text{eff}} := \frac{1}{\bar{E}_+ - \bar{E}_-} \ln \frac{P_-}{P_+} = \frac{1}{\bar{E}_+ - \bar{E}_-} \ln \frac{1 - \lambda_3}{1 + \lambda_3}, \quad (4.3)$$

wobei λ_3 die z -Komponente des Blochvektors $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}^{\text{qs}}$ des Gleichgewichtszustandes bezeichnet. Umgekehrt ergeben sich die Besetzungszahlen P_{\pm} dann entspre-

chend zu Gleichung (4.1) aus

$$P_{\pm} \propto e^{-\beta_{\text{eff}} \overline{E}_{\pm}}. \quad (4.4)$$

Den mittleren Energien der Floquet-Zustände entspricht eine gemittelte, oder effektive, Energieaufspaltung $\overline{\nu}$ des getriebenen Qubits

$$\overline{\nu} := |\overline{E}_+ - \overline{E}_-|. \quad (4.5)$$

Die mittlere Energie im Gleichgewicht ergibt sich dann wie im ungetriebenen Fall aus effektiver Temperatur und mittlerer Aufspaltung. Wenn die Beziehung (2.53) erfüllt ist (und dies gilt für alle verwendeten Qubit-Modelle aus Abschnitt 2.2), und damit

$$|\overline{E}_{\pm}| = \frac{\hbar \overline{\nu}}{2} \quad (4.6)$$

gilt, folgt der gemittelte Energieerwartungswert im Gleichgewicht mit (3.53) zu

$$\langle E_S \rangle_{\tau} = -\frac{\hbar \overline{\nu}}{2} \tanh \frac{\beta_{\text{eff}} \hbar \overline{\nu}}{2}, \quad (4.7)$$

analog zu Gleichung (D.4).

4.2. Effektive Temperatur für ein d -Niveau-System

Für größere Systeme kann eine effektive Temperatur nur noch näherungsweise eingeführt werden. Als Beispiel für eine Verteilung sind in Abbildung 4.2 die Besetzungszahlen der Floquet-Zustände für eine getriebene Spinkette gezeigt. Für das ungetriebene System erhält man eine kanonische Besetzung, in der logarithmischen Auftragung also eine Gerade mit der Steigung $-\beta$. Für das getriebene System weicht die Verteilung mehr oder weniger stark von der kanonischen Verteilung gemäß der Badtemperatur ab.

Wir definieren für diesen Fall die effektive Temperatur über die Anpassung einer kanonischen Verteilung. Dabei ergibt sich β_{eff} nach (4.1) als die negative Steigung der Regressionsgeraden zwischen $\ln P$ und \overline{E} .

Die so definierte effektive Temperatur beschreibt den Gleichgewichtszustand zumindest näherungsweise. Wie gut diese Beschreibung ist, hängt vom betrachteten Modell ab, dies wird anhand der Spinkette in Kapitel 6 noch näher diskutiert werden. Auch bei Systemen, deren Besetzung global betrachtet deutlich von einer kanonischen Verteilung abweicht, kann die Definition einer effektiven Temperatur für Teile des Spektrums sinnvoll sein. Dies wird an einem Modell in Kapitel 7 demonstriert.

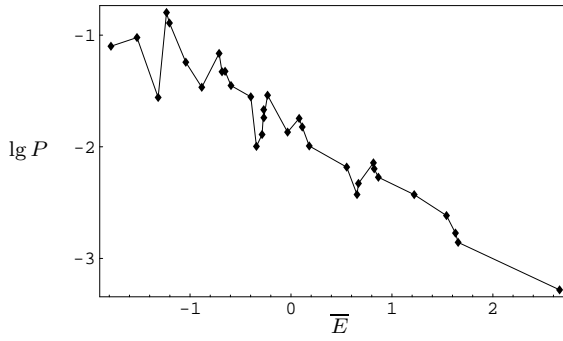


Abbildung 4.2: Verteilung $P(\bar{E})$, für die in Kapitel 6 diskutierte Spinkette.

5. Getriebenes gedämpftes Qubit

Wir betrachten nun das einfachste denkbare Modell genauer, ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen (Qubit), das sich im Kontakt mit einem Bad befindet (siehe Abbildung 5.1). Als Treiber wählen wir den in Abschnitt 2.2.3 eingeführten σ_x -Treiber. Der Systemhamiltonian lautet also

$$H_S = \hbar \left\{ \frac{\nu}{2} \sigma_z + g \sigma_x \sin \Omega t \right\}. \quad (5.1)$$

Zunächst soll das Verhalten, das sich aus der Floquet-Mastergleichung ergibt, mit zwei weiteren Modellen verglichen werden, einem vollständig unitär behandelten System-Bad-Modell und einer vereinfachten Lindblad-Mastergleichung. Danach sollen einige Eigenschaften des Floquet-Gleichgewichtszustandes betrachtet werden, wie Abhängigkeiten von der Badtemperatur oder von den Treiberparametern.

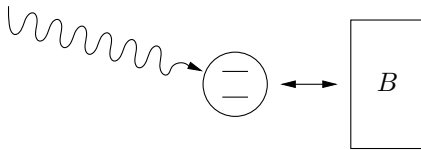


Abbildung 5.1: Qubit-Modell.

5.1. Relaxation in den quasistationären Zustand

Wir betrachten die Relaxation in den quasistationären Zustand für folgende Modellparameter

$$\nu = 1, \quad g = 0.1, \quad \Omega = 1.5, \quad \beta = 1. \quad (5.2)$$

Das System soll zum Zeitpunkt $t = 0$ im angeregten Zustand $|+\rangle$ des ungestörten Hamiltonians präpariert sein.

Abbildung 5.2 zeigt die Floquet-Zustände für diese Parameter, dargestellt ist die Zeitentwicklung auf der Blochkugel im Schrödinger-Bild für eine Treiberperiode τ . Für die Berechnung der Floquet-Zustände wurde eine Entwicklung bis $q_{\max} = 25$ verwendet.

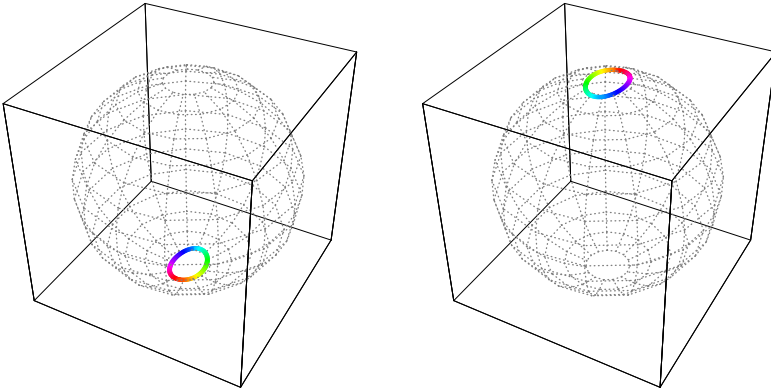


Abbildung 5.2: Floquet-Zustände $|\mathcal{E}_-\rangle$ (links) und $|\mathcal{E}_+\rangle$ (rechts) für das Qubit (Zeitentwicklung auf der Blochkugel im Schrödinger-Bild), $g = 0.1$, $\Omega = 1.5$. Quasienergien: $\mathcal{E}_\pm = \pm 0.496$.

5.1.1. Floquet-Mastergleichung

Die Zeitentwicklung nach der Floquet-Mastergleichung wurde aus der Integration der Mastergleichung für den generischen Fall gewonnen. Die Badparameter wurden gewählt als

$$\gamma_0 = 0.1, \quad \xi = 3, \quad A = \sigma_+ + \sigma_- \quad (5.3)$$

Mit den Fourier-Komponenten der Floquet-Zustände lassen sich die Matrixelemente $A_{\alpha\beta}(k)$ berechnen, diese liefern dann die Matrixelemente des Dissipators, (3.35) und (3.36). Aus den Raten $w_{12} = 0.153$ und $w_{21} = 0.0569$ folgt der Blochvektor des quasistationären Zustands im Floquet-Bild mit (3.67) als

$$\tilde{\lambda}^{\text{qs}} = (0, 0, -0.4587). \quad (5.4)$$

Die Zeitentwicklung des Blochvektors über 10 Treiberperioden ist in Abbildung 5.3 zu sehen, sowohl im Floquet-Bild als auch zurücktransformiert in das Schrödinger-Bild. Der Anfangszustand $|+\rangle$ stellt eine Superposition der beiden Floquet-Zustände dar, daher startet das System im Floquet-Bild außerhalb des Pols der Blochkugel. Die Nichtdiagonalelemente werden weggedämpft, der Endzustand ist dann ein Gemisch der beiden Floquet-Zustände. Im Schrödinger-Bild hingegen oszilliert der quasistationäre Zustand mit nicht verschwindenden Nichtdiagonalelementen.

Die Stärke der Badankopplung wurde mit Absicht eigentlich außerhalb der Gültigkeit der Mastergleichung gewählt, um für die grafische Darstellung die

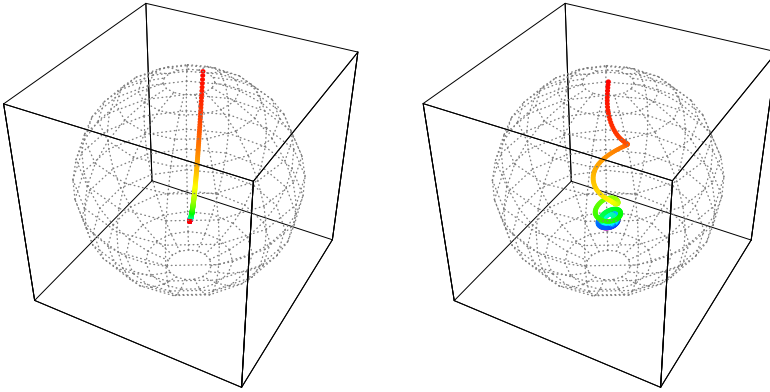


Abbildung 5.3: Relaxation in den quasistationären Zustand (Floquet-Mastergleichung), links: Blochkugel im Floquet-Bild, rechts: Schrödinger-Bild, Zeitentwicklung bis $t = 10\tau$.

Relaxation zu beschleunigen; der quasistationäre Zustand ist dadurch nicht betroffen. Im tatsächlichen Gültigkeitsbereich verläuft die Relaxation deutlich langsamer als die Eigendynamik, der Blochvektor beschreibt dann im Schrödinger-Bild eine „Schraube“ mit sehr kleiner Ganghöhe.

5.1.2. Unitär modelliertes Bad

Die Voraussage der Floquet-Mastergleichung soll nun mit einem Modell verglichen werden, dass ohne die verwendeten Bad-Näherungen auskommt. Wir nutzen dabei aus, dass ein (kleines) Quantensystem bereits unter unitärer Zeitentwicklung ein thermodynamisches Verhalten zeigen kann, wenn es geeignet in eine größere Umgebung eingebettet wird [4, 16]. Wir betrachten nun also die Schrödingerdynamik für den folgenden Hamiltonoperator

$$H(t) = H_S(t) + H_B + \gamma_0 H_{SB}. \quad (5.5)$$

Für die Umgebung verwenden wir das in [15] diskutierte Bad-Modell, siehe Abbildung 5.4. Es besteht aus zwei Bändern äquidistanter Niveaus, der Abstand der Bänder sei Δ , die Breite der Bänder sei in beiden Fällen $\delta\epsilon$. Zu Beginn soll sich das Bad in einer zufälligen Superposition der Zustände des unteren Bandes befinden.

Die Anzahl der Niveaus in den beiden Bändern (insgesamt N_B) ist durch

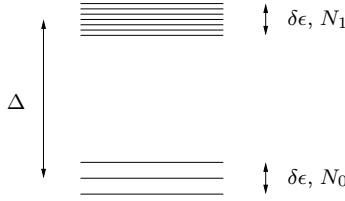


Abbildung 5.4: Bad-Modell.

die Badtemperatur vorgegeben

$$N_0 = \frac{1}{1 + e^{\beta\Delta}} N_B, \quad N_1 = \frac{e^{\beta\Delta}}{1 + e^{\beta\Delta}} N_B, \quad N_1/N_0 = e^{\beta\Delta}. \quad (5.6)$$

Dadurch ergeben sich für das gedämpfte System das für diese Temperatur zu erwartende Verhältnis der Übergangsraten. Für $\beta = 1$ und $N_B = 1000$ folgt $N_0 = 267$ und $N_1 = 733$.

Um Energieaustausch zwischen System und Bad zu ermöglichen, müssen die Eigenenergien des Bades auf das System abgestimmt werden. Nach (2.51) beträgt die momentane Energieaufspaltung des Qubits

$$\nu(t) = \sqrt{\nu^2 + 4g^2 \sin^2 \Omega t}. \quad (5.7)$$

Für die gewählten Parameter liegen die Eigenenergien zwischen 0 und 1.0198, wir wählen daher

$$\Delta = 1.01, \quad \delta\epsilon = 0.01. \quad (5.8)$$

Die Treiberstärke g wurde relativ schwach gewählt, um zu vermeiden, dass die erforderliche Breite der Bänder des Bades zu groß wird. Da die maximale Anzahl der Badniveaus für die numerische Simulation beschränkt ist, würden die einzelnen Niveaus dann nicht mehr dicht genug liegen.

Für die Wechselwirkung H_{SB} wird eine hermitesche Zufallsmatrix im Hilbertraum des Gesamtsystems verwendet. Deren Diagonalelemente werden aus einer Normalverteilung mit Standardabweichung $\sigma = \sqrt{2}$ gewählt, die Real- und Imaginärteile der Nichtdiagonalelemente mit Standardabweichung $\sigma = 1$. Diese Art der Verteilung garantiert, dass die Invarianz unter unitären Transformationen gegeben ist [34]. Die Ankopplung des Bades an das Spinsystem ist schwach ($\gamma_0 = 0.0025$).

Die Zeitentwicklung wird durch numerische Integration der Schrödingergleichung bestimmt. Wie zu fordern ist, relaxiert das Qubit für $g = 0$ in den normalen, der Badtemperatur entsprechenden Gleichgewichtszustand. Das Relaxationsverhalten für das getriebene Qubit ist in Abbildung 5.5 gezeigt. Die

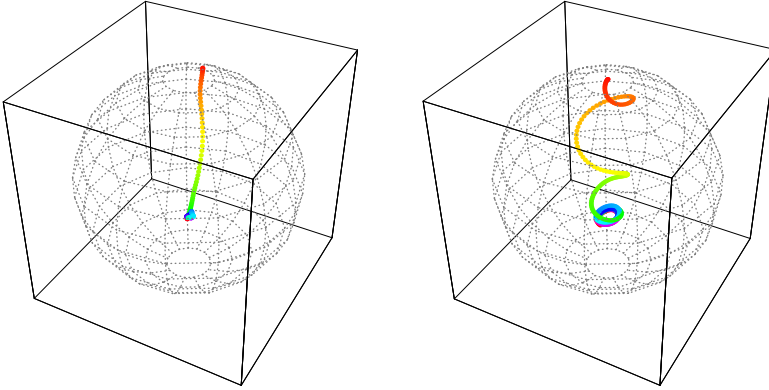


Abbildung 5.5: Relaxation in den quasistationären Zustand (Schrödinger-Bad). links: Floquet-Bild, rechts: Schrödinger-Bild, Zeitentwicklung bis $t = 10\tau$.

Schrödingerdynamik zeigt prinzipiell dasselbe Verhalten wie die Floquet-Mastergleichung, vergleiche mit Abbildung 5.3. Eine genaue Übereinstimmung des Relaxationsverhaltens kann nicht erwartet werden, dazu sind die beiden verwendeten Bad-Modelle zu verschieden. Da das Bad des Schrödinger-Modells endliche Größe hat, zeigt der erreichte Gleichgewichtszustand deutliche Fluktuationen. Zum Vergleich mit der Voraussage der Floquet-Mastergleichung wurde daher der Blochvektor im Floquet-Bild für die Zeiten von $t = 10\tau$ bis $t = 50\tau$ gemittelt. Man erhält schließlich aus der unitären Dynamik

$$\tilde{\lambda}^{\text{qs}} = \begin{pmatrix} 0.0005 \pm 0.0180 \\ 0.0029 \pm 0.0178 \\ -0.4408 \pm 0.0252 \end{pmatrix}, \quad (5.9)$$

in sehr guter Übereinstimmung mit (5.4).

5.1.3. Mastergleichung mit vereinfachtem Bad-Modell

Als weiteres Modell betrachten wir eine vereinfachte Mastergleichung mit der folgenden Form im Schrödinger-Bild, siehe (1.22)

$$\dot{\rho} = -i[H_S(t), \rho] + \mathcal{D}(\rho, t). \quad (5.10)$$

Nur ein Dämpfungskanal soll wirken, vermittelt durch die beiden Lindblad-Operatoren σ_+ und σ_- . In die Raten $\gamma(\pm\omega)$ geht die momentane Aufspal-

tung $\nu(t)$ des Qubits ein, siehe (5.7),

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\rho, t) = & \gamma_+(t) \left(\sigma_- \rho \sigma_+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_+ \sigma_-, \rho \} \right) \\ & + \gamma_-(t) \left(\sigma_+ \rho \sigma_- - \frac{1}{2} \{ \sigma_- \sigma_+, \rho \} \right), \end{aligned} \quad (5.11)$$

mit

$$\gamma_{\pm}(t) := \gamma(\pm \nu(t)). \quad (5.12)$$

Wie bei den anderen beiden Szenarien startet das Qubit im angeregten Zustand. Die Zeitentwicklung, aus der numerischen Integration der Mastergleichung, ist in Abbildung 5.6 gezeigt. Der Zustand, der sich nach der anfängli-

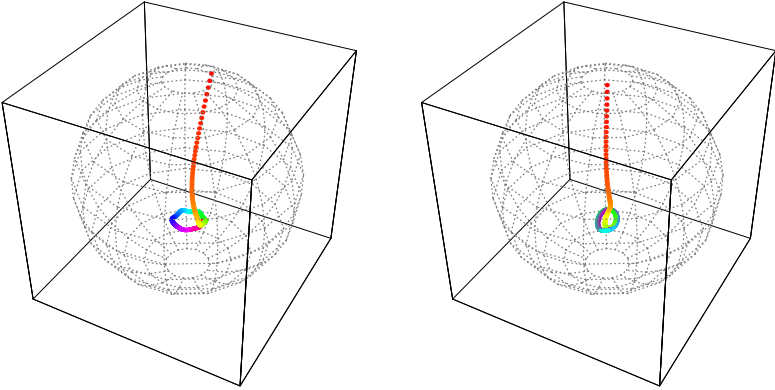


Abbildung 5.6: Relaxation in den quasistationären Zustand (vereinfachte Mastergleichung), links: Floquet-Bild, rechts: Schrödinger-Bild, Zeitentwicklung bis $t = 4\tau$, $g = 0.2$, $\gamma_0 = 0.5$.

chen Relaxation einstellt, ist wieder periodisch mit Ω , wie beim Gleichgewicht der Floquet-Mastergleichung. Anders als dort zeigt der Zustand jedoch sowohl im Schrödinger-Bild als auch im Floquet-Bild eine Zeitabhängigkeit.

