Methoden zur Beschreibung offener quantenmechanischer Systeme

Inhaltsverzeichnis:

Deklarationen:

$tr_X\{\hat{O}\} := \sum_k < x_k \vert \hat{O} \vert x_k >$	Spur des Operators $\hat{O}$ über System X
$[X,Y] := XY - YX$	Kommutator 2er Operatoren oder Matrizen: X,Y
$\{X,Y\} := XY + YX$	Antikommutator 2er Operatoren oder Matrizen: X,Y
$\delta_{k,l} := \begin{cases} 1 & \text{falls } k = l \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$	Kronecker-Symbol
$\delta(t) := \begin{cases} 0 & \text{für } t \neq 0 \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$	δ-Distribution
$\hat{n}_k := b_k^\dagger b_k$	bosonischer oder fermionischer Teilchenzahl-Operator (k. Mode)
$M_N(\mathbb{C})$	Algebra der $N \times N$-Matrizen mit Koeffizienten aus $\mathbb{C}$
$(E_{j,k})_{l,m} := \delta_{j,l}\delta_{k,m}$	$M_N(\mathbb{C})$-ON-Standard-Basis
$\mathscr{H}_X$	Hilbertraum (der phys. Zustände aus X)
$\mathcal{B}(\mathscr{H}_X)$	Algebra beschränkter Operatoren auf $\mathscr{H}_X$
$\mathcal{T}(\mathscr{H}_X)$	Algebra der Spurklasse-Operatoren auf $\mathscr{H}_X$ (d.h. $\vert tr\{\hat{O}\}\vert < \infty \ \forall \hat{O} \in \mathcal{T}(\mathscr{H}_X)$)
$k_B := 1,3807 \cdot 10^{-23} J/K$	Boltzmann-Konstante
$\hbar := h/2\pi := 1,0546 \cdot 10^{-34} Js$	Heisenberg'sches Wirkungsquantum

I. Einführung:

Im Folgenden wollen wir einen kurzen Einblick in die verschiedenen Zweige der Forschung und Formalismen im Bereich offener quantenmechanischer Systeme geben. Wegen der Kürze dieser Darstellung werden wir einige Methoden und Ergebnisse nur ansatzweise abhandeln und verweisen bei Detailfragen oder zur weiterführenden Information auf die entsprechenden Referenzen oder die ausführlichere Behandlung in den kommenden Kapiteln. Die Darstellung erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit, sondern soll einen Überblick über den derzeitigen Status der Untersuchungen solcher Systeme liefern.

Das Konzept des offenen quantenmechanischen Systems geht bis zu den Grundlagen der Quantenmechanik zurück. Bereits 1932 hat J. von Neumann zur Frage des Meßprozesses in seinem Standartwerk[(vNm,'68)] das Modell eines Quantensystems unter Einwirkung eines äußeren Meßinstrumentes untersucht.

Dieser Ansatz wurde z.B. von W.H. Zurek anfang der achtziger Jahre aufgegriffen[(Zurek,'81;'82)], um eine genauere formale Beschreibung des "Kollaps der Wellenfunktion" zu erzielen. Dabei betrachtet er die gekoppelte Zusammensetzung eines gemessenen und eines messenden Systems als ein offenes Quantensystem, welches aufgrund der makroskopischen Ausmaße des Meßapparates einer rasant verlaufenden Dekohärenz unterworfen ist.

Dekohärenz bezeichnet hierbei den statistischen Zerfall ursprünglich reiner, superponierter System-Meßapparat-Zustände in entsprechende Gemische, die sich bei eingehender Untersuchung als mit "pointer-states" verschränkte[†] System-Zustände erweisen. Bei dieser pointer-state-Basis handelt es sich um diejenigen Zustände, die der Meßapparat nach Eintreten der Messung einnehmen kann.

Für die Bestimmung solcher pointer-states sind unterschiedliche Kriterien entwickelt worden, z.B. der Begriff des "predictability sieve"[(HPZ,'93a),(A&Z,'96),(P&Z,'99)], wonach diejenigen Zustände als pointer-states angenommen werden, die die sogenannte von Neumann-Entropie des Systems minimieren. Dies entspricht der Auffassung, daß diese pointer-Zustände der geringsten Irreversibilität unterliegen, dementsprechend gering die Entropie-Zunahme ausfällt. Eine weitere Charakterisierung der pointer-states besteht darin, sie als Eigenzustände einer gewissen pointer-Observablen zu betrachten[(U&Z,'89),(HPZ,'93b)], die die Eigenschaft besitzt, mit dem Wechselwirkungs-Hamiltonian von System und Umgebung zu kommutieren.

---

†: Unter einem "verschränkten" Zustand versteht man aufgrund einer Kopplung kombiniert auftretende Zustände z.B. zwischen einem Meßobjekt und dessen Meßinstrument, die sich nicht als reines Zustandsprodukt darstellen lassen und aus denen im Falle des Meßvorganges zu einem Endzustand des Meßapparates der passende Zustand des Meßobjektes resultiert.

Dieses Konzept der Dekohärenz in entsprechende pointer-states beschränkt sich dabei nicht nur auf die Beschreibung von Meßvorgängen, sondern läßt sich auf zahlreiche andere Fälle anwenden, in denen man den Zerfall ursprünglicher reiner Systemzustände aufgrund der störenden Wechselwirkung mit einer dissipativen Umgebung beobachten kann.

So hat die Arbeitsgruppe um M. Brune, S. Haroche und J.M. Raimond im Bereich der Quantenoptik zahlreiche Untersuchungen der Dekohärenz und ihrer Zerfalls-Zeiten an Hohlraum-Resonatoren durchgeführt und dabei erstaunlich gute Ergebnisse erzielt[(BHR,'92;'96a,b;'97)].

Insbesondere im Gebiet der "quantum-non-demolition"-Spektroskopie und bezüglich der Frage, ob Quantencomputer konstruierbar sind, wurden dabei bedeutende Methoden entwickelt. Gerade bezüglich des sehr aktuellen Forschungsgebietes der Quantencomputer, in dem der Begriff der Dekohärenz im Mittelpunkt steht, sind einige angewandte Bereiche, z.B. der Festkörperphysik, der Ionen-Fallen, sowie NMR-Methoden, sehr aktiv geworden[(C&N,'00)].

Wesentlicher Ausgangspunkt zahlreicher Modellrechnungen und verschiedener (teilweise störungstheoretischer) Methoden ist die Annahme, daß sich ein offenes Quantensystem in eine größere Umgebung zu einem isolierten System mit üblicher unitärer Zeitentwicklung einbetten läßt (siehe: Kapitel II). Der Begriff der reduzierten Dichtematrix und der Mastergleichung (als Pendant der Liouville-Gleichung) spielt dabei eine wesentliche Rolle.

Die meisten approximativen Zugänge setzen mit einer (mehr oder minder exakten) Herleitung einer Mastergleichung aus einer entsprechenden totalen Liouville-Gleichung an und lösen diese (oft numerisch) für konkrete Modell-Beispiele[(U&Z,'89),(HPZ,'92;'93a)].

Bei der Herleitung solcher Mastergleichungen haben sich zwei Methoden ausgezeichnet.

So hat R. Zwanzig[(Zwzg,'60a)] einen Projektions-Operator-Formalismus entwickelt, der von S. Chaturvedi und F. Shibata[(C&S,'79)] zur Ableitung einer zeitlich-lokalen[&] Mastergleichung verwendet wurde. Dies liefert einen Ausgangspunkt für zahlreiche weitere (approximative) Anwendungen.

Die so bezeichnete Feynman-Vernon-Einfluß-Funktional-Methode, benannt nach einem Artikel von R.P. Feynman und F.L. Vernon[(F&V,'63)], weiterentwickelt von A.O. Caldeira und A.J. Leggett[(C&L,'83)] liefert auf der Grundlage der Pfad-Integrale[(F&H,'65)] eine recht elegante Formulierung der nicht-lokalen Einflüsse einer äußeren Umgebung auf ein System; diese Terme lassen sich zwar nur für Fälle quadratischer Kopplungen exakt lösen, dennoch sind neben einer Ausarbeitung des Formalismus für den Fall der Quanten-Brown'schen Bewegung[(HPZ,'92)] zahlreiche approximative Anwendungen aus dieser Technik erwachsen[(A&Z,'96),(P&R,'97)].

[&]: Mit zeitlich-lokal bezeichnen wir eine Differentialgleichung, deren zeitliche Ableitung zur Zeit t nur von Funktionswerten dieses Zeitpunktes abhängen(z.B. $\dot{\rho}_{Sys}(t) = \mathcal{K}(t)\rho_{Sys}(t)$).

Obwohl man bei der Einbettung eines offenen Systems in eine Umgebung zu einem isolierten Quantensystem eine unitäre (somit reversible) Zeitentwicklung ansetzt, steht im Mittelpunkt vieler Modelle das irreversible Verhalten solcher Dekohärenz-Effekte.

Analog zu der zeit-parametrisierten unitären Transformationsgruppe der Evolution abgeschlossener Quantensysteme, hat A. Kossakowski den Begriff der dynamischen Halbgruppe eingeführt[(Kos,'72),(Dav,'76)]. Deren Halbgruppen-Struktur (d.h. das Nicht-Vorhandensein inverser Transformationen) spiegelt den allgemeinen irreversiblen Charakter offener Dynamik wieder.

Die Wirkung dieser Transformations-Halbgruppen entweder im Heisenberg-Bild auf der Observablen-Algebra des Systems oder im Schrödinger-Bild auf dem positiven Kegel der System-Dichteoperatoren wurde in einem allgemeineren Kontext auf dem Boden der C^*- und W^*-Algebren untersucht. Neben anderen hat dabei G. Lindblad eine genaue Klassifizierung der Generatoren solcher Transformationen durchgeführt und die sogenannte Lindblad-Form der Mastergleichung solcher Prozesse gefunden[(Lbld,'76)].

Eine alternative Behandlung der Entwicklung offener Quantensysteme wurde mittels Methoden der stochastischer Analysis entwickelt, das sogenannten Konzept der "Quantum State Diffusion"[(G&P,'92)].