Ein weiterer Unterschied ist das Verhalten in Abhängigkeit von der Badankopplung. Bei der vereinfachten Mastergleichung verschwindet der Dissipator im quasistationären Zustand nicht, deshalb hängt dieser auch von der Stärke γ_0 der Ankopplung ab. Dabei nähert sich für sehr schwache Badankopplung der quasistationäre Zustand an das Resultat der Floquet-Mastergleichung an.

5.2. Eigenschaften des Gleichgewichtszustandes

Nach der Betrachtung des Relaxationsverhaltens wollen wir uns nun einigen Eigenschaften des Floquet-Gleichgewichtszustandes zuwenden, und dabei insbesondere auch auf Unterschiede zum ungetriebenen System eingehen. Dazu betrachten wir unter anderem die Parameterabhängigkeit verschiedener Kenngrößen des quasistationären Zustands, wie zum Beispiel der Purity.

5.2.1. Temperaturabhängigkeit

In Abbildung 5.7 ist die Temperaturabhängigkeit der Purity \mathcal{P} aufgetragen. Sowohl das ungetriebene als auch das getriebene System nimmt im Fall großer

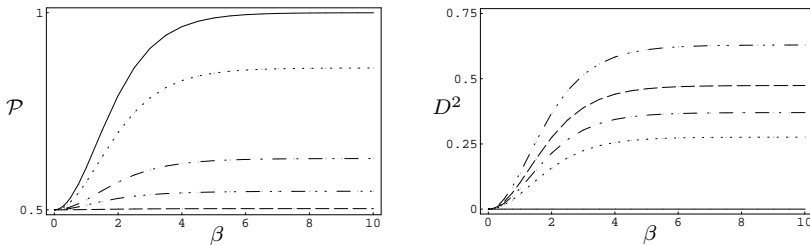


Abbildung 5.7: Purity (links) und gemittelter Bures-Abstand (C.8) zum ungetriebenen Gleichgewicht (rechts) für $g = 0$ (—), $g = 0.2$ (⋯), $g = 0.3$ (-·-), $g = 0.4$ (- - -) und $g = 0.5$ (-··-). Treiberfrequenz $\Omega = 1.2$.

Temperatur ($\beta = 0$) den vollständig gemischten Zustand mit $\mathcal{P} = 1/2$ an. Jedoch unterscheidet sich das Verhalten für den Grenzfall $T = 0$ ($\beta \rightarrow \infty$), wie bereits in Abschnitt 3.5.3 ausgeführt: Während sich das ungetriebene System vollständig im Grundzustand befindet, also in einem reinen Zustand mit $\mathcal{P} = 1$, bleibt das Floquet-Gleichgewicht in der Regel teilweise gemischt; der erreichte Zustand hängt dabei von den Systemparametern ab.

Der Unterschied zwischen getriebenem und ungetriebenem System ist besonders ausgeprägt für große β . Dies wird auch deutlich, wenn man den Bures-Abstand (C.8) zum ungetriebenen Gleichgewicht für dieselbe Temperatur betrachtet. Da dieser zeitabhängig ist (periodisch mit τ), bilden wir den Mittelwert über eine Periode, siehe ebenfalls Abbildung 5.7.

Interessant ist, dass beim getriebenen System für bestimmte Parameter Gleichgewichtszustände auftreten können, die unabhängig von der gewählten Badtemperatur vollständig gemischt sind ($\mathcal{P} = 1/2$). Für die gewählten Parameter ist das z. B. bei $g = 0.4$ der Fall.

5.2.2. Abhängigkeit von den Treiberparametern

Wir untersuchen nun die Abhängigkeit der effektiven Temperatur und der Purity des Floquet-Gleichgewichts von den Treiberparametern g und Ω . Die Umgebungstemperatur beträgt bei allen Rechnungen dieses Abschnitts $\beta = 1$.

In Abbildung 5.8 ist die effektive Temperatur β_{eff} des Qubits nach der Definition (4.3) aufgetragen. Wir wollen zunächst die Abhängigkeit von der Trei-

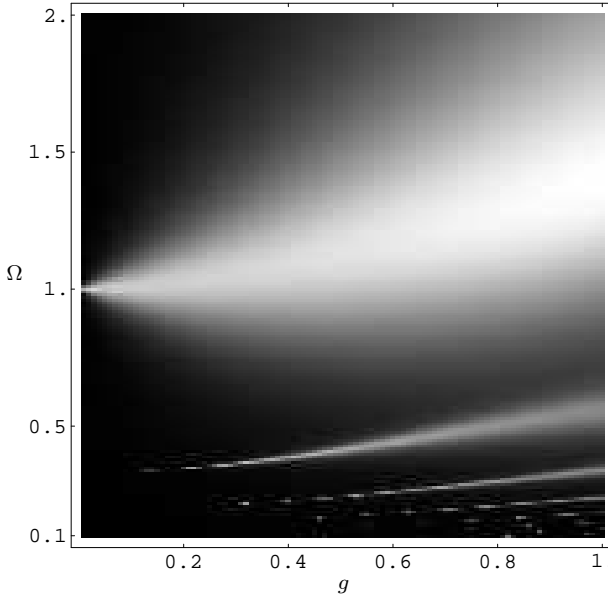


Abbildung 5.8: Effektive Temperatur β_{eff} des Qubits als Funktion von Treiberstärke und -frequenz. Der Wertebereich liegt zwischen $\beta_{\text{eff}} = 1$ (schwarz) und $\beta_{\text{eff}} \approx 2.1$ (weiß).

berfrequenz Ω für zunehmende Treiberstärke betrachten. Wie zu erwarten ist, weicht für kleine g die effektive Temperatur nur geringfügig von der Temperatur des Bades ab. Dies gilt jedoch nicht bei der Übergangsfrequenz des ungetriebenen Qubits, wo eine scharfe Resonanz auftritt. Der Übergang von $g = 0$ zu $g > 0$ verläuft dabei an dieser Stelle unstetig.

Für zunehmende Treiberstärke lassen sich nun verschiedene Effekte beobachten. So entstehen zum Einen weitere Resonanzen bei kleinen Treiberfrequenzen. Als weiterer Effekt verbreitern sich die Resonanzpeaks mit zunehmendem Ω , und verschieben sich gleichzeitig zu etwas höheren Frequenzen.

Dies ist in der Abbildung besonders deutlich an den Resonanzen bei kleinen Ω zu sehen. (Die dort auftretenden „Lücken“ sind ein Artefakt der begrenzten Auflösung von 0.01 für beide Parameter).

In Abbildung 5.9 ist die Abhängigkeit von der Treiberfrequenz noch einmal gesondert für einige Treiberstärken g gezeigt. Deutlich zu sehen ist die Verbreiterung und Verlagerung der Resonanzen zu höheren Ω , ebenso das Auftreten einer Vielzahl von weiteren Resonanzen bei geringen Frequenzen.

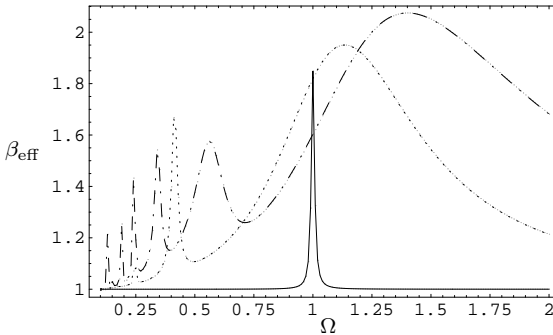


Abbildung 5.9: Effektive Temperatur β_{eff} in Abhängigkeit von der Treiberfrequenz. Für $g = 0.01$ (—), $g = 0.5$ (····) und $g = 1$ (-·-·).

Wir betrachten nun den Zusammenhang der effektiven Temperatur mit der Purity \mathcal{P} des Gleichgewichtszustandes und der effektiven Aufspaltung $\bar{\nu}$. Dazu betrachten wir die Abhängigkeit dieser Größen von der Treiberstärke g für einige Treiberfrequenzen, siehe Abbildung 5.10 auf Seite 55.

Solange im System keine Besetzungsinversion auftritt (und das ist hier nirgends der Fall), besteht im kanonischen Zustand zwischen der Purity und der Grundzustands-Besetzung ein streng monotoner Zusammenhang. Mit wachsender Purity nimmt dabei die Besetzung des angeregten Zustands ab, und damit auch die Temperatur, die inverse Temperatur β_{eff} nimmt daher mit wachsendem \mathcal{P} ebenfalls zu. Beim Vergleich der oberen beiden Abbildungen in Abb. 5.10 fallen jedoch deutliche Abweichungen von dieser Erwartung auf. So erhält man für $\Omega = 1$ ein abnehmendes β_{eff} , trotz zunehmender Purity. Für $\Omega = 0.4$ erhält man bei der Resonanz ebenfalls ein gegenteiliges Verhalten von Purity und effektiver Temperatur: der praktisch vollständig gemischte Zustand zeichnet sich durch eine besonders „kalte“ effektive Temperatur aus. Das gleiche gilt auch bei der für $\Omega = 0.6$ einsetzenden Resonanz. Das Verhalten der Temperatur fern der Resonanzen lässt sich dagegen tendenziell gut durch das Verhalten der Purity erklären.

Grund für dieses Verhalten ist die parameterabhängige effektive Aufspaltung. Sie führt zu einem konkurrierendem Effekt: eine größere Aufspaltung $\overline{\nu}$ führt zu einer höheren Temperatur, also einer Erniedrigung von β_{eff} . Dabei divergiert für kleine Aufspaltungen die effektive Temperatur, so dass in der Umgebung einer Entartung der mittleren Energien \overline{E}_{\pm} die effektive inverse Temperatur stark anwächst. Die Resonanzen von β_{eff} hängen also zusammen mit den Nullstellen der effektiven Aufspaltung.

Ein interessanter Aspekt ist, dass für den bisher betrachteten Parameterbereich $0 \leq g \leq 1$ die effektive Temperatur des Systems durch den Treiber grundsätzlich kälter wird (für die inverse Temperatur gilt überall $\beta_{\text{eff}} \geq \beta$). Das Verhalten für große Treiberstärken g ist in Abbildung 5.11 auf Seite 56 aufgetragen: In diesem Bereich werden die Resonanzen mit zunehmendem g immer kleiner, die effektive Temperatur hängt außerdem nur noch schwach von der Treiberfrequenz ab. Gleichzeitig sinkt die effektive inverse Temperatur immer mehr unter die des Bades, das System wird durch den starken Treiber also heißer.

5.2.3. Zeitabhängigkeit der Gleichgewichtszustände

Einige Beispiele für die Zeitentwicklung des Gleichgewichtszustandes im Schrödinger-Bild sind in Abbildung 5.12 auf Seite 57 zu verschiedenen Treiberstärken gezeigt. Für sehr kleine g weicht der Zustand wie zu erwarten nur geringfügig vom ungestörten Gleichgewicht ab. Vergleiche das Verhalten für etwas größere g auch mit der in Abbildung 5.10 aufgetragenen Purity für $\Omega = 1.2$. Diese nimmt mit zunehmendem Treiber zunächst ab, entsprechend der Blochvektor-Länge, bis man bei etwa $g = 0.4$ den vollständig gemischten Zustand erhält. Für größere Treiber nimmt die Purity dann wieder zu.

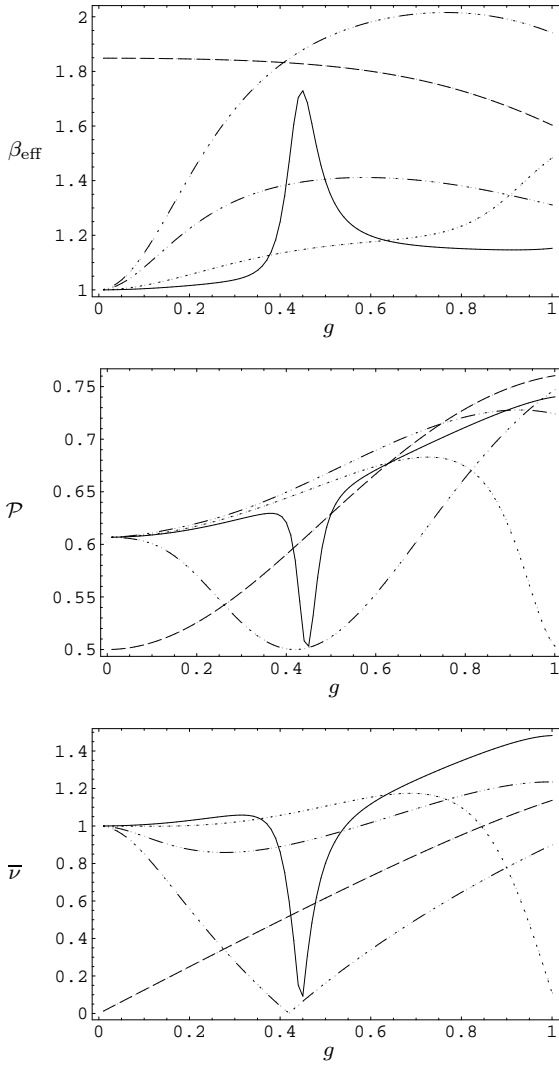


Abbildung 5.10: Abhängigkeiten der effektiven Temperatur β_{eff} , der Purity \mathcal{P} und der effektiven Aufspaltung $\bar{\nu}$ von der Treiberstärke g für verschiedene Treiberfrequenzen. $\Omega = 0.4$ (—), $\Omega = 0.6$ (⋯), $\Omega = 0.8$ (-·-), $\Omega = 1$ (- - -), $\Omega = 1.2$ (-·-·-).

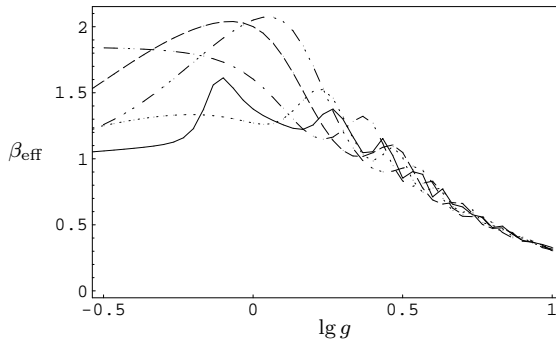


Abbildung 5.11: Verhalten von β_{eff} für große g . Für $\Omega = 0.5$ (—), $\Omega = 0.75$ (⋯⋯), $\Omega = 1$ (-·-), $\Omega = 1.25$ (- - -) und $\Omega = 1.5$ (- - - -).

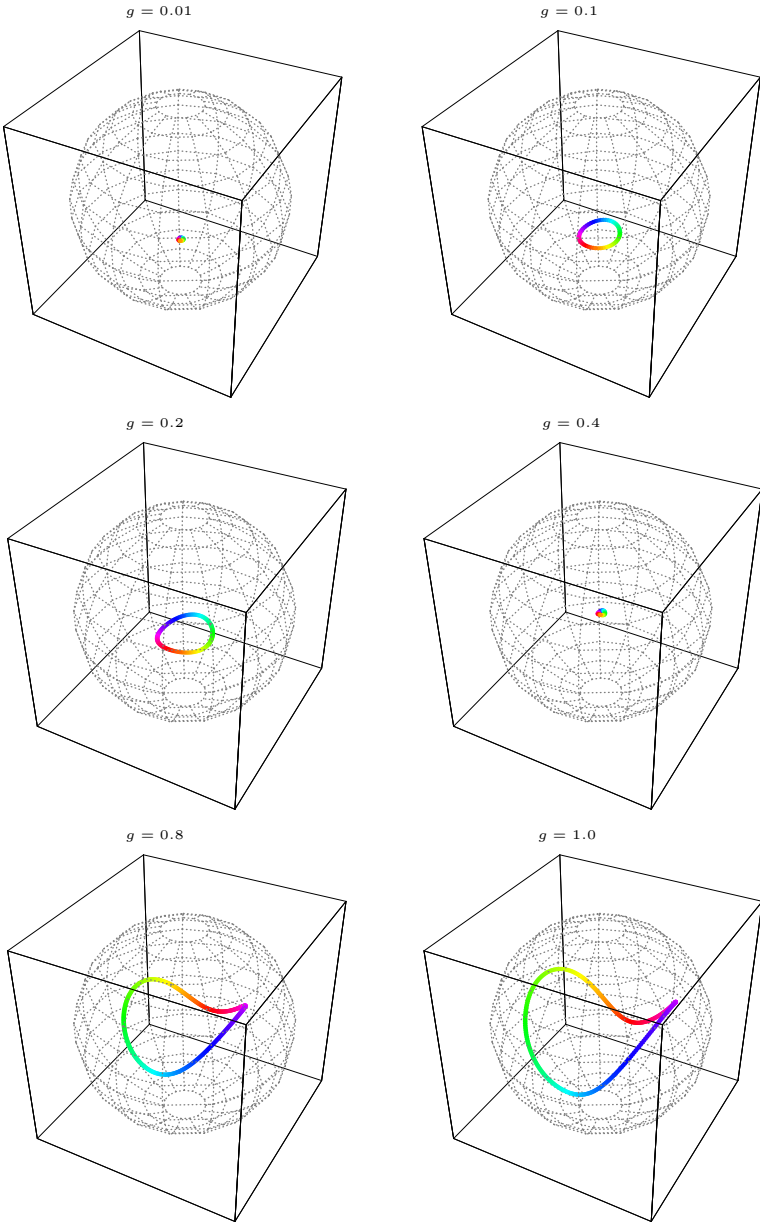


Abbildung 5.12: Zeitentwicklung der Gleichgewichtszustände im Schrödinger-Bild für verschiedene Treiberstärken, $\Omega = 1.2$.

6. Lokal getriebene Spinkette

Die Anwendbarkeit der in Kapitel 4 definierten effektiven Temperatur auf größere Systeme als das Zwei-Niveau-System soll nun anhand des Modells einer getriebenen Spinkette untersucht werden. Dazu wird die Beschreibung des Gleichgewichtszustandes durch die Floquet-Zustände mit einer alternativen Beschreibung über die ungestörten Eigenzustände verglichen.

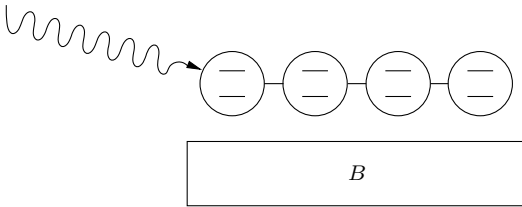


Abbildung 6.1: Getriebene gedämpfte Spinkette.

6.1. Modell

Die Spinkette besteht aus n Qubits, die über die Heisenberg-Wechselwirkung miteinander gekoppelt sind. Die Aufspaltungen und Kopplungsstärken seien identisch für alle Spins. Für den Treiber sind nun viele Möglichkeiten denkbar, wir betrachten hier die Situation, dass auf einen der Randspins ein σ_x -Treiber wirkt, siehe Abbildung 6.1. Der Hamiltonian lautet also

$$H_S(t) = \frac{\nu}{2} \sum_{j=1}^n \sigma_z^{(j)} + \mu \sum_{j=1}^{n-1} \boldsymbol{\sigma}^{(j)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(j+1)} + g \sigma_x^{(1)} \sin \Omega t, \quad (6.1)$$

mit

$$n = 4, \quad \nu = 1, \quad \mu = 0.05, \quad q_{\max} = 30, \quad (6.2)$$

und unterschiedlichen Treiberparametern g und Ω . Die Badtemperatur soll in diesem Kapitel immer $\beta = 1$ betragen. Die weiteren Badparameter sind (vgl.

Abschnitt 1.2.2)

$$A = \sum_j \sigma_+^{(j)} + \sigma_-^{(j)}, \quad \xi = 3, \quad \gamma_0 = 1, \quad (6.3)$$

wobei γ_0 nur für die numerischen Berechnungen benötigt wird, der erreichte Gleichgewichtszustand hängt von der Badstärke nicht ab.

6.2. Effektive Temperatur

Für dieses Modell soll nun die Anwendbarkeit der in Kapitel 4 eingeführten effektiven Temperatur genauer untersucht werden.

Wir betrachten dazu den Gleichgewichtszustand in zwei verschiedenen Beschreibungsmöglichkeiten. Die erste ist die Beschreibung über die Besetzung der Floquet-Zustände: die Verteilung $P(\bar{E})$, also P_i als Funktion der mittleren Energie der Floquet-Zustände, \bar{E}_i . Sie ist für die getriebene Spinkette in Abbildung 6.2 gezeigt.

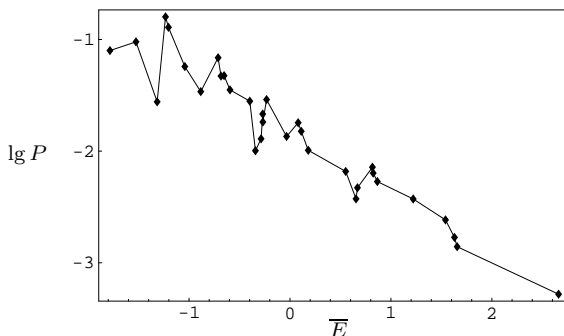


Abbildung 6.2: Verteilung $P(\bar{E})$, für $n = 5$, $\mu = 0.05$, $g = 0.2$, $\Omega = 0.8$. Die Verteilung entspricht einer effektiven Temperatur von $\beta_{\text{eff}} = 1.26$.

Wir vergleichen nun diese Verteilung mit einer Beschreibung über die ungetriebenen Eigenzustände: wir verwenden dazu die Verteilung der Besetzungen der Eigenzustände über den Eigenenergien. Da sich diese Besetzungszahlen in der Regel über den Verlauf einer Treiberperiode τ ändern, betrachten wir den Mittelwert

$$\bar{P}_i := \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \langle E_i | \rho(t) | E_i \rangle dt. \quad (6.4)$$

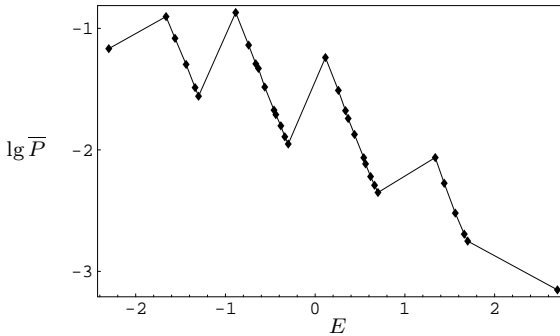


Abbildung 6.3: Verteilung $\overline{P}(E)$, Parameter wie in Abbildung 6.2. Die Verteilung entspricht einer effektiven Temperatur von $\beta_{\text{eff}} = 0.995$.

Die Verteilung $\overline{P}(E)$ ist in Abbildung 6.3 gezeigt. Die beiden Zugänge unterscheiden sich sozusagen durch die Art der Mittelwertbildung: Eine der beiden interessierenden Größen ist jeweils zeitabhängig, in der Floquet-Darstellung liegen konstante Besetzungszahlen mit zeitabhängigen Zuständen vor, bei der Beschreibung über die Eigenzustände sind die Zustände konstant, dafür sind die Besetzungszahlen zeitabhängig.

Die Verteilung $\overline{P}(E)$ zeigt ein interessantes Verhalten: auch wenn die Beschreibung über die Floquet-Zustände, wie unten diskutiert, eine bessere Charakterisierung der Gesamtverteilung liefert, sind die mittleren Besetzungszahlen innerhalb der Unterräume gleicher Spin-Anregung in sehr guter Näherung kanonisch verteilt. Die effektiven Temperaturen, die sich aus den Verteilungen $\overline{P}(E)$ in den jeweiligen Unterräumen ergeben, liegen dabei bei ungefähr $\beta = 4.1$ bis $\beta = 4.4$.

Wir vergleichen nun die in Kapitel 4 definierte effektive Temperatur aus der Verteilung $P(\overline{E})$ mit der Temperatur, die sich aus der Verteilung $\overline{P}(E)$ ergibt. Um quantitativ zu beurteilen, wie gut die Verteilungen durch eine kanonische Besetzung beschrieben werden können, betrachten wir jeweils das *Bestimmtheitsmaß* R^2 der linearen Regression. Dabei ist R der empirische Korrelationskoeffizient zwischen den Energien $x_i := \overline{E}_i$ und den Besetzungszahlen $y_i := \ln P_i$ (für die Verteilung $\overline{P}(E)$ entsprechend),

$$R = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_i (x_i - \bar{x})^2 \cdot \sum_i (y_i - \bar{y})^2}}, \quad (6.5)$$

siehe [8]. Für den Wertebereich von R^2 gilt

$$0 \leq R^2 \leq 1, \quad (6.6)$$

wenn die Verteilung exakt durch die Regression beschrieben wird ist $R^2 = 1$, wenn kein linearer Zusammenhang besteht ist $R^2 = 0$. In Abbildung 6.4 ist R^2 für die Spinkette aufgetragen. Zwei Punkte fallen dabei auf:

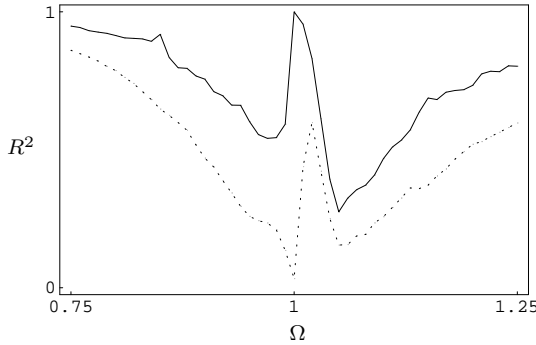


Abbildung 6.4: Bestimmtheitsmaß R^2 für die Verteilungen $P(\overline{E})$ (—) und $\overline{P}(E)$ (⋯) für eine Spinkette ($n = 5$, $\mu = 0.05$, $g = 0.2$).

- Die Beschreibung über die Floquet-Zustände ist für den gesamten Parameterbereich besser als die Beschreibung über die mittlere Besetzung der ungestörten Eigenzustände. Es ist also gerechtfertigt, die Verteilung $P(\overline{E})$ zur Beschreibung des Systems zugrunde zu legen.
- In der Nähe der Resonanz $\Omega = \nu$ erhält man in sehr guter Näherung eine kanonische Besetzung der Floquet-Zustände bezüglich ihrer mittleren Energie; dort ist die alternative Beschreibung besonders aussagekräftig.

Zusammenfassend kann also festgestellt werden, dass sich für dieses Modell (zumindest für bestimmte Parameterbereiche) die Gleichgewichts-Besetzungszahlen der Floquet-Zustände in guter Näherung durch eine effektive Temperatur β_{eff} beschreiben lassen.

6.3. Parameterabhängigkeit der effektiven Temperatur

Wir betrachten nun die Abhängigkeit der effektiven Temperatur von Treiberfrequenz und Treiberstärke. In Abbildung 6.5 ist dazu β_{eff} für die in Abschnitt 6.1 gegebenen Modellparameter aufgetragen.

Wie beim getriebenen Qubit in Abschnitt 5.2.2, betrachten wir zunächst das Verhalten für kleine g , vergleiche dazu auch Abbildung 6.6 auf Seite 63,

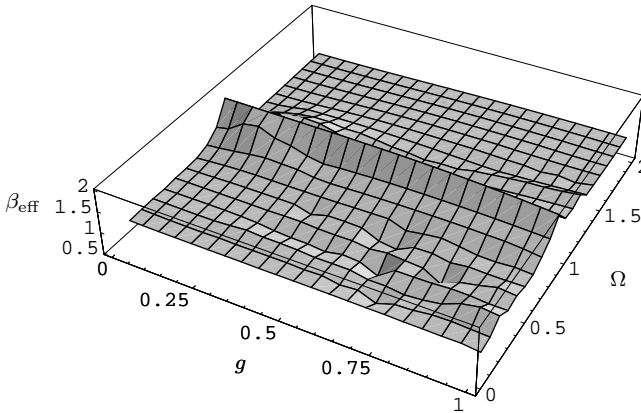


Abbildung 6.5: Effektive Temperatur β_{eff} der Spinkette von Treiberstärke und -frequenz. Der Wertebereich liegt zwischen $\beta_{\text{eff}} \approx 0.7$ und $\beta_{\text{eff}} \approx 1.9$.

in der die Ω -Abhängigkeit für einige Treiberstärken noch einmal gesondert aufgetragen ist. Auch hier erhält man einen Resonanzpeak bei $\Omega = \nu$, für Fre-

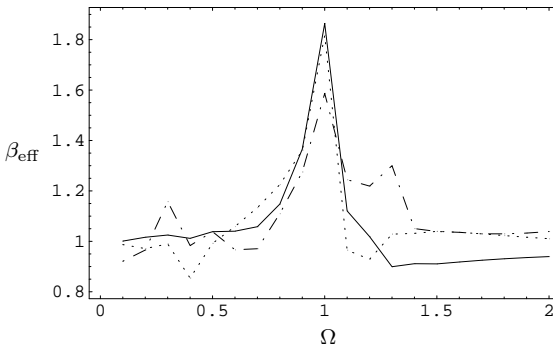


Abbildung 6.6: Abhängigkeit von β_{eff} von der Treiberfrequenz Ω für verschiedene Treiberstärken: $g = 0.01$ (—), $g = 0.5$ (⋯), $g = 1$ (-·-·).

quenzen fern dieser Stelle weicht die effektive Temperatur nur geringfügig von der Temperatur der Umgebung ab. Dieses ähnliche Verhalten ist durchaus zu erwarten, da die einzelnen Qubits der Kette nur schwach miteinander gekoppelt sind. Die Kopplung an die anderen Spins macht sich allerdings in einer deutlichen Verbreiterung der Resonanz bemerkbar, wie durch einen Vergleich

mit Abbildung 5.9 auf Seite 53 gut zu sehen ist.

Anders als beim einzelnen Qubit tritt allerdings für zunehmende Treiberstärke weder eine Verschiebung der Resonanz auf, noch eine merkliche Verbreiterung des Peaks. Außerhalb der zentralen Resonanz ist β_{eff} nur schwach von den Treiberparametern abhängig, weitere Resonanzen scheinen nicht aufzutreten. Ein weiterer Unterschied zum Qubit ist, dass in diesem Parameterbereich effektive Temperaturen auftreten, die einer Erwärmung im Vergleich zum Bad entsprechen.

Für große Treiberstärken ergibt sich wieder ein ähnliches Bild wie beim einzelnen Qubit, siehe Abbildung 6.7. Auch hier ist die Tendenz erkennbar, dass für zunehmendes g das System immer heißer wird.

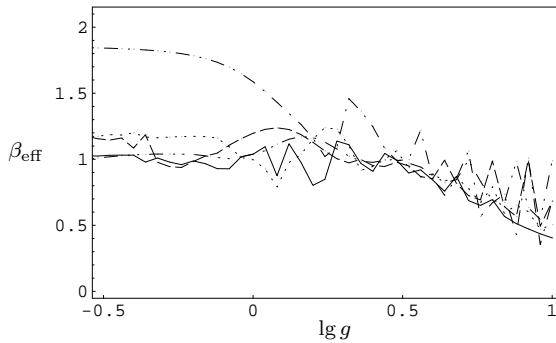


Abbildung 6.7: Verhalten von β_{eff} für große g und $\Omega = 0.5$ (—), $\Omega = 0.75$ (····), $\Omega = 1$ (-·-·), $\Omega = 1.25$ (- - -) und $\Omega = 1.5$ (-·-·).

7. Getriebenes Teilchen im Potenzialtopf

Als ein weiteres Beispiel für die Anwendung der Floquet-Mastergleichung betrachten wir nun ein getriebenes Teilchen im unendlichen Potenzialtopf. Für das Modell des getriebenen harmonischen Oszillators wurde mit der Methode der stochastischen Wellenfunktionen gezeigt, dass sich eine kanonische Besetzung der Floquet-Zustände einstellt [6]. Breuer *et al.* haben am Potenzialtopf-Modell demonstriert, dass für nichtharmonische Potentiale die Besetzung der Floquet-Zustände in der Regel von einer kanonischen Verteilung abweicht [5, 22].

Hier soll zunächst die von den Autoren beobachtete Verteilung beschrieben werden, die eine interessante Form aufweist. Das zugrundeliegende Modell wird im nächsten Abschnitt genauer spezifiziert. Anschließend wird dann in Abschnitt 7.2 das Konzept der effektiven Temperatur auf das Modell angewandt und deren Parameterabhängigkeit genauer betrachtet.

Der Hamiltonoperator lautet

$$H_S(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) + \lambda x \sin \omega t, \quad (7.1)$$

mit

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{für } |x| < a, \\ \infty, & \text{für } |x| > a. \end{cases} \quad (7.2)$$

Berechnet man für dieses Modell den quasistationären Zustand, so erhält man für die in [5] verwendeten Parameter die in Abbildung 7.1 gezeigte Verteilung. Dargestellt ist die Besetzung der Floquet-Zustände aufgetragen über ihrer mittleren Energie. Wie sich herausstellt, zerfällt die Verteilung in zwei Bereiche: ein von den Autoren als „Plateau“ bezeichneter Bereich bei tiefliegenden Zuständen, mit praktisch konstanter Besetzung, und ein Bereich exponentieller Abnahme für höherliegende Zustände. Die Lage der Grenze zwischen diesen beiden Bereichen ist dabei praktisch nicht von der Temperatur des Bades abhängig, und wandert mit zunehmender Treiberstärke zu höheren mittleren Energien. Die Verteilung oberhalb der Plateau-Grenze entspricht gerade der einer kanonischen Verteilung mit der Temperatur des Bades.

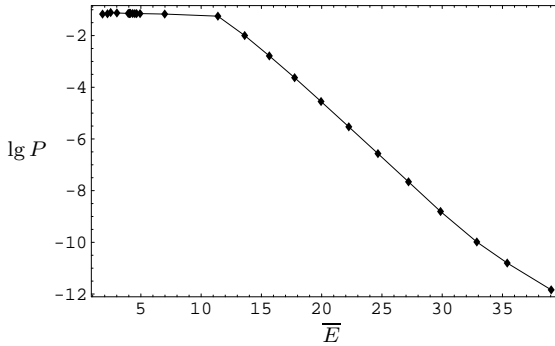


Abbildung 7.1: Besetzung der Floquet-Zustände über deren mittlerer Energie. Eigenrechnerische Rechnung, Parameter wie in [5]: $\alpha = 20$, $g = 4.96$; für Temperatur $\beta = 1$.

7.1. Modell

In diesem Abschnitt wird das verwendete Modell genauer beschrieben, wir folgen dabei im Wesentlichen [5], die Nomenklatur wird dabei an die hier verwendete angepasst. Im Folgenden sei $\hbar = 1$.

Breuer *et al.* führen eine Transformation des Systems (7.1) auf dimensionslose Größen durch, mit

$$\tilde{x} = x/a, \quad \tilde{t} = \omega t, \quad \tilde{V}(\tilde{x}) = \frac{V(a\tilde{x})}{ma^2\omega^2}. \quad (7.3)$$

Dies führt schließlich zum äquivalenten Problem

$$H_S(t) = -\frac{1}{2\alpha} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) + gx \sin \Omega t, \quad (7.4)$$

mit dem Potenzial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{für } |x| < 1, \\ \infty, & \text{für } |x| > 1. \end{cases} \quad (7.5)$$

Die Modellparameter ergeben sich dabei zu

$$\alpha = ma^2\omega, \quad g = \frac{a\lambda}{\omega}, \quad \Omega = 1. \quad (7.6)$$

Der Parameter α ist identisch mit dem entsprechenden Parameter in [5], die Treiberstärke wird dort anstelle von g durch den Parameter $\beta = g/\alpha$ charakterisiert.

Mit den bekannten Eigenenergien des Potenzialtopfs erhält man also für den Hamiltonoperator in der Eigenbasis $\{|j\rangle\}$ des ungetriebenen Systems

$$H_S(t) = H_0 + H_{\text{dr}}(t), \quad (7.7)$$

mit

$$H_0 = \frac{\pi^2 j^2}{8\alpha} |j\rangle\langle j|, \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (7.8)$$

$$H_{\text{dr}}(t) = gx \sin \Omega t. \quad (7.9)$$

Die Darstellung des Ortsoperators x in dieser Basis ist nach [5]

$$\langle j|x|k\rangle = \frac{4}{\pi^2} \begin{cases} 0, & \text{für } j - k \text{ gerade,} \\ \frac{1}{(j+k)^2} - \frac{1}{(j-k)^2}, & \text{für } j - k \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (7.10)$$

Die Kopplung des Systems an das Bad der Temperatur β erfolgt ebenfalls über den Ortsoperator, der Badoperator A ist also

$$A = x. \quad (7.11)$$

Der Einfachheit halber wurde in [5] ein Bad mit konstanter Zustandsdichte gewählt, mit $\xi = 0$, vgl. (1.29), so dass sich die Dämpfungsrate zu

$$\gamma(\omega) \propto \left| \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right| \quad (7.12)$$

ergibt. Wir werden zunächst dasselbe Bad-Modell verwenden, später werden wir auch noch das Verhalten für ein Bad mit $\xi = 3$ betrachten. Für die numerischen Rechnungen muss der Hamiltonian abgeschnitten werden, dies geschieht nach d Niveaus, die Fourierreihe der Floquet-Zustände wird nach q_{max} Termen abgebrochen.