Dabei versucht man zu einer gegebenen Mastergleichung (oder dem zugrundeliegenden Modell) ein Ensemble stochastischer Differentialgleichungen zu finden, die entsprechend der Rolle der Schrödinger-Gleichung für abgeschlossene Systeme als Lösungen individuelle Zustände (sogenannte Quantentrajektorien) liefern.

Das stochastische Ensemble-Mittel solcher Zustände soll wiederum der Dichtematrix entsprechen. Dementsprechend stellt die Dichtematrix gewissermaßen eine deterministische Beschreibung der Wahrscheinlichkeitsverteilung der einzelnen, zufalls-beeinflußten Trajektorien dar, während hingegen die Quantentrajektorien das stochastische Verhalten individuell evolutionierender Zustände betonen.

Eine fundamentale Frage stellt sich bei den meisten Ansätzen zur Beschreibung offener Quantensysteme, nämlich die nach der Existenz eines einheitlichen quantenmechanischen Formalismus, der die Entstehung klassischer Zustände (i.e. statistischer Gemische) konsistent beschreibt, in der sozusagen die klassische Mechanik und die unitär sich zeitentwickelnde Quantentheorie abgeschlossener Systeme als Grenzfälle in Erscheinung treten[(Zurek,'91)].

Die ebenfalls weit entwickelte Theorie der "coherent histories" wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit nicht behandelt; es sei z.B. auf den zusammenfassenden Artikel von R.B. Griffiths und R. Omnés (G&O, '99) verwiesen.

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: Im Kapitel II werden wir eine kurze Einführung in den Formalismus der reduzierten Dichtematrix und der dem entsprechenden Mastergleichung liefern. Kapitel III präsentiert dann drei verschiedene Methoden, solche Mastergleichungen herzuleiten. In III.1) wird ein störungsrechnerischer Ansatz eingeführt, der unter gewissen Voraussetzungen zu sogenannten Umgebungs-Korrelationsfunktionen führt; diese Technik wird an einigen einfachen Beispielen ausgeführt.

In Kapitel II.2) leiten wir kurz die Projektions-Operator-Methode gemäß R. Zwanzig[(Zwzg,'60a)] her und lösen die Zeit-Faltung der dabei auftretenden Integro-Differential-Gleichung mittels Laplace-Transformation auf.

Den Begriff der dynamischen Halbgruppe, sowie das daraus resultierende Lindblad-Theorem behandeln wir in III.3); dabei untersuchen wir auch den Ansatz eines Artikels von Kossakowski et al.[(GKS,'76)], für endlich-dimensionale Systeme die Lindblad-Form der Mastergleichung herzuleiten, wobei wir allerdings nur eine schwächere Aussage als die allgemeingültige der Lindblad-Arbeit[(Lbld,'76)] erhalten. Für den endlich-dimensionalen Fall hermitescher Lindblad-Operatoren weisen wir den dissipativen Verlauf der Zeitentwicklung nach.
Hiernach findet eine kurze vergleichende Diskussion dieser drei Methoden zur Herleitung von Mastergleichungen statt.

In Kapitel IV wird das Konzept der Quantum State Diffusion vorgestellt und sowohl für lindblad'sche Mastergleichungen, als auch für ein neueres Modell von Strunz et al.[(DGS,'99),(YDGS,'99)], aus dem zeitlich nicht-lokale QSD-Gleichungen resultieren, angewendet. Dabei werden im letzteren Falle einige einfache Beispiele angeführt.

Beendet wird die Arbeit mit einer kurzen Zusammenfassung, die nochmals einen kritischen Vergleich der unterschiedlichen Methoden durchführt, sowie ein paar Ansätze für mögliche weitere Forschungsbemühungen aufweist.

II. Dynamik quantenmechanischer offener Systeme:

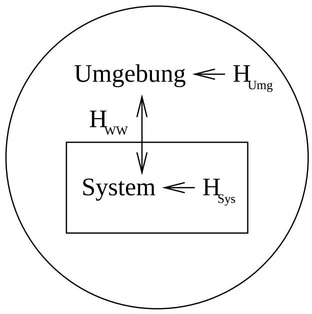
Für abgeschlossene quantenmechanische Systeme ist mit der Angabe eines entsprechenden Hamiltonian $\hat{H}_0$ und der daraus zu bestimmenden Basis von Eigenfunktionen das Problem der Zeitentwicklung mittels Schrödinger-Gleichung im wesentlichen gelöst. Beliebige Anfangszustände ψ_0 unterliegen einer unitären 1-parametrigen Transformations-Gruppe $\hat{U}_t$ $(t \in \mathbb{R})^*$:

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \hat{U}_t \psi_0 \\ &:= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\psi_0 \end{aligned} \tag{1}$$

Dieses formal sehr einfache Verhalten ändert sich jedoch erheblich, wenn man zu sogenannten offenen quantenmechanischen Systemen übergeht, d.h. Situationen, in denen man nicht alle Faktoren eines in einer übergeordneten Gesamtheit abgeschlossenen Systems berücksichtigen möchte oder kann.