Die Parameter für die folgenden Rechnungen sind

$$d = 25, \quad \alpha = 20, \quad \beta = 1, \quad \Omega = 1, \quad q_{\text{max}} = 55, \quad (7.13)$$

bei Treiberstärken g zwischen 0 und 10.

Das im vorigen Abschnitt beschriebene Verhalten der Gleichgewichts-Verteilung lässt sich plausibel machen, wenn man die Eigenschaften der Floquet-Zustände für dieses Modell etwas genauer betrachtet.

Abbildung 7.2 stellt einen Vergleich zwischen dem Spektrum des ungetriebenen Systems und dem Spektrum der mittleren Energien der Floquet-Zustände an. Der Zerfall in zwei Bereiche ist deutlich zu erkennen: im unteren Bereich

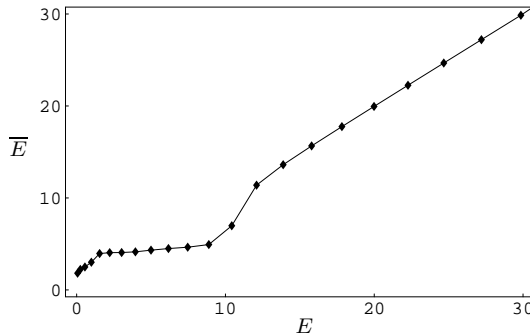


Abbildung 7.2: Vergleich des Spektrums $\{\bar{E}_i\}$ der mittleren Energien der Floquet-Zustände mit den ungetriebenen Eigenenergien $\{E_i\}$. Parameter wie in Abb. 7.1.

wirkt sich der Treiber stark auf das System aus, während der Treiber auf die Zustände oberhalb der Plateau-Grenze offenbar kaum einen Einfluss hat. Desweiteren ist in Abbildung 7.3 auf Seite 69 gezeigt, wie sich die Floquet-Zustände des getriebenen Systems aus den ungestörten Zuständen zusammensetzen. Dazu ist der über eine Treiberperiode gemittelte Überlapp $|\langle j | \mathcal{E}_\alpha(t) \rangle|^2$ mit den Eigenzuständen $|j\rangle$ des ungetriebenen Systems aufgetragen. Im Plateaubereich setzen sich die Floquet-Zustände praktisch aus allen tief liegenden Eigenzuständen zusammen, es ergibt sich eine hohe Vermischung dieser Zustände. Für zunehmende Eigenenergien werden die Zustände immer weniger durch den Treiber modifiziert, merkliche Beiträge zu den Floquet-Zuständen gibt es nur noch durch die direkt benachbarten Zustände.

7.2. Effektive Plateau-Temperatur

Wir betrachten die quasistationären Zustände dieses Modells nun genauer. Die Abbildung 7.4 auf Seite 70 zeigt Verteilungen der Besetzung der Floquet-Zustände für verschiedene Treiberstärken g , die Badtemperatur ist in allen Fällen $\beta = 1$. Aus der Abbildung kann zum Einen abgelesen werden, dass die höheren Zustände nach einer Boltzmann-Verteilung mit der vorgegebenen Badtemperatur besetzt werden, dies entspricht in der logarithmischen Auftragung einer Gerade mit entsprechender Steigung. (Bei hohen Energien treten für große Treiberstärken merkliche Abweichungen von der Boltzmann-Verteilung auf; diese Abweichungen sind ein Artefakt, das aus dem Abschneiden des Spektrums resultiert.) Zum Anderen wird deutlich, dass der Plateau-Bereich

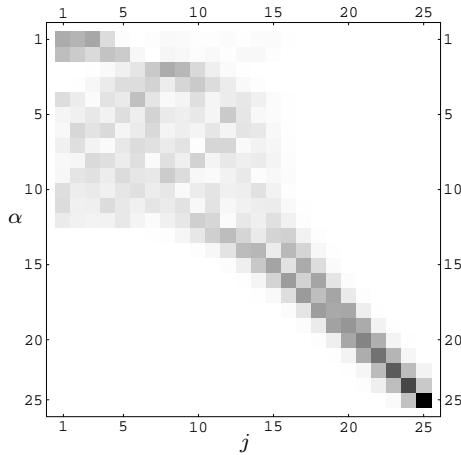


Abbildung 7.3: Gemittelter Überlapp $|\langle j | \mathcal{E}_\alpha(t) \rangle|^2$ der Floquet-Zustände (sortiert nach mittlerer Energie) mit den ungestörten Eigenzuständen des Potenzialtopfs. Parameter wie in Abb. 7.1. Dunkle Felder entsprechen großem Überlapp.

je nach Treiberstärke unterschiedlich stark ausgeprägt ist. In [5] wurde bereits berichtet, dass die Breite dieses Bereichs mit der Treiberstärke zunimmt. Es zeigt sich nun außerdem, dass es sich nicht um ein Plateau mit identischer Besetzung handelt, sondern um einen Bereich, in dem ebenfalls näherungsweise eine kanonische Verteilung vorliegt, allerdings mit einer von der Badtemperatur verschiedenen effektiven Temperatur.

Wie in Abschnitt 4.2 diskutiert, lässt sich durch Anpassen einer exponentiellen Verteilung eine effektive Temperatur β_{eff} für den Plateau-Bereich bestimmen. Die Abhängigkeit dieser effektiven Plateau-Temperatur von der Treiberstärke g ist in Abbildung 7.5 gezeigt. Für $g = 0$ erhält man natürlich die kanonische Besetzung aller Zustände. Für kleine g liegt die effektive Temperatur noch nahe bei der Badtemperatur, das „Plateau“ äußert sich nur in einem leichten Knick in der Verteilung. Für größere Treiberstärken pendelt sich der Wert schließlich auf eine effektive Temperatur nahe bei Null ein. (Auffallend ist der besonders niedrige Wert von β_{eff} bei $g \approx 5$, dies entspricht gerade den von Breuer *et al.* gewählten Parametern.)

Die bisherigen Resultate gelten für ein Bad mit konstanter Zustandsdichte, $\xi = 0$. Wir betrachten nun im Vergleich dazu noch das Bad-Modell mit $\xi = 3$, das auch für den Rest dieser Arbeit verwendet wurde. Abbildung 7.6 zeigt die Verteilung der Besetzungszahlen für verschiedene Treiberstärken, Abbil-

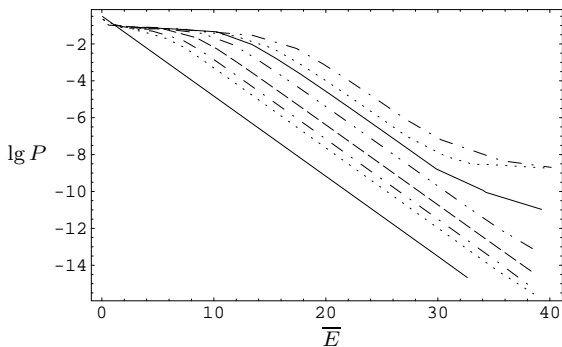


Abbildung 7.4: Besetzung der Floquet-Zustände über deren mittlerer Energie für verschiedene g ($g = 0.001, 0.5, 1, 2, 4, 6, 8, 10$).

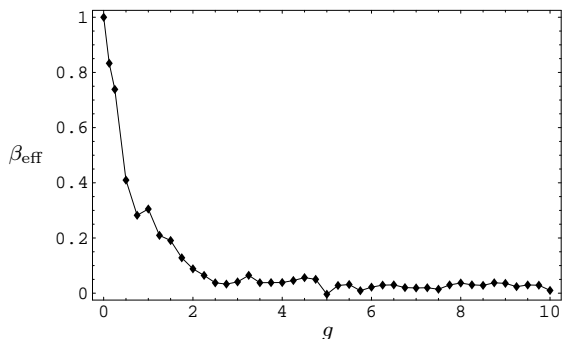


Abbildung 7.5: Abhängigkeit der effektiven Plateau-Temperatur von der Treiberstärke.

Abbildung 7.7 zeigt die Abhängigkeit der effektiven Plateau-Temperatur von der Treiberstärke. Der auffallendste Unterschied zum vorigen Modell ist, dass sich die effektive Temperatur für größere Treiberstärken auf einen Wert einpendelt, der deutlich von Null verschieden ist.

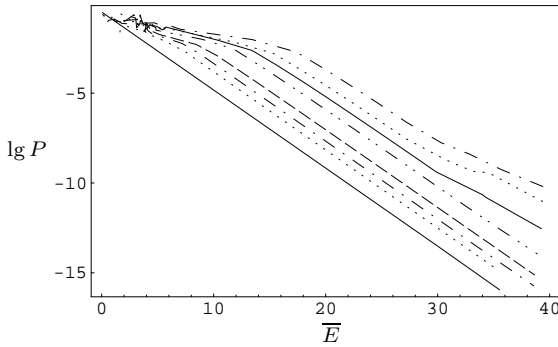


Abbildung 7.6: Besetzung der Floquet-Zustände über deren mittlerer Energie für verschiedene g ($g = 0.001, 0.5, 1, 2, 4, 6, 8, 10$), Bad-Modell mit $\xi = 3$.

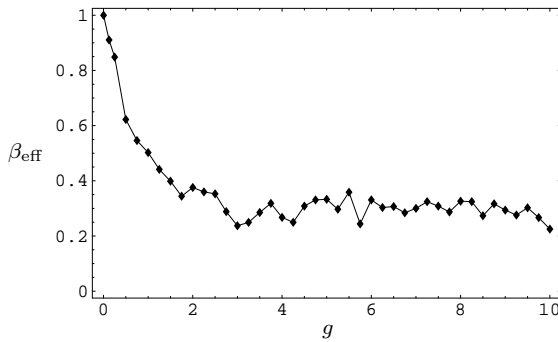


Abbildung 7.7: Abhängigkeit der effektiven Plateau-Temperatur von der Treiberstärke, Bad-Modell mit $\xi = 3$.

8. Ströme in periodisch getriebenen Systemen

Wir betrachten nun die Energiebilanz eines allgemeinen getriebenen Systems, das einer Lindblad-Mastergleichung gehorcht [26]

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[H_S, \rho] + \mathcal{D}(\rho). \quad (8.1)$$

Zunächst sollen keine weiteren Annahmen über den Hamiltonian $H_S(t)$ und den möglicherweise ebenfalls explizit zeitabhängigen Dissipator getroffen werden. Später wird dann speziell angenommen, dass Treiber und Lindblad-Operatoren periodisch sind.

Aus der Energiebilanz werden einige allgemeine Aussagen über die im System auftretenden Energieströme abgeleitet. Dabei wird insbesondere auch auf die für thermodynamische Maschinen typische Situation eingegangen, bei der sich das System zwischen zwei Bädern befindet. Anschließend soll näher auf die bei allgemeinen periodisch getriebenen Systemen auftretenden Ströme eingegangen werden, und speziell auch auf Systeme, die sich nach der Floquet-Mastergleichung verhalten.

8.1. Definition von Treiber- und Badstrom

Das getriebene System hat zwei „Kontaktstellen“, über die mit der Außenwelt Energie ausgetauscht werden kann. Möglich sind zum Einen Ströme zwischen System und Bad und zum Anderen „Ströme“ zwischen System und Treiber, also die vom Treiber am System verrichtete oder aus dem System abgezogene Arbeit. Die Definition der Ströme erfolgt über die Energiebilanz des Systems. Dazu soll zunächst der Erwartungswert eines beliebigen Operators \hat{X} und dessen Zeitableitung betrachtet werden

$$X := \text{Tr}(\hat{X}\rho), \quad \dot{X} = \frac{d}{dt}\text{Tr}(\hat{X}\rho). \quad (8.2)$$

Für die System-Zeitentwicklung nach der Mastergleichung (8.1) folgt

$$\dot{X} = \text{Tr}\left(\frac{d\hat{X}}{dt}\rho\right) + \text{Tr}(-i[H_S(t), \rho]X) + \text{Tr}(X\mathcal{D}(\rho)). \quad (8.3)$$

Aus der zyklischen Invarianz der Spur, $\text{Tr}([H_S(t), \rho]X) = \text{Tr}([X, H_S(t)]\rho)$, erhält man speziell für den Energie-Erwartungswert E_S

$$\dot{E}_S = \dot{E}_S^{\text{dr}} + \dot{E}_S^{\text{diss}}, \quad (8.4)$$

mit

$$\dot{E}_S^{\text{dr}} := \text{Tr}\left(\frac{dH_S}{dt}\rho\right), \quad \dot{E}_S^{\text{diss}} := \text{Tr}(H_S\mathcal{D}(\rho)). \quad (8.5)$$

Die Energieänderung des getriebenen Systems ist also gegeben durch einen Treiber-Anteil \dot{E}_S^{dr} und einen Bad-Anteil \dot{E}_S^{diss} („Treiberstrom“ und „Badstrom“). Aus diesen ergibt sich direkt die während eines Zyklus vom Treiber verrichtete Arbeit bzw. die aus dem Bad aufgenommene Wärme,

$$\Delta W = \int_0^\tau \dot{E}_S^{\text{dr}} dt, \quad \Delta Q = \int_0^\tau \dot{E}_S^{\text{diss}} dt. \quad (8.6)$$

8.2. Strom bei zwei Bädern

Bei Modellen zur Wärmeleitung oder bei thermodynamischen Maschinen liegt typischerweise eine Situation gemäß Abbildung 8.1 vor: ein zunächst nicht näher spezifiziertes System befindet sich im Kontakt mit zwei Bädern unterschiedlicher Temperatur. Diese werden durch zwei voneinander unabhängige

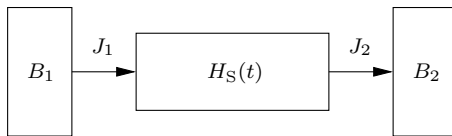


Abbildung 8.1: System zwischen zwei Bädern.

Dissipatoren beschrieben, so dass \mathcal{D} durch zwei Anteile ausgedrückt werden kann

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_1 + \mathcal{D}_2. \quad (8.7)$$

Der dissipative Anteil der Energieänderung des Systems, der Badstrom, kann nun ebenfalls in zwei Beiträge aufgeteilt werden

$$\dot{E}_S^{\text{diss}} = J_1 - J_2, \quad (8.8)$$

mit

$$J_1 := \text{Tr}(H_S \mathcal{D}_1), \quad J_2 := -\text{Tr}(H_S \mathcal{D}_2). \quad (8.9)$$

Die Definition ist gemäß der in der Abbildung vorgegebenen Pfeilrichtungen gewählt. Ein positiver Strom J_1 soll also vom Bad 1 in das System hinein fließen, während ein positiver Strom J_2 aus dem System heraus in das zweite Bad fließt.

Für das Verhältnis der beiden Badströme folgt im ungetriebenen Fall eine besonders einfache Beziehung. Da dann $\dot{E}_S^{\text{dr}} = 0$ ist, gilt wegen (8.4) im stationären Zustand

$$J_1 = J_2, \quad \text{für } H_S = \text{konst}, \quad (8.10)$$

auch wenn es sich dabei um einen Nichtgleichgewichts-Zustand mit $\mathcal{D} \neq 0$ handelt. Da sich die Systemenergie nicht ändern darf, müssen hinein- und herausfließender Strom gleich groß sein.

8.3. Ströme für einen allgemeinen quasistationären Zustand

Für ein periodisch getriebenes System können speziell für die Mittelwerte der Ströme über eine Treiberperiode weitere Beziehungen abgeleitet werden. Es wird dazu angenommen, dass sich nach einer anfänglichen Relaxationsphase ein quasistationärer Zustand der Form

$$\rho^{\text{qs}}(t + \tau) = \rho^{\text{qs}}(t) \quad (8.11)$$

einstellt. Diese Eigenschaft ist für das Floquet-Gleichgewicht immer erfüllt, sie gilt aber auch allgemein bei Systemen, die als Modell für eine periodisch arbeitende Maschine fungieren.

Wir betrachten nun die Mittelwerte der Ströme über eine Treiber-Periode. Da sowohl Hamiltonoperator H_S als auch Dichteoperator ρ^{qs} periodisch sind, ist auch E_S periodisch, die mittlere Energieänderung muss also verschwinden, $\langle \dot{E}_S \rangle_\tau = 0$. Aus der Energiebilanz (8.4) folgt daher die Beziehung

$$\langle \dot{E}_S^{\text{dr}} \rangle_\tau = -\langle \dot{E}_S^{\text{diss}} \rangle_\tau = -\langle J_1 - J_2 \rangle_\tau. \quad (8.12)$$

Diese Gleichung besagt einfach, dass im quasistationären Zustand die „Netto-Energie“, die vom Treiber verrichtet wird, „gepuffert“ durch das System vollständig in das Bad fließt.

8.4. Ströme im Floquet-Gleichgewicht

Der Floquet-Gleichgewichtszustand weist neben der Quasistationarität weitere Eigenschaften auf: so gilt hier $\mathcal{D} = 0$. Daraus folgt, dass der Badstrom zu jedem Zeitpunkt verschwinden muss

$$\dot{E}_S^{\text{diss}} \equiv 0 \quad \Rightarrow \quad \dot{E}_S = \dot{E}_S^{\text{dr}}. \quad (8.13)$$

Energie kann also ausschließlich durch den Treiber zugeführt werden. Für den Mittelwert über eine Treiberperiode folgt dann aus (8.12)

$$\langle \dot{E}_S^{\text{dr}} \rangle_\tau = 0. \quad (8.14)$$

Der Treiber kann also im Mittel weder Arbeit am System verrichten, noch Arbeit aus dem System ziehen. Das bedeutet insbesondere auch, dass eine funktionierende thermodynamische Maschine nicht durch dieses Modell beschrieben werden kann. Anschaulich lässt sich dies durch die in das Modell einfließende Trennung der Zeitskalen erklären: Arbeit lässt sich nur effektiv aus den Bädern ziehen, wenn Treiberdynamik und Relaxation auf einer vergleichbaren Zeitskala ablaufen. Dies widerspricht aber den Voraussetzungen (3.20) der Floquet-Mastergleichung.

Für ein Modell mit zwei Bädern folgt für das Floquet-Gleichgewicht außerdem, dass wegen $\mathcal{D}_2 = -\mathcal{D}_1$ die beiden Badströme zu jeder Zeit übereinstimmen müssen

$$J_1(t) = J_2(t). \quad (8.15)$$

Ein Wärmestrom zwischen den zwei Bädern fließt also vollständig und „ungebremst“ von Bad 1 durch das System zu Bad 2.

In Kapitel 9 wird dieser Wärmestrom durch das System näher betrachtet. Wir definieren dazu den mittleren Wärmestrom

$$J := \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{1}{t'} \int_0^{t'} J_1(t) dt = \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{1}{t'} \int_0^{t'} \text{Tr}(H_S \mathcal{D}_1) dt. \quad (8.16)$$

Während die Differenz der Ströme, der Netto-Strom (8.8), periodisch mit τ ist, trifft dies im Allgemeinen auf die Teilströme nicht zu. Daher muss hier der Langzeit-Mittelwert gebildet werden.

8.5. Beispiel: Qubit mit σ_z -Treiber

Als Beispiel-Modell für den Zusammenhang von Bad- und Treiberstrom betrachten wir wieder ein einzelnes, an ein Bad gekoppeltes Qubit. Um das in Abschnitt 8.3 diskutierte allgemeine Verhalten beobachten zu können, wird zunächst die vereinfachte Mastergleichung aus Abschnitt 5.1.3 verwendet, auf den Spezialfall der Floquet-Mastergleichung wird dann am Ende dieses Abschnitts kurz eingegangen.

Wir betrachten den speziellen Fall des σ_z -Treibers, mit dem Hamiltonoperator (2.23)

$$H_S = \hbar \left\{ \frac{\nu}{2} + g \sin \Omega t \right\} \sigma_z. \quad (8.17)$$

Die Zeitentwicklung des Treiber- und Badstroms sind in Abbildung 8.2 für einige Treiberperioden gezeigt. Nach einer anfänglichen Relaxationsphase stellt

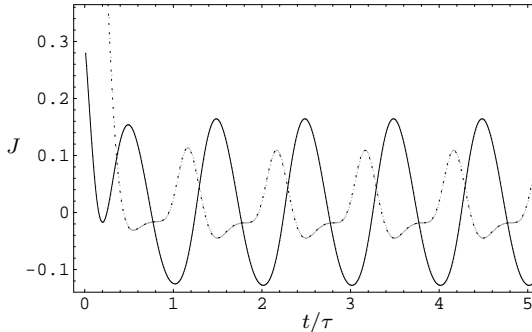


Abbildung 8.2: Treiberstrom (—) und negativer Badstrom (---) für σ_z -Treiber ($\nu = 1$, $\Omega = 1.5$, $g = 0.2$, $\gamma_0 = 0.5$). mittlere Ströme: $\langle \dot{E}_S^{\text{dr}} \rangle_\tau = -\langle \dot{E}_S^{\text{diss}} \rangle_\tau = 0.008882$.

sich im System ein quasistationärer Zustand ein. Die Mittelwerte der Ströme erfüllen für diesen Zustand Gleichung (8.12)

$$\langle \dot{E}_S^{\text{dr}} \rangle_\tau = -\langle \dot{E}_S^{\text{diss}} \rangle_\tau. \quad (8.18)$$

Da bei diesem speziellen Treiber nur die Energieeigenwerte modifiziert werden, die Eigenbasis jedoch konstant bleibt, ergibt sich ein quasistationärer Zustand, der zu jedem Zeitpunkt diagonal in der Eigenbasis ist. Damit befindet sich das Zwei-Niveau-System jederzeit in einem echten kanonischen Zustand, dessen Temperatur sich aus Gleichung (D.3) ergibt.

In [47] wurde gezeigt, dass unter diesen Voraussetzungen für ein System mit parameterabhängigem Energiespektrum die Gibbs'sche Fundamentalform gilt,

$$dE_S = TdS + \delta W, \quad (8.19)$$

mit der in Gleichung (C.4) definierten von-Neumann-Entropie S des Systems. Danach ergibt sich eine Änderung der inneren Energie des Systems aus zwei Beiträgen, der Beitrag aus der Entropie-Änderung dS resultiert dabei aus einer Änderung der Besetzungszahlen der Eigenzustände. Die am System verrichtete Arbeit δW ergibt sich aus der Änderung des Spektrums bzw. des Hamiltonoperators, dies ist gerade die durch den Treiber verursachte Änderung der Systemenergie, \dot{E}_S^{dr} .

Für die während eines Zyklus vom Treiber am System verrichtete Arbeit gilt damit

$$\Delta W = - \oint TdS. \quad (8.20)$$

Sie ergibt sich also aus der im T-S-Diagramm eingeschlossenen Fläche. Das T-S-Diagramm für das mit den Parametern der Abbildung 8.2 getriebene Qubit ist in Abbildung 8.3 gezeigt. Tatsächlich stimmt wie zu erwarten die aus Gleichung (8.20) erhaltene Arbeit bzw. Leistung mit dem erhaltenen Treiberstrom überein.

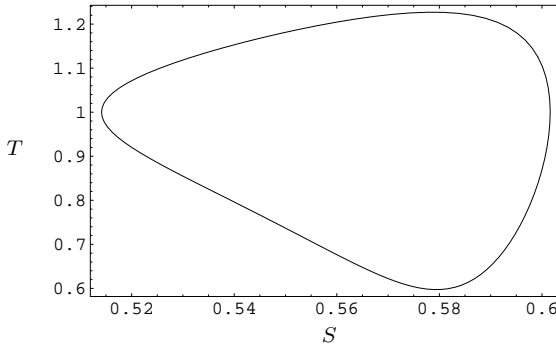


Abbildung 8.3: T-S-Diagramm für das Modell der Abb. 8.2 (Umlaufsinn: gegen den Uhrzeigersinn). Fläche $\Delta W = 0.0371804$, Leistung $\Delta W/\tau = 0.008876$.

Für allgemeinere Treiber-Modelle, wie z. B. einen σ_x -Treiber, ist die Situation etwas komplizierter. Da dann der Systemzustand in der Regel nicht diagonal in der momentanen Eigenbasis ist, ist die Fundamentalform (8.19) nicht

mehr anwendbar. Es ist dann nicht mehr möglich, ein aussagekräftiges T-S-Diagramm aufzustellen.

Wir kommen nun noch einmal kurz auf die Floquet-Mastergleichung zu sprechen. Abbildung 8.4 zeigt für das gleiche Modell (8.17) das resultierende Verhalten des Treiber- und Badstroms. (Aus der Abbildung ist ersichtlich, dass für die gewählten Parameter die Relaxationszeit von derselben Größenordnung wie die Treiberfrequenz ist. Die Floquet-Mastergleichung ist nach (3.20) für diesen Parameterbereich eigentlich nicht gültig. Hier sollen jedoch nur die prinzipiellen Unterschiede zur vorigen Mastergleichung veranschaulicht werden, und der quasistationäre Zustand selbst hängt von der Badkopplungsstärke nicht ab.) Der Badstrom verschwindet hier nach einer Relaxationsphase,

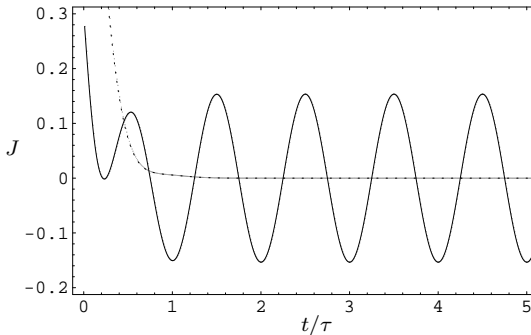


Abbildung 8.4: Treiberstrom (—) und negativer Badstrom (---) für σ_z -Treiber (Floquet-Gleichgewicht), Parameter wie in Abb. 8.2. Mittlerer Treiberstrom: $\langle \dot{E}_S^{\text{dr}} \rangle_\tau = 0$.

während sich der Treiberstrom auf ein periodisches Verhalten mit Mittelwert Null einpendelt, in Übereinstimmung mit Gleichung (8.14), nach der in diesem Fall der Treiber im Mittel keine Arbeit verrichtet. Da sich wegen des fehlenden Energieaustausches mit dem Bad, bzw. wegen $\mathcal{D} = 0$, die Entropie des Systems nicht ändert, erhält man für die Floquet-Mastergleichung entsprechend auch immer ein T-S-Diagramm mit verschwindender Fläche. Im Gegensatz zu den Ergebnissen gemäß Abbildung 8.3 dissipiert hier der Treiber keine Wärme ins Bad.

9. Wärmestrom durch eine getriebene Spinkette

Wir betrachten nun eine typische Nichtgleichgewichts-Situation: eine Spinkette zwischen zwei Bädern unterschiedlicher Temperatur. In einem makroskopischen Körper zwischen zwei Bädern tritt für diese Situation ein Wärmestrom auf, der dem Fourierschen Gesetz der Wärmeleitung folgt. Auch für verschiedene quantenmechanische Systeme wurde die Gültigkeit der Wärmeleitungsgleichung bestätigt [29, 30, 38].

Es stellt sich daher die interessante Frage, wie der durch das System fließende Strom von einem auf die Kette wirkenden Treiber beeinflusst wird. Wir betrachten dazu für den Floquet-Gleichgewichtszustand des getriebenen Systems die Abhängigkeit des mittleren Badstroms J von verschiedenen Treiberparametern und Badtemperaturen. Es stellt sich heraus, dass sich der Strom auch

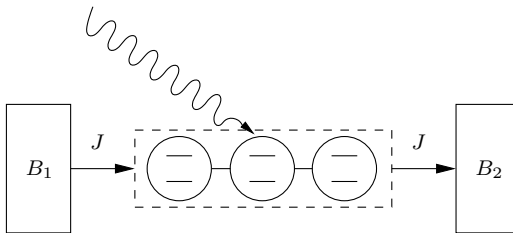


Abbildung 9.1: Wärmeleitung durch getriebene Spinkette.

für das getriebene System in sehr guter Übereinstimmung mit dem Fourierschen Gesetz der Wärmeleitung befindet. Gleichzeitig zeigt das Modell aber auch Grenzen der verwendeten Mastergleichung auf.

Ein ähnliches Modell wird auch als eine mögliche Realisierung einer thermodynamischen Maschine diskutiert [21].

9.1. Modell

Wir betrachten speziell eine Spinkette aus drei Qubits identischer Aufspaltung ν , siehe Abbildung 9.1. Diese sollen über die Heisenberg-Wechselwirkung schwach miteinander gekoppelt sein, der mittlere Spin wird durch einen σ_x -Treiber getrieben. Der Hamiltonian lautet also

$$H_S(t) = \frac{\nu}{2} \sum_{j=1}^3 \sigma_z^{(j)} + \mu \sum_{j=1}^2 \sigma^{(j)} \cdot \sigma^{(j+1)} + g\sigma_x^{(2)} \sin \Omega t. \quad (9.1)$$

Die Systemparameter seien $\nu = 1$ und $\mu = 0.01$, für die Treiberparameter g und Ω werden verschiedene Werte verwendet werden.

An die beiden Randspins sollen zwei Bäder mit den jeweiligen Temperaturen β_1 und β_2 angekoppelt sein. Die verwendeten Badoperatoren sind

$$A_1 = \sigma_+^{(1)} + \sigma_-^{(1)}, \quad A_2 = \sigma_+^{(3)} + \sigma_-^{(3)}, \quad \text{und } \xi = 3. \quad (9.2)$$

Die Badankopplung γ_0 hat keinen Einfluss auf den Gleichgewichtszustand, für die numerischen Rechnungen wurde $\gamma_0 = 0.1$ gewählt.

Das Modell entspricht der in Abschnitt 8.2 besprochenen Struktur. Der mittlere Strom von Bad 1 in Bad 2 folgt also im Floquet-Gleichgewicht aus Gleichung (8.16) zu

$$J = \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{1}{t'} \int_0^{t'} \text{Tr}(H_S \mathcal{D}_1) dt. \quad (9.3)$$

Für die numerischen Rechnungen wurde $t' = 100\tau$ verwendet. Das linke Bad wird im Folgenden immer wärmer gewählt als das rechte ($\beta_1 \leq \beta_2$), bei normaler Wärmeleitung erwartet man daher einen positiven Strom von links nach rechts.

9.2. Zur Beschreibbarkeit von Nichtgleichgewichts-Zuständen

Bevor im nächsten Abschnitt der Badstrom betrachtet wird, soll auf eine Eigenart der Modellierung durch die hier angewandte Mastergleichung hingewiesen werden: obwohl das System an zwei Bäder unterschiedlicher Temperatur gekoppelt ist, kann sich kein echter Nichtgleichgewichts-Zustand einstellen.

Um dies zu verdeutlichen, soll zunächst der Begriff des Nichtgleichgewichts am ungetriebenen System präzisiert werden. Ausgangspunkt ist die allgemeine

Mastergleichung (8.1). Für den stationären Zustand gilt

$$\frac{d}{dt}\rho^{\text{st}} = 0, \quad \frac{i}{\hbar} [H_S, \rho^{\text{st}}] = \mathcal{D}(\rho^{\text{st}}). \quad (9.4)$$

Im thermischen Gleichgewicht stellt sich ein statistisches Gemisch von Energieeigenzuständen ein, der Dichteoperator vertauscht somit mit dem Systemhamiltonian, und der Dissipator verschwindet, $\mathcal{D}(\rho^{\text{st}}) = 0$. Wenn das System den Gleichgewichtszustand erreicht hat, verhält es sich daher so, als ob das Bad nicht vorhanden wäre.

Anders für eine Nichtgleichgewichts-Situation, wie sie z. B. beim Ankoppeln zweier Bäder unterschiedlicher Temperatur auftreten kann. Kennzeichnend für diesen Fall ist ein stationärer Zustand, der nicht mit dem Hamiltonoperator vertauscht, also $[H_S, \rho^{\text{st}}] \neq 0$. Wenn das System dann zu irgendeinem Zeitpunkt vom Bad abgekoppelt wird, so verlässt es den stationären Zustand und folgt seiner ungestörten Eigendynamik. Im Nichtgleichgewicht muss der Dissipator also nach (9.4) die Bedingung

$$\mathcal{D}(\rho^{\text{st}}) \neq 0 \quad (9.5)$$

erfüllen, das System wird in seiner Dynamik durch das Bad gehemmt. Anders als im Gleichgewicht hängt damit der erreichte Nichtgleichgewichts-Zustand auch von der Stärke der System-Bad-Kopplung ab.

Das getriebene System im Floquet-Gleichgewichtszustand ρ^{qs} nimmt nun eine Art Zwischenstellung zwischen diesen Situationen ein. Hier gilt

$$\frac{d}{dt}\rho^{\text{qs}} = -\frac{i}{\hbar} [H_S(t), \rho^{\text{qs}}], \quad \mathcal{D}(\rho^{\text{qs}}) = 0. \quad (9.6)$$

Zwar vertauschen Dichteoperator und Hamiltonian nicht, dennoch verschwindet der Dissipator. Sobald also das System den quasistationären Zustand erreicht hat, wird es nicht mehr durch das Bad beeinflusst, sondern entwickelt sich nur noch nach der getriebenen Eigendynamik. Eine Nichtgleichgewichts-Situation nach (9.5), bei der das System in irgendeiner Form durch das Bad gehemmt wird, lässt sich also im Rahmen dieser Modellierung nicht beschreiben.

Dies liegt jedoch nicht an der Darstellung in den Floquet-Zuständen, sondern an den Näherungen, die in die zugrundeliegende Born-Markow-Mastergleichung eingehen, und lässt sich somit auch schon am ungetriebenen System nachweisen. Dies soll an der oben vorgestellten homogenen Spinkette für den ungetriebenen Fall vorgeführt werden. Man erhält für dieses System einen stationären Zustand, der diagonal in der Eigenbasis ist. In Abbildung 9.2 sind die Besetzungszahlen der Eigenzustände aufgetragen. Wie zu sehen ist, verhält

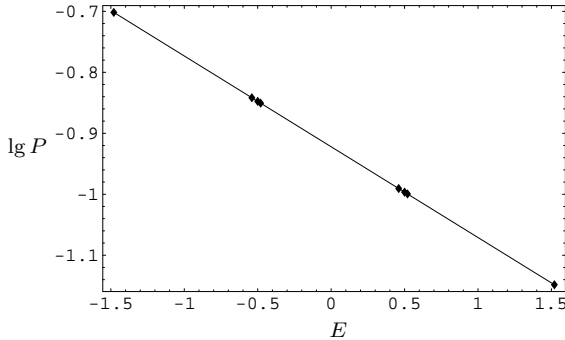


Abbildung 9.2: Besetzungszahlen für die ungetriebene Spinkette mit $\beta_1 = 0.3$, $\beta_2 = 0.4$. Die Verteilung entspricht einer Temperatur von $\beta_{\text{eff}} = 0.3428$.

sich das System so, als ob es an *ein* Bad einer mittleren Temperatur angekoppelt wäre, mit einer entsprechenden kanonischen Verteilung. Auch die lokalen Temperaturen der drei Spins zeigen kein Anzeichen eines Nichtgleichgewichts, für das man einen Temperaturgradienten erwarten würde [29]. Diese ergeben sich nach (D.3) aus den Besetzungszahlen der reduzierten Dichteoperatoren und entsprechen für schwache Kopplung in guter Näherung der Temperatur des Gesamtsystems, siehe Abbildung 9.3. Dies liegt daran, dass außer dem

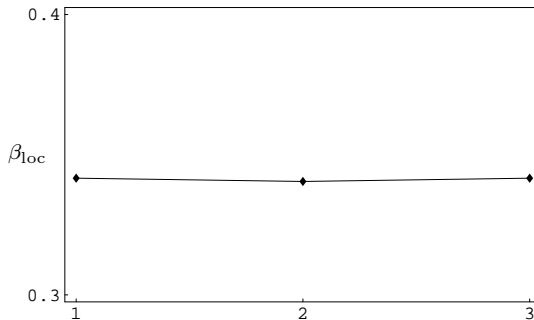


Abbildung 9.3: Lokale Temperaturen der 3 Spins. Parameter wie in Abb. 9.2 (Randspins: $\beta_{\text{loc}} = 0.3416$, Binnen-Spin: $\beta_{\text{loc}} = 0.3405$).

Grundzustand $|000\rangle$ vor allem Zustände mit einer Anregung besetzt werden. (Die Randspins sind geringfügig kälter, da im niedrigsten angeregten Zustand der Kette der mittlere Spin leicht bevorzugt ist.) Mit wachsender interner

Wechselwirkung nehmen die lokalen Temperaturen der einzelnen Spins bei gleich bleibender Badtemperatur hingegen zu. Für große Kopplungen ist bereits der Grundzustand in hohem Maße verschränkt, mit einer ausgeglichenen Zahl von Spins in angeregten und nicht angeregten Zuständen (dies ist eine bekannte Eigenschaft der antiferromagnetischen Heisenberg-Kette [32]), die reduzierten Dichtematrizen der einzelnen Spins liegen daher nahe beim vollständig gemischten Zustand.