Dabei kann es sich um sogenannte äußere Einflüsse einer vom betrachteten System räumlich getrennten Umgebung handeln, oder auch um innere Freiheitsgrade, die untrennbar mit dem physikalischen Objekt verbunden sein mögen, aber jeweils aus Gründen der Vereinfachung oder Unmöglichkeit nicht in der experimentellen oder theoretischen Analyse berücksichtigt werden†. Erst hier treten die besonders interessanten Effekte irreversiblen Verhaltens auf.

Das zugrundeliegende Postulat für eine weitere quantenmechanische Behandlung dieser offenen Systeme besteht in der Annahme, daß es eine (in konkreten Fällen näher zu erläuternde) Umgebung (genannt **R**) gibt, die mit dem eigentlich zu untersuchenden (Teil)System **S** ein abgeschlossenes, sich unitär zeitentwickelndes Quantensystem bildet:



Dabei bezeichne H_{Umg} den von den Umgebungsvariablen, H_{Sys} den von den Systemvariablen, sowie H_{WW} den koppelnden, von beiderlei Variablen abhängigen Hamiltonian.

---

*: Dies gilt natürlich nur im Schrödingerbild, das wir zukünftig benutzen wollen, soweit nicht anders angegeben.

†: Mit dem Begriff "Umgebung" werden wir desweiteren beide Arten nicht-miteinbezogener Freiheitsgrade bezeichnen.

Die Zeitentwicklung des Gesamtsystems ergibt sich damit gemäß Gleichung (1) mit dem totalen Hamiltonian:

$$\hat{H}_{tot} \quad = \quad \hat{H}_{Sys} + \hat{H}_{Umg} + \hat{H}_{WW} \tag{2}$$

$\hat{H}_{tot}$ operiert dabei auf dem Tensorprodukt der beiden zugrundeliegenden Hilbert-Zustands-Räume: $\mathscr{H}_{tot} := \mathscr{H}_{Sys} \otimes \mathscr{H}_{Umg}$.

Da wir uns insbesondere dafür interessieren, den Übergang von reinen quantenmechanischen Zuständen zu sogenannten gemischten Zuständen (d.h. klassisch statistischen Gemischen) zu beschreiben, stellt sich als natürlicher Begriff zur Beschreibung solcher Prozesse die Dichtematrix (bzw. der Dichteoperator) heraus (siehe: (C-T, '97))‡.

Setzen wir eine (der Einfachheit halber erstmal diskret angenommene) Orthonormal-Basis $|\epsilon_j\rangle$ der Umgebungs-Zustände und $|\sigma_k\rangle$ der System-Zustände an, so ergibt sich die Gesamt-System-Dichtematrix ρ_{tot} zu:

$$\rho_{tot}(t) \quad = \quad \sum_{j,k,l,m} |\epsilon_j\rangle|\sigma_k\rangle c_{j,k,l,m}(t)\langle\sigma_l|\langle\epsilon_m| \tag{3}$$

Analog zur Schrödinger-Gleichung erhalten wir für die totale Dichtematrix eines abgeschlossenen Systems die **Liouville-/von Neumann-Gleichung**:

$$\dot{\rho}_{tot}(t) \quad = \quad -\frac{i}{\hbar}\big[\hat{H}_{tot}, \rho_{tot}(t)\big] \tag{4}$$

Deren formale Lösung für das Gesamtsystem kann analog zur Gleichung (1) unitär entwickelt werden zu:

$$\rho_{tot}(t) \quad = \quad e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{tot}t}\rho_{tot}(0)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{tot}t} \tag{5}$$

Dennoch wollen oder können wir im allgemeinen die Lösung des Gesamtsystemes nicht bestimmen, sei es aus Unkenntnis über die genauen Vorgänge der Umgebung oder weil die Berücksichtigung der zusätzlichen Freiheitsgrade den quantitativen oder qualitativen Rahmen unserer Untersuchungen sprengen würde. Stattdessen wollen wir uns auf die uns wichtigen Aspekte beschränken, die dynamischen Vorgänge des Systems **S**. Dabei interessieren uns nur die physikalischen Größen, die im direkten Zusammenhang mit **S** bestimmt (i.e. gemessen) werden können, d.h. solche Observablen, bzw. deren Erwartungswerte, die nur von den System-Variablen abhängig sind.

Für solche systemeigene Operatoren: $\hat{O} : \mathscr{H}_{Sys} \to \mathscr{H}_{Sys}$ berechnen sich die Erwartungswerte zu:

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{O} \right\rangle_t &= tr_{tot}\big\{\big(\hat{O} \otimes \mathbb{1}_{Umg}\big)\rho_{tot}(t)\big\} \\ &= \sum_{j,k} \langle\sigma_k|\langle\epsilon_j|\big(\hat{O} \otimes \mathbb{1}_{Umg}\big)\rho_{tot}(t)|\epsilon_j\rangle|\sigma_k\rangle \end{aligned}$$

‡: In Kapitel III werden wir einen weiteren, durch die Methode der stochastischen Differentialgleichungen motivierten Formalismus kennenlernen.

$$
\begin{aligned}
&= \sum_k \langle \sigma_k | \hat{O} \rho_{Sys}(t) | \sigma_k \rangle \\
&= tr_{Sys}\{\hat{O}\rho_{Sys}(t)\} \qquad (6)
\end{aligned}
$$

mit: $\mathbb{1}_{Umg}$ dem Einheits-Operator auf $\mathscr{H}_{Umg}$.