Auch für die anderen in [29] betrachteten Typen interner Wechselwirkung (Förster- und zufällige Wechselwirkung) erhält man aus der hier verwendeten (ungetriebenen) Mastergleichung kein Nichtgleichgewichts-Verhalten. Grund dafür ist letztendlich die säkulare Näherung: sie führt zu unabhängigen Dämpfungschanälen zwischen den Eigenzuständen. Diese sind für die homogene Spinkette vollständig delokalisiert, daher lassen sich lokale Effekte wie z. B. ein Temperaturgradient nicht beschreiben.

Ähnliches gilt selbst für inhomogene Systeme: hier können zwar lokale Eigenschaften auftreten, nicht aber ein echtes Nichtgleichgewicht. In Abbildung 9.4 sind dazu zwei Beispiele für Modelle mit unterschiedlichen Ener-

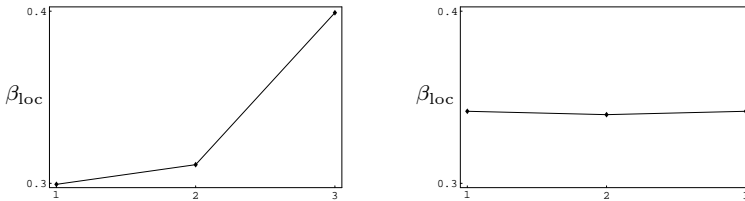


Abbildung 9.4: Lokale Temperaturen für inhomogene Spinketten.

Links: $\nu_1 = 0.8$, $\nu_2 = 0.6$, $\nu_3 = 1$, Rechts: $\nu_1 = 1$, $\nu_2 = 0.8$, $\nu_3 = 1$.
Badtemperaturen ebenfalls $\beta_1 = 0.3$, $\beta_2 = 0.4$.

gieaufspaltungen in der Kette gezeigt. Bei dem System mit drei verschiedenen Spins stellt sich tatsächlich ein Temperaturgradient ein, siehe den linken Teil der Abbildung (ein Vertauschen der Badtemperaturen resultiert im entsprechend umgekehrten Gradienten). Das strukturell symmetrische Modell kann jedoch keinen globalen Temperaturgradienten liefern, da die beiden Randspins in den Eigenzuständen gleichberechtigt auftreten, und damit bei der verwendeten Mastergleichung dieselbe Temperatur einnehmen müssen. Für beide Fälle erhält man zwar eine Besetzung, die von der Boltzmann-Verteilung abweicht, die stationären Zustände sind jedoch diagonal in der Eigenbasis, eine Dynamik würde also nach dem Abkoppeln der Bäder nicht einsetzen. Die Mastergleichung kann also auch bei inhomogenen Systemen nach (9.5) keine echten Nichtgleichgewichts-Eigenschaften beschreiben.

9.3. Fouriersches Gesetz der Wärmeleitung

Wir betrachten nun den durch die Spinkette fließenden Strom J in Abhängigkeit von den angelegten Badtemperaturen. Wie unten gezeigt wird, lässt er sich durch das Fouriersche Gesetz der Wärmeleitung beschreiben, das einen linearen Zusammenhang zwischen dem von Punkt 1 nach Punkt 2 fließenden Wärmestrom J und der angelegten (kleinen) Temperaturdifferenz $\Delta T = T_2 - T_1$ herstellt [16]

$$J = -\kappa \Delta T. \quad (9.7)$$

Die Wärmeleitfähigkeit κ ist dabei positiv für eine normale Wärmeleitung mit einem Strom vom wärmeren zum kälteren System.

Wir wählen hier eine Beschreibung über die inverse Temperatur β . Die beiden Bäder sollen die unterschiedlichen Temperaturen β_1 und β_2 haben, daraus folgen die Temperaturdifferenz und die mittlere Temperatur zu

$$\Delta\beta := \beta_2 - \beta_1, \quad \beta := (\beta_1 + \beta_2)/2. \quad (9.8)$$

Für kleine Temperaturdifferenzen $\Delta\beta \ll \beta$ folgt dann für den Zusammenhang mit der Temperatur T

$$\Delta T \approx -\Delta\beta/\beta^2, \quad \bar{T} \approx 1/\beta. \quad (9.9)$$

Die Wärmeleitungsgleichung lautet dann ausgedrückt in der inversen Temperatur

$$J = \kappa_\beta \Delta\beta, \quad \text{wobei } \kappa_\beta := \kappa/\beta^2. \quad (9.10)$$

Für das betrachtete Modell zeigt Abbildung 9.5 die Abhängigkeit des Stromes von der Temperaturdifferenz für verschiedene Treiberparameter. Die lineare Abhängigkeit (9.10) ist sehr gut erfüllt, nicht nur für das ungetriebene System mit $g = 0$, sondern auch für das getriebene.

Wie aus Abschnitt 9.2 deutlich wird, handelt es sich hier nicht um eine lokal definierte Wärmeleitfähigkeit, da bei der verwendeten Modellierung keine lokalen Nichtgleichgewichts-Eigenschaften auftreten können, wie etwa ein Temperaturgradient. Das hier bestimmte κ beschreibt nur die globale Wärmeleitfähigkeit der Spinkette als Ganzes.

9.4. Parameterabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit

Die Wärmeleitfähigkeit κ hängt von verschiedenen Parametern ab. Beim getriebenen System kommt dabei zu der auch schon im ungetriebenen Fall vor-

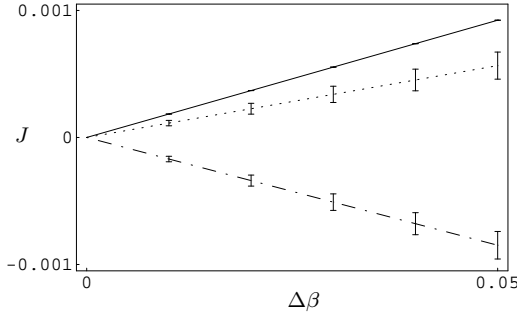


Abbildung 9.5: $J(\Delta\beta)$ für verschiedene Treiberstärken g : $g = 0$ (—), $g = 0.2$ (⋯) und $g = 0.4$ (-·-). Weitere Parameter: $\Omega = 0.8$ und $\beta = 1$.

handenen Temperaturabhängigkeit die Abhängigkeit von den Treiberparametern.

Wir betrachten zunächst die Temperaturabhängigkeit $\kappa(\beta)$ für das System ohne Treiber. Dazu werden zu jeder mittleren Badtemperatur für vier unterschiedliche Temperaturdifferenzen zwischen $\Delta\beta = 0$ und 0.03 der Gleichgewichtszustand und der dazugehörige Dissipator $\mathcal{D}_1(\rho^{\text{st}})$ berechnet, und damit der Strom

$$J = \text{Tr}(H_S \mathcal{D}_1). \tag{9.11}$$

Die Mittelung entfällt für diesen Fall. Aus Gleichung (9.10) erhält man damit durch lineare Regression jeweils die Wärmeleitfähigkeit. In Abbildung 9.6 ist κ als Funktion der mittleren Badtemperatur β aufgetragen. Für kleine β wächst die Wärmeleitfähigkeit linear mit der inversen Temperatur, $\kappa \propto \beta$.

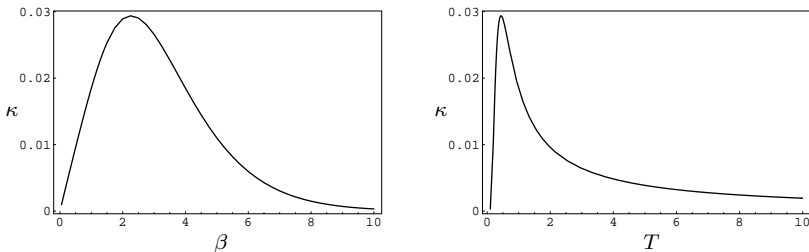


Abbildung 9.6: $\kappa(\beta)$ und $\kappa(T)$ für $g = 0$, Wertebereich für β, T von 0.1 bis 10 .

Dies entspricht einem $1/T$ -Verhalten für große Temperaturen

$$\kappa \propto \frac{1}{T}, \quad \text{für } T \gg 1. \quad (9.12)$$

Dieses prinzipielle Verhalten befindet sich in guter Übereinstimmung mit der Peierls-Boltzmann-Theorie der Wärmeleitung in Isolatoren, die ebenfalls ein $1/T$ -Gesetz voraussagt [35]. Angesichts der starken Verschiedenheit der zugrundeliegenden Modelle ist dies durchaus ein überraschendes Ergebnis.

Wir betrachten nun die Wärmeleitfähigkeit für das getriebene System. Die Resultate für zwei verschiedene Treiberstärken sind in Abbildung 9.7 gezeigt. Wie sich herausstellt, zeigt die Wärmeleitfähigkeit beim getriebenen System im Wesentlichen die gleiche funktionale Abhängigkeit von der Temperatur wie im ungetriebenen Fall. Der Einfluss des Treibers äußert sich vor allem in der absoluten Größe (dies wird auch bereits aus Abbildung 9.5 deutlich). Das System wirkt also in gewisser Weise als steuerbarer Wärmewiderstand. Ein auffallender Unterschied zum ungetriebenen System ist jedoch, dass für

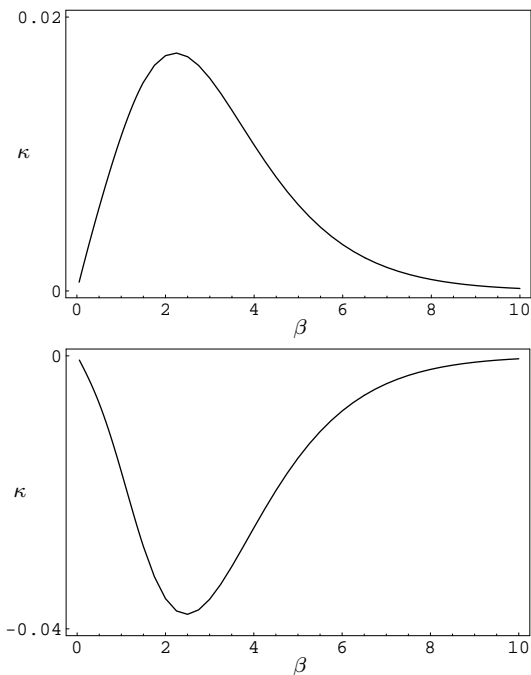


Abbildung 9.7: $\kappa(\beta)$ für $g = 0.2$ (oben) und $g = 0.4$ (unten), $\Omega = 0.8$.

gewisse Parameter auch eine negative Wärmeleitfähigkeit auftreten kann: dies entspricht einem anomalen Wärmestrom vom kälteren zum wärmeren Bad, die getriebene Spinkette würde in diesem Fall also wie eine Wärmepumpe wirken.

9.5. Diskussion

Das Resultat, dass die getriebene Spinkette unter bestimmten Bedingungen anscheinend als Wärmepumpe wirkt, stellt ein Problem dar. Zwar gibt es weitere Hinweise darauf, dass ähnlich aufgebaute Systeme in der Tat als Wärmepumpe wirken können [21], im Rahmen der hier verwendeten Beschreibung führt dieses Verhalten aber zu einem Widerspruch. Wie in Abschnitt 8.4 dargestellt wurde, gilt für das Floquet-Gleichgewicht ganz allgemein, dass der Treiber über eine Periode gemittelt keine Arbeit am System verrichtet. Eine Wärmepumpe ohne Arbeitsaufnahme widerspricht jedoch den Gesetzen der Thermodynamik. Wir haben jedoch auch festgestellt, dass die verwendete Mastergleichung wesentliche Eigenschaften eines Nichtgleichgewichts prinzipiell nicht modellieren kann, siehe Abschnitt 9.2. Es liegt also die Schlussfolgerung nahe, dass es sich bei der gefundenen Funktion als Wärmepumpe um ein Artefakt der unzureichenden Modellierung handelt.

Andererseits erscheinen einige Aspekte der Vorhersagen sehr plausibel, wie die Gültigkeit des Fourierschen Gesetzes (auf globaler Ebene) und die Form der Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit. Wir glauben, dass diese Resultate auch durch andere Methoden zur Beschreibung offener Systeme bestätigt werden könnten. Dabei würde die Kombination mit der Floquet-Darstellung sicherlich auch dort zu weiteren Einblicken führen.

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wird das Verhalten von dissipativen Quantensystemen betrachtet, die einem periodischen semiklassischen Treiber unterliegen. Der Einfluss der Umgebung wird dabei durch eine Born-Markowsche Mastergleichung beschrieben, die in einer dem periodischen System angepassten Basis, der Floquet-Basis, formuliert wird. Das Interesse liegt dabei vor allem auf Modellsystemen, die auch im Zusammenhang der Quanteninformationsverarbeitung betrachtet werden, modular aufgebaute Netzwerke bzw. Ketten von Qubits. An diesen Systemen können auch Phänomene der Thermodynamik demonstriert werden, wie Thermalisierung, Wärmeleitung oder das Konzept der thermodynamischen Maschine.

Die Behandlung explizit zeitabhängiger Quantensysteme und deren Zeitentwicklung ist in der Regel mit einem hohen Aufwand verbunden. Nur in den wenigsten Fällen lassen sie sich geschlossen lösen. Wenn man sich nicht auf Systeme mit schwachen Treibern und störungstheoretische Methoden beschränken will, bieten für periodische Systeme die Floquet-Zustände eine vorteilhafte Beschreibung. Diese ähneln in vielerlei Hinsicht den Eigenzuständen des zeitunabhängigen Systems, und bilden sozusagen eine Eigenbasis für das gekoppelte System-Treiber-Modell.

Auch die Beschreibung der dissipativen Dynamik profitiert von dieser Darstellung. Unter üblichen Näherungen (Born-Markow, Säkularnäherung) erhält man in dieser Basis eine Mastergleichung für den Dichteoperator, die nicht mehr explizit von der Zeit abhängt. Sie beschreibt ein Verhalten, bei dem das System in ein statistisches Gemisch der Floquet-Zustände relaxiert. Im Schrödinger-Bild ist dieser Zustand „quasistationär“: zeitabhängig mit derselben Periode wie der Treiber. Eine weitere Eigenschaft der Floquet-Mastergleichung ist, dass das Bad im quasistationären Zustand keinen Einfluss mehr auf das System ausübt; sobald dieser Zustand erreicht ist, folgt das System seiner unitären, getriebenen Dynamik. Da diese Eigenschaft dem Verhalten im ungetriebenen Gleichgewichtszustand entspricht, wird in dieser Arbeit der quasistationäre Zustand trotz seiner Nicht-Stationarität auch als „Floquet-Gleichgewichtszustand“ bezeichnet. Damit hängt auch zusammen, dass der erreichte Gleichgewichtszustand nicht von der Größe der System-Bad-Kopplung abhängt.

Die Darstellung im Floquet-Bild bietet auch in numerischer Hinsicht einen

enormen Vorteil für die Beschreibung des Langzeit-Verhaltens. Da die Mastergleichung im Schrödinger-Bild explizit zeitabhängig ist, muss in der Regel eine numerische Integration über viele Treiberperioden durchgeführt werden. Die Floquet-Mastergleichung liefert den Gleichgewichtszustand durch die Diagonalisierung des zeitunabhängigen Dissipators.

Auch wenn die Mastergleichung in der Floquet-Darstellung die gleiche Form wie die gewöhnliche Mastergleichung für das ungetriebene System hat, gibt es doch einige Unterschiede. So ist der Gleichgewichtszustand zwar diagonal in dieser Basis, die einzelnen Zustände sind jedoch im Allgemeinen nicht nach einer Boltzmann-Verteilung besetzt. Dies liegt daran, dass durch den Einfluss des Treibers weitere Dämpfungskanäle hinzukommen. Am deutlichsten wird dieser Aspekt, wenn man das Tieftemperatur-Verhalten betrachtet. Während das ungetriebene System in den Grundzustand relaxiert, befindet sich das getriebene System auch für diesen Grenzfall in der Regel in einem gemischten Zustand, und nicht etwa in dem Floquet-Zustand mit niedrigster mittlerer Energie. Für sehr große Temperaturen stimmt das Verhalten wiederum überein, in beiden Fällen geht das System in den vollständig gemischten Zustand.

Für sehr schwach getriebene Systeme geht die Floquet-Mastergleichung in die gewöhnliche Born-Markow-Mastergleichung für das ungetriebene System über. Für adiabatisch getriebene Systeme, also Systeme mit schneller Relaxationszeit im Vergleich zur Treiberdynamik, verliert die Floquet-Mastergleichung hingegen ihre Gültigkeit, da die Voraussetzung der Säkularnäherung in diesem Fall verletzt wird.

Die Anwendbarkeit der Mastergleichung hängt nicht von der funktionalen Form der Zeitabhängigkeit des Treibers ab. Für alle hier betrachteten Modelle wurde der Einfachheit halber ein harmonischer Treiber betrachtet, bei komplizierteren Abhängigkeiten wächst natürlich auch die Komplexität der Floquet-Zustände, wodurch der numerische Aufwand erhöht wird.

An einem kleinen System, einem einzelnen Qubit, wurde die Voraussage der Floquet-Mastergleichung mit einem Modell verglichen, bei dem keine Bad-Näherungen durchgeführt werden müssen. Dabei wurde das Qubit in ein größeres Quantensystem eingebettet und die unitäre Dynamik des Gesamtsystems betrachtet. Beide Resultate stimmen sehr gut miteinander überein.

Obwohl die Floquet-Gleichgewichtszustände in der Regel nicht einer kanonischen Verteilung gemäß der Badtemperatur folgen, kann es doch sinnvoll sein, eine effektive Temperatur einzuführen. Es bietet sich an, dazu die Besetzung der Floquet-Zustände als Funktion ihrer mittleren Energie heranzuziehen. Für ein Zwei-Niveau-System lässt sich formal immer eine Temperatur definieren, bei größeren Systemen kann die betrachtete Verteilung jedoch stark von einer kanonischen Verteilung zu einer effektiven Temperatur abweichen.

Am Modell einer getriebenen Spinkette wurde demonstriert, dass für dieses

Modell die Besetzung der Zustände im Gleichgewicht besser durch die Floquet-Zustände beschrieben wird als durch eine alternative Beschreibung über die mittleren Besetzungszahlen der ungestörten Eigenzustände. Insbesondere wenn die Treiberfrequenz resonant zur Energieaufspaltung der einzelnen Spins ist, erhält man eine fast perfekte kanonische Verteilung der Floquet-Zustände, deren effektive Temperatur jedoch deutlich von der Badtemperatur abweicht.