Offenbar genügt zur Untersuchung dieser Erwartungswerte die Bestimmung der reduzierten Dichtematrix ρ_{Sys}:

$$
\begin{aligned}
\rho_{Sys}(t) &:= tr_{Umg}\{\rho_{tot}(t)\} \qquad (7) \\
&= \sum_j \langle \epsilon_j | \rho_{tot}(t) | \epsilon_j \rangle
\end{aligned}
$$

In der Praxis wird die reduzierte Dichtematrix aus oben benannten Gründen natürlich nicht durch Spurbildung über die Umgebung(svariablen) nach Lösung des Gesamtproblems errechnet.

Stattdessen konzentrieren sich die meisten Anstrengungen darauf, mittels geeigneter Annahmen und Abschätzungen aus der ursprünglichen Liouville-Gleichung (4) eine Differentialgleichung für die reduzierte Dichtematrix herzuleiten, die sogenannte Master-Gleichung.
Dabei setzen die meisten Untersuchungen einen reinen Anfangszustand voraus (d.h. $\rho_{Sys}(0) = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$), sowie eine Umgebung, deren physikalische Ausmaße die Einflußnahme des Systems gegenüber der Umgebung vernachlässigbar gering werden lassen (z.B. thermodynamisches Wärmebad). Dementsprechend befinden sich in solchen Fällen die Umgebungs-Dichtematrizen in einem stationären Zustand (z.B. statistisches Gemisch).

Die numerischen oder analytischen Lösungen dieser Master-Gleichungen zeigen dann (je nach zugrundeliegenden Modellen) das typisch irreversible Verhalten, bei dem meist das System einen statistisch gemischten Endzustand einnimmt, dessen Eigenschaften durch den Zustand der Umgebung (d.h. ρ_{Umg}) festgelegt ist.

III. Methoden zur Herleitung von Mastergleichungen:

Wir wollen im Folgenden drei unterschiedliche Techniken untersuchen, Mastergleichungen für die reduzierte Dichtematrix herzuleiten; dabei beginnen wir mit einer häufig angewandten Zugangsweise, der mit spezifischen approximativen Annahmen eine Störungsentwicklung in $\hat{H}_{WW}$ nach Born'schem Vorbild benutzt. Dieser in seiner Gültigkeit stark eingeschränkte Ansatz hat den Vorteil, für entsprechend vereinfachte Modelle schnell Ergebnisse oder zumindest numerisch leicht zur berechnende Differentialgleichungen für ρ_{Sys} zu liefern.

Mit dem Projektions-Operator-Formalismus lernen wir eine bereits von Feshbach entwickelte Methode kennen, eine Reduktion des totalen, abgeschlossenen Problems auf einen "wesentlichen Bereich" unseres Interesse mittels sogenannter Projektions-Operatoren durchzuführen. Dabei erhält man zunächst eine exakte Umformung der totalen Liouville-Gleichung in eine Mastergleichung, bei der die diffusiven Umgebungs-Einflüsse in einem zeitabhängigen Funktional über ρ_{Sys} verschlüsselt sind.

Ein weiterer Ansatz orientiert sich an den zugrundeliegenden mathematischen Mindestanforderungen eines (physikalisch sinnvollen) Prozesses und leitet daraus die sogenannte Lindblad-Form der Mastergleichung her. Diese Methode stellt den exakten und abstraktesten Zugang dar, die Struktur einer Mastergleichung zu bestimmen, liefert allerdings nicht explicit eine Herleitung der sogenannten Lindblad-Operatoren aus gegebenen System-, Umgebungs- und Wechselwirkungs-Hamiltonian.

1) In Born'scher Näherung mittels Umgebungs-Korrelationsfunktionen:

Die folgende Abhandlung basiert auf der Liouville'schen Entwicklung gemäß Gleichung (2) und (4); dabei wird von dem vielzitierten Fall ausgegangen, daß sich die Umgebung **R** in einem Gleichgewichtszustand befindet, der keinen spürbaren Einfluß durch den jeweiligen Zustand des "wesentlich kleineren" Systems **S** erleidet.
Die Herleitung ist hauptsächlich einer Vorlesung von H. Carmichael$^{(Cml,'93)}$ entnommen.

Zentraler Ansatz hierbei ist der Versuch einer Störungsentwicklung bezüglich des Kopplungshamiltonian $\hat{H}_{WW}$. Mit der in Gleichung (2) angegebenen Notation führen wir hierzu einen Wechsel in das Wechselwirkungsbild bezüglich $\hat{H}_{Sys} + \hat{H}_{Umg}$ durch:

$$\rho^I_{tot}(t) = e^{i/\hbar(\hat{H}_{Sys}+\hat{H}_{Umg})t} \rho_{tot}(t) e^{-i/\hbar(\hat{H}_{Sys}+\hat{H}_{Umg})t} \tag{8}$$

Anschaulich begründet sich dies in der wesentlich rapideren Zeitentwicklung der (in der Regel "stärkeren") Einflüsse von $\hat{H}_{Sys} + \hat{H}_{Umg}$.

Aus der Liouville-Gleichung (4) folgt dabei:

$$\dot{\rho}^I_{tot}(t) \;=\; -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}^I_{WW}(t), \rho^I_{tot}(t)] \tag{9}$$

woraus sich durch formales Integrieren ergibt:

$$\rho^I_{tot}(t) \;=\; \rho^I_{tot}(0) - \frac{i}{\hbar}\int_0^t [\hat{H}^I_{WW}(t'), \rho^I_{tot}(t')]\, dt' \tag{10}$$

Substitution von Gleichung (10) in (9) ergibt:

$$\dot{\rho}^I_{tot}(t) \;=\; -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}^I_{WW}(t), \rho^I_{tot}(0)] - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t [\hat{H}^I_{WW}(t), [\hat{H}^I_{WW}(t'), \rho^I_{tot}(t')]]\, dt' \tag{11}$$

<u>1.1 Ansatz faktorisierender Anfangsbedingungen:</u>

Wir gehen aus von faktorisierenden Anfangszuständen:

$$\rho_{tot}(0) \;=\; \rho_{Sys}(0) \otimes \rho_{Umg} \tag{12}$$

wobei wir desweiteren annehmen, daß sich die Umgebung anfänglich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet, d.h. es gelte (mit $\beta := (k_B T)^{-1}$):

$$\rho_{Umg} \;:=\; \frac{e^{-\beta \hat{H}_{Umg}}}{tr_{Umg}\{e^{-\beta \hat{H}_{Umg}}\}} \tag{13}$$

An dieser Stelle setzt Carmichael$^{(Cml,'93)}$ folgende vereinfachende Annahme an:

$$tr_{Umg}\{[\hat{H}^I_{WW}(t), \rho^I_{tot}(0)]\} \;=\; 0 \tag{14}$$

die er darauf begründet, daß der ursprüngliche System-Hamiltonian $\hat{H}_{Sys}$ um den im allgemeinen nicht-verschwindenden Anteil $tr_{Umg}\{\hat{H}_{WW}\rho_{Umg}\}$ "korrigiert" werden könne.
Wir werden diese Voraussetzung bei unseren späteren Beispielen überprüfen und dabei feststellen, daß diese i.a. nicht zutrifft.
Mit diesen sehr einschneidenden Annahmen (12)-(14) erhalten wir:

$$\dot{\rho}^I_{Sys}(t) \;=\; -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t tr_{Umg}\Big\{[\hat{H}^I_{WW}(t), [\hat{H}^I_{WW}(t'), \rho^I_{tot}(t')]]\Big\}\, dt' \tag{15}$$

<u>1.2 Born'sche Approximation:</u>

Korrelationen zwischen **S** und **R** treten für $t > 0$ durch den Einfluß von $\hat{H}_{WW}$ auf; für den benannten Fall einer "großen" Umgebung, deren Gleichgewichtszustand unbeeinflußt durch das System bleiben sollte, nehmen wir für die Zeitentwicklung an:

$$\rho^I_{tot}(t) \;=\; \rho^I_{Sys}(t) \otimes \rho_{Umg} + \mathcal{O}(\hat{H}^2_{WW}) \tag{16}$$

Dabei erwarten wir in Born'scher Näherung nur Einflüsse kleinerer Ordnungen in $\hat{H}_{WW}$ und vernachlässigen dementsprechend in unserer Mastergleichung (15) Terme in $\hat{H}_{WW}$ von Ordnung größer als 2.

Es folgt:

$$\dot{\rho}^I_{Sys}(t) \simeq -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t tr_{Umg}\left\{\left[\hat{H}^I_{WW}(t),\left[\hat{H}^I_{WW}(t'),\rho^I_{Sys}(t')\otimes\rho_{Umg}\right]\right]\right\}\,dt' \quad (17)$$

Zu beachten ist, daß hierbei immer noch das Verhalten der System-Dichtematrix ρ_{Sys} für frühere Zeiten eingeht, d.h. daß es sich der äußeren Form nach nicht um eine sogenannte "markov'sche" Differentialgleichung (i.e. lokal in der Zeitvariablen) handelt.

Wir nehmen jetzt an, die System-Umgebungs-Kopplung trete in gewohnter polynomialer Form auf:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{WW} &= \sum_k s_k \otimes \Gamma_k \\ &=: \sum_k s_k\Gamma_k \end{aligned} \quad (18)$$

Wobei s_k von den Systemvariablen, Γ_k von den Umgebungsvariablen abhängt, d.h. aus den entsprechenden Erzeuger-/Vernichter-Operatoren zusammengesetzt ist.
Für die meisten "praktischen" Beispiele wird eine solche Form gewählt, möglicherweise verallgemeinert auf ein Integral über eine kontinuierliche Indexmenge.