Für das einzelne Qubit und die getriebene Spinkette wurde außerdem die Abhängigkeit der so definierten effektiven Temperatur von den Treiberparametern betrachtet. Dabei wurde beobachtet, dass für Treiberstärken bis etwa der Größenordnung der lokalen Aufspaltungen überwiegend eine effektive Abkühlung des Systems stattfindet, für stärkere Treiber wird das System zunehmend heißer. Auffallend ist das Verhalten bei resonantem Treiber, wo eine starke Abkühlung auftritt.

Des Weiteren wurde der Gleichgewichtszustand des getriebenen Potenzialtopfs betrachtet. Wie bereits bekannt, zerfällt die Besetzung der Zustände in zwei Bereiche, ein „Plateau“ bei niedrigen Energien und die ungestörte kanonische Verteilung bei hohen Energien. Es wurden die effektiven Temperaturen für den Plateau-Bereich betrachtet, dabei wurde beobachtet, dass sich die Plateau-Temperatur mit zunehmender Treiberstärke schnell auf einen konstanten Wert einpendelt. Dieser hängt dabei vom verwendeten Bad-Modell ab.

Im Hinblick auf mögliche Anwendungen ist eine Betrachtung der Energiebilanz des getriebenen Systems von Interesse. Für eine allgemeine Lindblad-Mastergleichung mit zeitabhängigen Parametern lassen sich unabhängig von der Annahme einer Säkularnäherung oder einer bestimmten Badstruktur Ströme definieren, die der vom Treiber verrichteten Arbeit bzw. der aus dem Bad aufgenommenen Wärme entsprechen. Für einzelne Modelle lässt sich die verrichtete Arbeit auch aus dem T-S-Diagramm des Systems ablesen. Speziell für den Floquet-Gleichgewichtszustand gilt dabei, dass der Treiber im Mittel keine Arbeit verrichtet. Eine funktionierende thermodynamische Maschine lässt sich also durch die Floquet-Mastergleichung nicht beschreiben.

Ein weitere Fragestellung ist der Einfluss eines Treibers auf typische Nichtgleichgewichts-Situationen, wie z. B. die Wärmeleitung. Für eine getriebene Spinkette zwischen zwei Bädern mit geringer Temperaturdifferenz erhält man dabei einen Wärmestrom, der dem globalen Fourierschen Gesetz der Wärmeleitung gehorcht, mit einer Wärmeleitfähigkeit, die von den Treiberparametern abhängt. Die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit zeigt ein Verhalten, das mit bekannten Resultaten in prinzipiellen Punkten übereinstimmt.

Dabei werden jedoch auch Grenzen der hier verwendeten Mastergleichung deutlich, die sich für bestimmte Parameter in einem unphysikalischen Verhalten äußern. Dies liegt jedoch nicht an der Darstellung in der Floquet-Basis, sondern an den Annahmen der zugrundeliegenden Mastergleichung, speziell

der säkularen Näherung. Diese führt für ungetriebene Systeme zu einer unabhängigen Dämpfung in die Eigenzustände, wodurch bereits in diesem Fall wesentliche Aspekte des Nichtgleichgewichts nicht beschrieben werden können.

Zusammenfassend ergibt sich somit folgendes Bild: Die Floquet-Darstellung bietet für das periodisch getriebene System viele Vorzüge, wie etwa numerische Vorteile bei der Bestimmung des Gleichgewichtszustandes und eine einfache Form der Mastergleichung, aus der einige prinzipielle Eigenschaften dieses Zustands direkt abgeleitet werden können. Ihre Grenzen jedoch werden besonders deutlich an den Modellen, die im Kontext thermodynamischer Maschinen und der Wärmeleitung stehen. Probleme entstehen dabei durch die Forderung einer relativ starken Dämpfung bzw. durch die Nichtgleichgewichts-Situation, die beide nicht mit der Säkularnäherung vereinbar sind. Eine Übertragung der Floquet-Darstellung auf eine Mastergleichung ohne diese Näherung wäre wünschenswert, und es ist zu hoffen, dass sich daraus weitere interessante Erkenntnisse über diese Modelle gewinnen ließen. Nichtsdestotrotz liefert die Floquet-Mastergleichung eine gute Beschreibung für eine breite Klasse von Modellen (schwach gedämpfte Systeme an nur einem Bad). Denkbare Anwendungen in diesem Zusammenhang könnten z. B. auch die Bad-unterstützte Präparation von Nichtgleichgewichts-Zuständen sein, oder die stroboskopische Stabilisierung bestimmter Zustände gegenüber Dekohärenz.

English Overview

We consider dissipative quantum systems which are subject to a periodic driving force. We restrict ourselves to a semiclassical scenario, where the driver is modeled by time-dependent parameters in the system Hamiltonian, like e. g. varying external fields. Models of this kind are of interest in numerous fields of physics. They play a role in quantum computing, e. g. for quantum registers that are stabilized against decoherence by applying pulse sequences, or in the rather new field of quantum thermodynamics, where, under other things, quantum systems are considered that implement thermodynamic machines. In the following, we will study some general properties of these systems, using a method based on the quasi-energetic states or Floquet states.

Floquet Master Equation

The general Hamiltonian for the considered scenarios is given by

$$H = H_S(t) + H_B + H_{SB}, \quad (1)$$

where $H_S(t)$ is periodic with the driving frequency Ω ,

$$H_S(t + \tau) = H_S(t), \quad \tau = 2\pi/\Omega. \quad (2)$$

H_B and H_{SB} are the Hamiltonian of the bath and the system-bath interaction, respectively.

By Floquet's theorem on differential equations with periodic coefficients there exist for finite systems solutions to the time-dependent Schrödinger equation of the form

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\mathcal{E}t/\hbar} |\mathcal{E}(t)\rangle, \quad |\mathcal{E}(t + \tau)\rangle = |\mathcal{E}(t)\rangle, \quad (3)$$

where \mathcal{E} is called “quasi-energy”. The quasi-energetic states $|\mathcal{E}(t)\rangle$ are also called “steady states” or “Floquet states”. They form for any time a complete set of basis states and in some respect take the place of the energy eigenstates for the time-dependent system. Because of their periodicity, they can

be decomposed into a Fourier series with the components $|u^{(q)}\rangle$,

$$|\mathcal{E}(t)\rangle = \sum_{q=-\infty}^{\infty} e^{iq\Omega t} |u^{(q)}\rangle, \quad |u^{(q)}\rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau e^{-iq\Omega t} |\mathcal{E}(t)\rangle dt. \quad (4)$$

It is of advantage to regard the density operator of the system proper in the interaction or Floquet representation

$$\tilde{\rho} = U_S^\dagger(t) \rho U_S(t), \quad U_S(t) = \sum e^{-i\mathcal{E}_\alpha t} |\mathcal{E}_\alpha(t)\rangle \langle \mathcal{E}_\alpha(0)|. \quad (5)$$

In this basis, a master equation for the dissipative dynamics of the system can be derived. The system-bath interaction is assumed to be of the form

$$H_{SB} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha}. \quad (6)$$

One can now define transition frequencies between the quasi-energetic states and corresponding matrix elements of the bath operator A ,

$$\omega_{\alpha\beta k} := -(\mathcal{E}_{\alpha} - \mathcal{E}_{\beta} + k\Omega), \quad (7)$$

$$A_{\alpha\beta}(k) := \sum_q \langle u_{\alpha}^{(q)} | A | u_{\beta}^{(q+k)} \rangle. \quad (8)$$

Making the Born, Markov and secular approximations, one gets a closed equation for the density operator of the system proper in the Floquet representation

$$\dot{\tilde{\rho}} = \mathcal{D}(\tilde{\rho}), \quad (9)$$

with

$$\mathcal{D}(\tilde{\rho}) = \sum_{\omega} \gamma(\omega) \left(A(\omega) \tilde{\rho} A^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{ A^\dagger(\omega) A(\omega), \tilde{\rho} \} \right). \quad (10)$$

The Lindblad operators $A(\omega)$ stem from all terms $A_{\alpha\beta}(k)$ that belong to the same transition frequency

$$A(\omega) := \sum_{\omega_{\alpha\beta k} = \omega} A_{\alpha\beta}(k) |\mathcal{E}_{\alpha}(0)\rangle \langle \mathcal{E}_{\beta}(0)|. \quad (11)$$

This equation of motion does not depend on time explicitly. However, in the Schrödinger picture the dissipator \mathcal{D} shows an explicit time dependency.

The Floquet master equation results in a relaxation of the system into a statistical mixture of the quasi-energetic states. In the Schrödinger picture this

state is “quasi-stationary”, meaning time-dependent with the same periodicity as the driver. Another property of this master equation is that the bath has no effect on the system in the quasi-stationary state: when this state is reached, the systems follows only its driven unitary time evolution. This property resembles the behavior of the undriven system in its equilibrium state, we will therefore also call the quasi-stationary state “Floquet equilibrium”, despite its time dependency. Another aspect that follows from this behavior is that the reached equilibrium does not depend on the coupling strength between system and bath, which only affects the relaxation dynamics.

The Floquet representation has also advantages for the numerical calculations, especially regarding the long-time behavior. Solving the explicitly time-dependent Schrödinger picture master equation involves numerical integration over many driver periods, whereas the Floquet master equation can be solved by diagonalizing the time-independent dissipator.

The Floquet master equation has the same form as the master equation for the undriven system, but there are some differences. The equilibrium state is diagonal in the Floquet basis, like the undriven equilibrium in the eigenbasis, but the quasi-energetic states are in general not occupied according to the Boltzmann distribution. The reason are the additional damping channels that are induced by the driver. This can be seen best in the low temperature limit: whereas the undriven system relaxes into a pure state (namely the ground state), the driven system relaxes even for zero temperature into a mixed state, and not—as might be guessed—into the quasi-energetic state with the lowest mean energy. For very high temperatures both systems end up in the totally mixed state.

In the limit of a very weak driver the Floquet master equation approaches the behavior of the common Born-Markov master equation for the undriven system. For adiabatically driven systems, meaning that the driving is much slower than the bath-induced relaxation of the system, the Floquet master equation loses its validity; in this case the preconditions of the secular approximation are violated.

The applicability of the Floquet master equation does not depend upon the special functional form of the time dependency of the driver. For simplicity only, all models in this thesis are harmonically driven. A more complex driver leads also to higher complexity of the quasi-energetic states, which increases the numerical effort.

Effective Temperature

As mentioned above, the Floquet equilibrium does in general not exhibit a canonical occupation that corresponds to the bath temperature. Nevertheless, it can be useful to introduce an effective temperature for the driven system. It can be defined by fitting a canonical distribution with temperature β_{eff} to the occupation of the quasi-energetic states depending on their mean energy. This is always exact for a two-level system, larger systems are usually only approximately described by the so-defined temperature. This aspect will be considered in more detail for the driven spin chain.

Driven Damped Qubit

For a simple system, namely a single qubit, the predictions of the Floquet master equation can be compared to a model where no bath approximations are made. For this purpose the qubit is coupled to a larger quantum system that acts as an environment. The behavior that follows from the unitary evolution of this combined system-bath model shows very good agreement with the relaxation behavior predicted by the Floquet master equation.

Locally Driven Spin Chain

We consider now the model of a driven spin chain, where the driver acts on the first spin and the different spins interact via Heisenberg coupling, leading to the Hamiltonian

$$H_S(t) = \frac{\nu}{2} \sum_{j=1}^n \sigma_z^{(j)} + \mu \sum_{j=1}^{n-1} \boldsymbol{\sigma}^{(j)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(j+1)} + g \sigma_x^{(1)} \sin \Omega t. \quad (12)$$

For this model the validity of the effective temperature is examined by comparing the description using the quasi-energetic states with a description using the mean occupation numbers of the undriven eigenstates. For both distributions the correlation coefficient for a fitted canonical distribution is calculated, see figure 1. For the considered parameter range it turns out that the equilibrium state is always better described by the Floquet states than by the eigenstates, especially near the resonance frequency of the spins, where the occupation distribution of the quasi-energetic states is practically canonical, but with a temperature different from the bath temperature.

The parameter dependency of the effective temperature for the single qubit and the spin chain has also been considered. For driving strength up to about

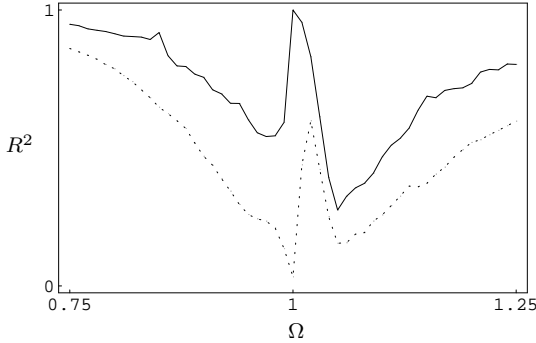


Figure 1: Coefficient of determination R^2 for the effective temperature of a spin chain ($n = 5$, $\nu = 1$, $\mu = 0.05$, $g = 0.2$). R^2 is shown for a description using the quasi-energetic states (—) and one using the undisturbed eigenstates (⋯⋯). A perfect fit to a canonical distribution leads to $R^2 = 1$.

the size of the energy splitting of the qubit there is an effective cooling for both systems, especially near the resonance frequency. In the case of strong driving both models show the tendency to become hotter and hotter.

Driven Particle in Box

Another interesting model is a driven particle in a box, with the Hamiltonian

$$H_S(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) + \lambda x \sin \omega t, \quad (13)$$

where

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{for } |x| < a, \\ \infty, & \text{for } |x| > a. \end{cases} \quad (14)$$

This model has already been examined by Breuer *et al.* [5]. They found that the occupation distribution of the Floquet states separates into two regimes: for low energies there is a “plateau” of nearly equally occupied states, for high energies the occupation follows the undisturbed Boltzmann distribution.

It turns out that the states in the plateau regime are not equally distributed, but can rather be described by an effective (inverse) temperature. This effective plateau temperature depends on the strength of the driver. For weak driving it is near the bath temperature and decreases to a seemingly constant

value for stronger driving. The final value depends upon the chosen bath type: for the bath model used by Breuer *et al.* it lies close to zero; this is not the case for the bath model used throughout the rest of this thesis, see figure 2.

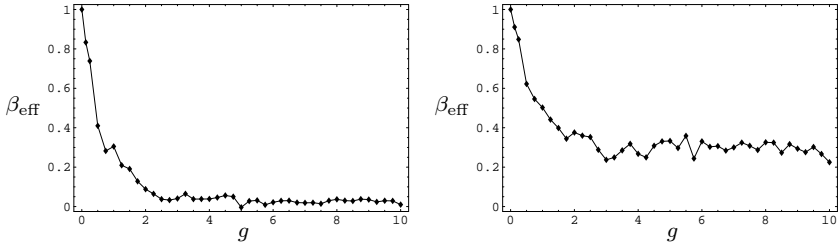


Figure 2: Dependency of the effective temperature β_{eff} of the plateau regime on the driver strength g for two different bath models (bath temperature $\beta = 1$).

Currents in Periodically Driven Systems

Having in mind possible applications like thermodynamic machines, it is interesting to consider the energy currents that occur in the driven system. For a master equation in the general Lindblad form with time-dependent coefficients it is possible to define energy currents that correspond to the work done by the driver and to the energy that is dissipated into the bath. For special models the work during one cycle can also be calculated by the area in the T-S-diagram. In the case of the Floquet equilibrium state it turns out that the net work is always zero. Thus, a functioning thermodynamic machine can not be modeled by the Floquet master equation.

Heat Conduction in Driven Spin Chain

Another interesting question is how e. g. heat conduction through a homogeneous chain is modified by a driving force. The system Hamiltonian for the case of three spins is given by

$$H_S(t) = \frac{\nu}{2} \sum_{j=1}^3 \sigma_z^{(j)} + \mu \sum_{j=1}^2 \boldsymbol{\sigma}^{(j)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(j+1)} + g \sigma_x^{(2)} \sin \Omega t. \quad (15)$$

The chain is placed between two baths of slightly different temperature. It turns out that the resulting heat current obeys Fourier's law, i. e. that it is

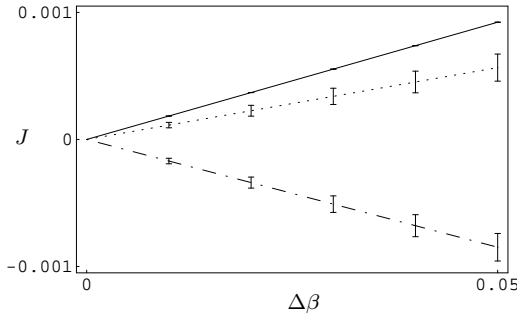


Figure 3: Heat current J as a function of the temperature difference between the two baths, $\Delta\beta$. It is shown for different driver strengths, $g = 0$ (—), $g = 0.2$ (⋯) and $g = 0.4$ (-·-); for $\Omega = 0.8$, $\beta = 1$.

proportional to the temperature difference of the baths, see figure 3. The heat conductance—which is given by the slopes—depends on the driver parameters. Its temperature dependency shows a general behavior that is in accordance with common theories of heat conduction (namely a behavior like T^{-1} for high temperatures).

However, for this type of models some limitations of the used master equation become obvious, leading to unphysical behavior like a negative heat conductance for some parameters. But this is due to the underlying master equation and not to the chosen Floquet representation. Already for undriven systems the secular approximation leads to independent damping channels between all eigenstates, so that fundamental aspects of non-equilibrium states—for example a temperature gradient—can not be described.

Conclusions

In summary, for a periodically driven system the Floquet representation offers many advantages, like reduced numerical effort for calculating the equilibrium state or a particularly simple form of the master equation, whence some fundamental properties of this quasi-stationary state can be deduced. However, for the models that are discussed in the context of thermodynamic machines or heat conduction, its limitations become obvious. Problematic is the need for strong damping and the non-equilibrium scenario with two baths, both of which are in contradiction to the secular approximation. Thus, applying the Floquet representation to a master equation without this approximation

seems very promising, and it can be hoped that this approach would lead to further insights into these interesting models. Nevertheless, the Floquet master equation can be used to describe a large class of models (weakly damped systems with only one bath). Some additional applications of this type might be the notion of bath-assisted preparation of non-equilibrium states, or the stroboscopic stabilization of some given state against decoherence.