Da die s_k auf dem System-Hilbertraum $\mathscr{H}_{sys}$, die Γ_k auf dem Umgebungs-Hilbertraum $\mathscr{H}_R$ operieren, ergibt sich offenbar entsprechende Wechselwirkungs-Bild-Zeitentwicklung:

$$\hat{H}^I_{WW}(t) = \sum_k s^I_k(t)\Gamma^I_k(t) \quad (19)$$

mit:

$$\begin{aligned} s^I_k(t) &= e^{i/\hbar \hat{H}_{Sys}t}s_k e^{-i/\hbar \hat{H}_{Sys}t} \\ \Gamma^I_k(t) &= e^{i/\hbar \hat{H}_{Umg}t}\Gamma_k e^{-i/\hbar \hat{H}_{Umg}t} \end{aligned} \quad (20)$$

Vertauschbarkeit aller auftretenden Summen und Integrale, sowie die zyklische Permutationsinvarianz der Spur bezüglich der Γ_k vorausgesetzt, ergibt sich für unsere Mastergleichung (15) mittels der oben getroffenen approximativen Annahmen:

$$\dot\rho^I_{Sys}(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t \sum_{k,l} tr_{Umg}\Big\{\Big[s^I_k(t)\Gamma^I_k(t),\big[s^I_l(t')\Gamma^I_l(t'),\rho^I_{Sys}(t')\otimes\rho_{Umg}\big]\Big]\Big\}\,dt'$$

$$= -\tfrac{1}{\hbar^2}\textstyle\int_0^t \sum_{k,l}\big[s^I_k(t)s^I_l(t')\rho^I_{Sys}(t') - s^I_l(t')\rho^I_{Sys}(t')s^I_k(t)\big]\Big\langle\Gamma^I_k(t)\Gamma^I_l(t')\Big\rangle_{Umg}$$

$$+\big[\rho^I_{Sys}(t')s^I_l(t')s^I_k(t) - s^I_k(t)\rho^I_{Sys}(t')s^I_l(t')\big]\Big\langle\Gamma^I_l(t')\Gamma^I_k(t)\Big\rangle_{Umg}\,dt' \quad (21)$$

Dabei sind die sogenannten Korrelationsfunktionen als (Umgebungs-)Erwartungswerte der entsprechenden Operator-Produkte wie folgt definiert:

$$\Big\langle\Gamma^I_k(t)\Gamma^I_l(t')\Big\rangle_{Umg} \;:=\; tr_{Umg}\{\Gamma^I_k(t)\Gamma^I_l(t')\rho_{Umg}\} \quad (22)$$

1.3 Zur Frage des zeitlichen Verhaltens der Korrelationsfunktionen:

Der zeitabhängige Einfluß der Umgebung ist in unserer letzten Fassung (21) der Mastergleichung offenbar auf die Berechnung der dort auftretenden Korrelationsfaktoren: $\Big\langle\Gamma^I_k(t)\Gamma^I_l(t')\Big\rangle_{Umg}$ zurückgeführt worden.
Wie man leicht sieht, hängen bei expliciter Zeitunabhängigkeit der Kopplungsfaktoren Γ_k diese Korrelationsfunktionen für unseren Fall einer Umgebung im thermischen Gleichgewicht (Gleichung (9)) nur noch von der Zeitdifferenz $(t'-t)$ ab.
Für zahlreiche Fälle, bei denen die Dynamik des Systems auf wesentlich größeren Zeitskalen verläuft als die typischen Zeit-Dimensionen, in denen die Umgebung ihr Gleichgewicht einnimmt (d.h. bildlich gesprochen eine rapide diffusive "Vergeßlichkeit" der Umgebung auftritt), wird die sogenannte "markov'sche" Approximation angesetzt, d.h.:

$$\Big\langle\Gamma^I_k(t)\Gamma^I_l(t')\Big\rangle_{Umg} \sim \delta(t-t') \quad (23)$$

Womit unsere korrelationsfaktorisierte Mastergleichung (17) offenbar eine "markov'sche" Form annimmt[%]:

$$\dot\rho^I_{Sys}(t) \;=\; -\frac{i}{\hbar}\sum_{k,l}\big[s^I_k(t)s^I_l(t)\rho^I_{Sys}(t) - s^I_l(t)\rho^I_{Sys}(t)s^I_k(t)\big]\Big\langle\Gamma_k\Gamma_l\Big\rangle_{Umg}$$

$$+\big[\rho^I_{Sys}(t)s^I_l(t)s^I_k(t) - s^I_k(t)\rho^I_{Sys}(t)s^I_l(t)\big]\Big\langle\Gamma_l\Gamma_k\Big\rangle_{Umg} \quad (24)$$

[%]: Setzt man an dieser Stelle noch für Gl. (23) eine Proportionalität mit $\delta_{k,l}$ an, so erhält man offenbar eine Mastergleichung in Lindbladform (siehe Gl. (81)).

1.4 Berechnung einfacher Korrelationsfunktionen:

Wir betrachten desweiteren als Umgebung ein Ensemble voneinander unabhängiger harmonischer Oszillatoren:

$$\hat{H}_{Umg} := \hbar \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k \tag{25}$$

Mit den üblichen Kommutatorrelationen folgt:

$$e^{\lambda b_k^\dagger b_k} b_k^{(\dagger)} \quad = \quad e^{\mp\lambda} b_k^{(\dagger)} e^{\lambda b_k^\dagger b_k} |n_k > \tag{26}$$

Damit folgt mit den üblichen Zeitentwicklungs-Operatoren:

$$U_j(t) := e^{i/\hbar H_j t} \qquad j \in \{Sys, Umg, WW\} \tag{27}$$

für bosonische Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren im Heisenbergbild:

$$\begin{aligned} b_k^I(t) &= U_{Umg}(t) b_k U_{Umg}(-t) \\ &= e^{-i\omega_k t} b_k U_{Umg}(t) U_{Umg}(-t) \\ &= e^{-i\omega_k t} b_k \end{aligned} \tag{28}$$

entsprechend:

$$b_k^{I\dagger}(t) \quad = \quad e^{i\omega_k t} b_k^\dagger \tag{29}$$

Damit können wir jetzt direkt für den einfachsten Fall die Korrelationsfunktionen berechnen:

$$\begin{aligned} \left\langle b_k^I(t) b_l^{I(\dagger)}(t') \right\rangle_{Umg} &= e^{-i\omega_k(t'-t)} tr_{Umg}\{b_k b_l^{(\dagger)} \rho_{Umg}\} \\ &= e^{-i\omega_k(t'-t)} \delta_{k,l} \delta_{(\dagger),\dagger} \left(\langle \hat{n}_k \rangle_{Umg} + 1 \right) \end{aligned} \tag{30}$$

und

$$\left\langle b_k^{I(\dagger)}(t) b_l^I(t') \right\rangle_{Umg} \quad = \quad e^{i\omega_k(t'-t)} \delta_{k,l} \delta_{(\dagger),\dagger} \langle \hat{n}_k \rangle_{Umg} \tag{31}$$

Wegen der Bilinearität der Korrelationsfunktionen läßt sich dieses Ergebnis mit Leichtigkeit auf folgende Umgebungs-Kopplungs-Operatoren, linear in den Erzeugern & Vernichtern, verallgemeinern:

$$\Gamma := \sum_k c_k b_k \tag{32}$$

zu:

$$\left\langle \Gamma^I(t) \Gamma^{I\dagger}(t') \right\rangle_{Umg} \quad = \quad \sum_k |c_k|^2 e^{-i\omega_k(t-t')} \left(\langle \hat{n}_k \rangle_{Umg} + 1 \right) \tag{33}$$

bzw.

$$\left\langle \Gamma^{I\dagger}(t) \Gamma^I(t') \right\rangle_{Umg} \quad = \quad \sum_k |c_k|^2 e^{i\omega_k(t-t')} \left(\langle \hat{n}_k \rangle_{Umg} \right) \tag{34}$$

Der noch offenstehende Term: $\left\langle \hat{n}_k \right\rangle_{Umg}$ errechnet sich für unseren Fall (9) des thermischen Gleichgewichtes wie folgt:

$$
\begin{aligned}
\left\langle \hat{n}_k \right\rangle_{Umg} &= tr_{Umg}\left\{ \hat{n}_k \frac{e^{-\beta \sum_l \omega_l \hat{n}_l}}{tr_{Umg}\{e^{-\beta \sum_l \omega_l \hat{n}_l}\}} \right\} \\
&= \frac{\sum_{|n_j>} < n_j|\hat{n}_k e^{-\beta\omega_k \hat{n}_k} \prod_{l\neq k} e^{-\beta\omega_l \hat{n}_l}|n_j >}{\sum_{|n_j>} < n_j|e^{-\beta\omega_k \hat{n}_k} \prod_{l\neq k} e^{-\beta\omega_l \hat{n}_l}|n_j >} \\
&= \frac{e^{-\beta\omega_k}}{1-e^{-\beta\omega_k}} \qquad (35)
\end{aligned}
$$

Den letzten Schritt erhält man aus der induktiv beweisbaren Identität: $\sum_k kq^k = \frac{q}{(1-q)^2}$, sowie dem bekannten Limes der geometrischen Reihe.

Aus der direkten Vertauschbarkeit von Zeitentwicklungsoperatoren und den Teilchenzahl-Operatoren resultiert offenbar:

$$
\left\langle \hat{n}_k^I(t)\hat{n}_l^I(t') \right\rangle_{Umg} = \left\langle \hat{n}_k \hat{n}_l \right\rangle_{Umg} \qquad (36)
$$

woraus sich analog ergibt:

$$
\begin{aligned}
\left\langle \hat{n}_k \hat{n}_l \right\rangle_{Umg} &= \frac{\sum_{(n_j)_k} (n_j)_k e^{-\beta\omega_k (n_j)_k} \sum_{(n_j)_l} (n_j)_l e^{-\beta\omega_k (n_j)_l}}{\sum_{(n_j)_k} e^{-\beta\omega_k (n_j)_k} \sum_{(n_j)_l} e^{-\beta\omega_k (n_j)_l}} \\
&= \frac{e^{-\beta\omega_k} \qquad e^{-\beta\omega_l}}{(1-e^{-\beta\omega_k})(1-e^{-\beta\omega_l})} \qquad (37)
\end{aligned}
$$

1.5 Beispiele unterschiedlicher Kopplungsformen:

Wir versuchen anhand einiger exemplarischer Kopplungs-Hamiltonian im Erzeuger-/Vernichter-Formalismus einen Einblick in das Verhalten der entsprechenden Mastergleichung, respektive zugehöriger reduzierter Dichtematrizen zu bekommen.

Dabei beschränken wir