Anhang

A. Verallgemeinerter Blochvektor

Als Basis des d -dimensionalen Hilbertraumes dienen die $d^2 - 1$ Generatoren von $SU(n)$, $\hat{\lambda}_j$. Die Generatoren erfüllen dabei die Spurrelationen

$$\text{Tr } \hat{\lambda}_j = 0, \quad \text{Tr}(\hat{\lambda}_j \hat{\lambda}_k) = 2\delta_{jk}. \quad (\text{A.1})$$

Der Dichteoperator lässt sich dann durch den Kohärenzvektor oder verallgemeinerten Blochvektor $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_j)$ darstellen, mit

$$\rho = \frac{1}{d}\hat{1} + \frac{1}{2}\sum_j \lambda_j \hat{\lambda}_j, \quad \lambda_j = \text{Tr}(\rho \hat{\lambda}_j). \quad (\text{A.2})$$

Speziell für ein Spin- $\frac{1}{2}$ -System können die Generatoren mit den Pauli-Operatoren identifiziert werden

$$\hat{\lambda}_1 = \sigma_x, \quad \hat{\lambda}_2 = \sigma_y, \quad \hat{\lambda}_3 = \sigma_z. \quad (\text{A.3})$$

Eine ausführliche Darstellung findet sich in [28].

B. Verwendete Darstellung der Pauli-Operatoren

Folgende Darstellung der Pauli-Operatoren und der Eigenbasis zu σ_z wird verwendet

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\sigma_{\pm} = |\pm\rangle\langle\mp|, \quad (\text{B.3})$$

$$\sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

C. Einige Maße für Zustände

Purity (Reinheit)

Die Purity eines Zustandes ist

$$\mathcal{P}(\rho) := \text{Tr}(\rho^2), \quad \text{oder } \mathcal{P}(\boldsymbol{\lambda}) = \frac{1}{d} + \frac{1}{2} |\boldsymbol{\lambda}|^2, \quad (\text{C.1})$$

mit dem Wertebereich

$$\frac{1}{d} \leq \mathcal{P} \leq 1. \quad (\text{C.2})$$

Speziell für ein Qubit

$$\mathcal{P}(\boldsymbol{\lambda}) = \frac{1}{2}(1 + |\boldsymbol{\lambda}|^2). \quad (\text{C.3})$$

von-Neumann-Entropie

Die von-Neumann-Entropie ist definiert als

$$S := -k_{\text{B}} \text{Tr}(\rho \ln \rho). \quad (\text{C.4})$$

Speziell für ein Qubit (Blochlänge $\lambda = |\boldsymbol{\lambda}|$) folgt

$$S = \frac{k_{\text{B}}}{2} \ln \frac{4(1-\lambda)^{\lambda-1}}{(1+\lambda)^{\lambda+1}}, \quad (\text{C.5})$$

mit Werten zwischen $S = 0$ ($\lambda = 1$) und $S = k_{\text{B}} \ln 2$ ($\lambda = 0$).

Abstandsmaß

Als Abstandsmaß für Dichteoperatoren dient die Bures-Metrik. Sie ist darstellungsunabhängig und genau dann Null, wenn die Zustände übereinstimmen. Siehe z. B. auch [16].

$$D^2(\rho, \rho') := \text{Tr}((\rho - \rho')^2). \quad (\text{C.6})$$

In Bloch-Darstellung erhält man zunächst

$$(\rho - \rho')^2 = \frac{1}{4} \left(\sum_j (\lambda_j - \lambda'_j) \hat{\lambda}_j \right)^2, \quad (\text{C.7})$$

und nach Spurbildung mittels (A.1)

$$D^2(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}') = \frac{1}{2} |\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}'|^2. \quad (\text{C.8})$$

D. Qubit-Gleichgewicht

Für den Gleichgewichtszustand eines ungetriebenen Qubits mit der Energieaufspaltung $\hbar\nu$, $H_S = \frac{\hbar\nu}{2}\sigma_z$, erhält man bei Badtemperatur β aus der Boltzmann-Verteilung (4.1)

$$\rho^{\text{eq}} = \frac{1}{1 + e^{-\beta\hbar\nu}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-\beta\hbar\nu} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.1})$$

$$\lambda^{\text{eq}} = \left(0, 0, -\tanh \frac{\beta\hbar\nu}{2} \right), \quad \tanh x = \frac{e^{2x} - 1}{e^{2x} + 1}. \quad (\text{D.2})$$

Umgekehrt erhält man die einem Zustand entsprechende Temperatur zu

$$\beta = \frac{1}{\hbar\nu} \ln \frac{1 - \lambda_3}{1 + \lambda_3} = \frac{1}{\hbar\nu} \ln(P_0/P_1). \quad (\text{D.3})$$

Der Energieerwartungswert des Qubits beträgt im Gleichgewicht

$$\langle H_S \rangle_{\text{eq}} = -\frac{\hbar\nu}{2} \tanh \frac{\beta\hbar\nu}{2}. \quad (\text{D.4})$$

E. Bessel-Funktionen

Einige Eigenschaften der Bessel-Funktionen 1. Gattung (siehe [19])

$$J_n(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-inx + iz \sin x} dx, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (\text{E.1})$$

$$J_{-n}(z) = J_n(-z) = (-1)^n J_n(z), \quad (\text{E.2})$$

$$J_0^2(z) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_n^2(z) = 1. \quad (\text{E.3})$$

Damit folgt für das in Gleichung (2.32) benötigte Integral

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-inx + iz \cos x} dx = e^{\frac{i\pi n}{2}} J_n(z). \quad (\text{E.4})$$

F. Eigenschaften der $\omega_{\alpha\beta k}$, $A_{\alpha\beta}(k)$ und $A(\omega)$

Aus den Definitionen (3.9) und (3.10) und der Hermitizität der Badoperatoren A ergeben sich einige Symmetrieeigenschaften

$$\omega_{\beta\alpha, -k} = -\omega_{\alpha\beta k}, \quad (\text{F.1})$$

$$A_{\alpha\beta}^*(k) = A_{\beta\alpha}(-k), \quad (\text{F.2})$$

$$A_{\alpha\alpha}^*(k) = A_{\alpha\alpha}(-k), \quad A_{\alpha\alpha}(0) \text{ reell.} \quad (\text{F.3})$$

Die Operatoren $A(\omega)$ erfüllen damit auch die Beziehung (1.11)

$$A(-\omega) = A^\dagger(\omega), \quad A(0) \text{ hermitesch,} \quad (\text{F.4})$$

ferner folgt aus (3.12) für $t = 0$ die Eigenschaft (1.9)

$$A = \sum_{\omega} A(\omega). \quad (\text{F.5})$$

Für die Spuren der einzelnen $A(\omega)$ folgt aus

$$\text{Tr } \tilde{A} = \sum_{\omega} e^{-i\omega t} \text{Tr } A(\omega) = \text{Tr } A = \textit{konst} \quad (\text{F.6})$$

die Eigenschaft

$$\text{Tr } A(\omega) = \begin{cases} \text{Tr } A, & \omega = 0, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (\text{F.7})$$

Literaturverzeichnis

- [1] F. Bloch und A. Siegert, Magnetic Resonance for Nonrotating Fields, *Phys. Rev.* **57**(6), 522–527 (1940).
- [2] R. Blümel, A. Buchleitner, R. Graham, L. Sirko, U. Smilansky und H. Walther, Dynamical localization in the microwave interaction of Rydberg atoms: The influence of noise, *Phys. Rev. A* **44**(7), 4521–4540 (1991).
- [3] R. Blümel, R. Graham, L. Sirko, U. Smilansky, H. Walther und K. Yamada, Microwave Excitation of Rydberg Atoms in the Presence of Noise, *Phys. Rev. Lett.* **62**(4), 341–344 (1989).
- [4] P. Borowski, J. Gemmer und G. Mahler, Relaxation into equilibrium under pure Schrödinger dynamics, *Eur. Phys. J. B* **35**, 255–259 (2003).
- [5] H.-P. Breuer, W. Huber und F. Petruccione, Quasistationary distributions of dissipative nonlinear quantum oscillators in strong periodic driving fields, *Phys. Rev. E* **61**(5), 4883–4889 (2000).
- [6] H.-P. Breuer und F. Petruccione, Dissipative quantum systems in strong laser fields: Stochastic wave-function method and Floquet theory, *Phys. Rev. A* **55**(4), 3101–3116 (1997).
- [7] H.-P. Breuer und F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press, Oxford (2002).
- [8] I. N. Bronstein und K. A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, Teubner, Stuttgart (1991).
- [9] J. I. Cirac und P. Zoller, Quantum Computations with Cold Trapped Ions, *Phys. Rev. Lett.* **74**(20), 4091–4094 (1995).
- [10] C. Cohen-Tannoudji, *Quantenmechanik*, de Gruyter, Berlin, 2. Auflage (1999).
- [11] D. G. Cory, M. D. Price und T. F. Havel, Nuclear magnetic resonance spectroscopy: An experimentally accessible paradigm for quantum computing, *Physica D* **120**, 82–101 (1998).

- [12] R. R. Ernst, G. Bodenhausen und A. Wokaun, *Principles of nuclear magnetic resonance in one and two dimensions*, Clarendon Press, Oxford (1987).
- [13] A. G. Fainshtein, N. L. Manakov und L. P. Rapoport, Some general properties of quasi-energetic spectra of quantum systems in classical monochromatic fields, *J. Phys. B* **11**(14), 2561–2577 (1978).
- [14] T. Feldmann und R. Kosloff, Quantum four-stroke heat engine: Thermodynamic observables in a model with intrinsic friction, *Phys. Rev. E* **68**, 016101 (2003).
- [15] J. Gemmer und M. Michel, Thermalization of quantum systems by finite baths, *Europhys. Lett.* **73**(1), 1–7 (2006).
- [16] J. Gemmer, M. Michel und G. Mahler, *Quantum Thermodynamics: Emergence of Thermodynamic Behavior within Composite Quantum Systems*, Band 657 aus *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, Berlin, New York (2004).
- [17] N. A. Gershenfeld und I. L. Chuang, Bulk Spin-Resonance Quantum Computation, *Science* **275**, 350–356 (1997).
- [18] V. Gorini, A. Kossakowski und E. C. G. Sudarshan, Completely positive dynamical semigroups of N-level systems, *J. Math. Phys.* **17**(5), 821–825 (1976).
- [19] I. S. Gradshteyn und I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Academic Press, New York (1980).
- [20] U. Haeberlen und J. S. Waugh, Coherent Averaging Effects in Magnetic Resonance, *Phys. Rev.* **175**(2), 453–467 (1968).
- [21] M. J. Henrich, M. Michel und G. Mahler, Small quantum information networks operating as quantum thermodynamic machines, LANL e-print cond-mat/0604202 (2006).
- [22] W. Huber, *Dynamik stark getriebener offener Quantensysteme*, Dissertation, Universität Freiburg (1998).
- [23] R. V. Jensen und R. Shankar, Statistical Behavior in Deterministic Quantum Systems with Few Degrees of Freedom, *Phys. Rev. Lett.* **54**(17), 1879–1882 (1985).

- [24] S. Kohler, T. Dittrich und P. Hänggi, Floquet-Markovian description of the parametrically driven, dissipative harmonic quantum oscillator, *Phys. Rev. E* **55**(1), 300–313 (1997).
- [25] D. W. Leung, I. L. Chuang, F. Yamaguchi und Y. Yamamoto, Efficient implementation of coupled logic gates for quantum computation, *Phys. Rev. A* **61**, 042310 (2000).
- [26] G. Lindblad, On the Generators of Quantum Dynamical Semigroups, *Commun. Math. Phys.* **48**(2), 119–130 (1976).
- [27] D. Loss und D. P. DiVincenzo, Quantum computation with quantum dots, *Phys. Rev. A* **57**(1), 120–126 (1998).
- [28] G. Mahler und V. A. Weberruß, *Quantum Networks: Dynamics of Open Nanostructures*, Springer-Verlag, Berlin, 2. Auflage (1998).
- [29] M. Michel, M. Hartmann, J. Gemmer und G. Mahler, Fourier’s Law confirmed for a class of small quantum systems, *Eur. Phys. J. B* **34**, 325–330 (2003).
- [30] M. Michel, G. Mahler und J. Gemmer, Fourier’s Law from Schrödinger Dynamics, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 180602 (2005).
- [31] M. A. Nielsen und I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [32] K. M. O’Connor und W. K. Wootters, Entangled rings, *Phys. Rev. A* **63**, 052302 (2001), LANL e-print quant-ph/0009041 v3.
- [33] J. M. Okuniewicz, Quasiperiodic pointwise solutions of the periodic, time-dependent Schrödinger equation, *J. Math. Phys.* **15**(9), 1587–1595 (1974).
- [34] A. Otte, *Separabilität in Quantennetzwerken*, Dissertation, Universität Stuttgart (2001).
- [35] R. E. Peierls, *Quantum theory of solids*, Clarendon Press, Oxford (1955).
- [36] I. I. Rabi, Space Quantization in a Gyration Magnetic Field, *Phys. Rev.* **51**(8), 652–654 (1937).
- [37] I. I. Rabi, N. F. Ramsey und J. Schwinger, Use of Rotating Coordinates in Magnetic Resonance Problems, *Rev. Mod. Phys.* **26**(2), 167–171 (1954).
- [38] K. Saito, Strong evidence of normal heat conduction in a one-dimensional quantum system, *Europhys. Lett.* **61**(1), 34–40 (2003).

- [39] K. Saito, S. Takesue und S. Miyashita, Energy transport in the integrable system in contact with various types of phonon reservoirs, *Phys. Rev. E* **61**(3), 2397–2409 (2000).
- [40] W. R. Salzman, Quantum mechanics of systems periodic in time, *Phys. Rev. A* **10**(2), 461–465 (1974).
- [41] H. Sambe, Steady States and Quasienergies of a Quantum-Mechanical System in an Oscillating Field, *Phys. Rev. A* **7**(6), 2203–2213 (1973).
- [42] J. H. Shirley, Solution of the Schrödinger Equation with a Hamiltonian Periodic in Time, *Phys. Rev.* **138**(4B), B979–B987 (1965).
- [43] A. Shnirman, G. Schön und Z. Hermon, Quantum Manipulations of Small Josephson Junctions, *Phys. Rev. Lett.* **79**(12), 2371–2374 (1997).
- [44] P. W. Shor, Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory, *Phys. Rev. A* **52**(4), 2493–2496 (1995).
- [45] A. M. Steane, Error Correcting Codes in Quantum Theory, *Phys. Rev. Lett.* **77**(5), 793–797 (1996).
- [46] M. Stollsteimer und G. Mahler, Suppression of arbitrary internal coupling in a quantum register, *Phys. Rev. A* **64**(5), 052301 (2001), LANL e-print quant-ph/0107059.
- [47] F. Tonner und G. Mahler, Autonomous quantum thermodynamic machines, *Phys. Rev. E* **72**, 066118 (2005).
- [48] L. Viola und S. Lloyd, Dynamical suppression of decoherence in two-state quantum systems, *Phys. Rev. A* **58**(4), 2733–2744 (1998).
- [49] U. Weiss, *Quantum dissipative systems*, Band 10 aus *Series in modern condensed matter physics*, World Scientific, Singapore, 2. Auflage (1999).
- [50] P. Zanardi und M. Rasetti, Noiseless Quantum Codes, *Phys. Rev. Lett.* **79**(17), 3306–3309 (1997).

Symbolverzeichnis

$\{A, B\}$	Antikommutator
$\langle A \rangle_\tau$	Mittelwert über eine Periodendauer
\tilde{A}	Operator im Wechselwirkungs-Bild
A	Badoperator
$A(\omega)$	Eigenoperator/Lindblad-Operator
$A_{\alpha\beta}(k)$	Badoperator-Matrixelemente in der Floquet-Darstellung
β	inverse Temperatur, $\beta = 1/(k_B T)$
$\gamma(\omega)$	Dämpfungskonstante der Mastergleichung
γ_0	Maß für die Stärke der Badankopplung
D^2	Bures-Metrik
Δ	Quasienergie-Differenz
\mathcal{D}	Dissipator der Mastergleichung
d	Dimension des System-Hilbertraumes
$ \mathcal{E}(t)\rangle$	Floquet-Zustand
\overline{E}_i	mittlere Energien der Floquet-Zustände
$\mathcal{E}, \mathcal{E}_\pm$	Quasienergie, Qubit-Quasienergien
$\Gamma_{\alpha\beta}$	Projektor in Floquet-Basis
g	Treiberstärke
h. c.	hermitesch konjugiert
$H^{(q)}$	Fourier-Komponente des System-Hamiltonoperators
H_B, H_{SB}	Bad-Hamiltonoperator, System-Bad-Wechselwirkung

H_S	System-Hamiltonoperator
J	mittlerer Strom
κ, κ_β	Wärmeleitfähigkeit
λ	Blochvektor
μ	Kopplungsstärke der Spinkette
ν	Qubit-Aufspaltung
n	Anzahl Spins der Spinkette
Ω	Treiberfrequenz
ω	Übergangsfrequenz
$\omega_{\alpha\beta k}, \omega_k$	Übergangsfrequenzen in der Floquet-Darstellung ($\omega_k = \omega_{\alpha\alpha k}$)
\mathcal{P}	Purity, $\mathcal{P} = \text{Tr}(\rho^2)$
P_i	Besetzungszahlen der Floquet-Zustände
q_{\max}	Grenze der Fourierreihe
ρ	Dichteoperator
R^2	Bestimmtheitsmaß der linearen Regression
S	von-Neumann-Entropie
τ	Treiber-Periodendauer
τ_B	Badkorrelationszeit
τ_R	System-Relaxationszeit
τ_S	typische Systemzeit
T	Temperatur
$ u^{(q)}\rangle$	Fourier-Komponente eines Floquet-Zustands
U_S	System-Zeitentwicklungsoperator
w_{ij}, W	Übergangswahrscheinlichkeiten/-matrix der Pauli-Mastergleichung
ξ	Badparameter (Exponent der spektralen Dichte)

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. G. Mahler für die interessante Themenstellung, wichtige Impulse im Verlauf dieser Arbeit und seine große Geduld bei der Betreuung.

Herrn Prof. Dr. G. Wunner danke ich für die freundliche Aufnahme an das Institut.

Herrn Prof. Dr. H.-R. Trebin danke ich für die freundliche Übernahme des Mitberichts.

Ich danke Friedemann Tonner für zahlreiche erhellende Kaffee-Diskussionen und allen anderen Mitgliedern der Arbeitsgruppe für viele ergebnisreiche und nette Gespräche: Markus Henrich, Mathias Michel, Florian Rempp, Georg Reuther, Harry Schmidt, Heiko Schröder, Jens Teifel, und Pedro Vidal.

Nicht zuletzt unseren Computerspezialisten Steffen Bücheler und Dirk Engel für ihren unermüdlichen Einsatz.

Ferner allen Institutsmitgliedern für die freundliche Atmosphäre.

Vor allem danke ich meinen Eltern für die vielfältige Unterstützung. Ohne sie wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen.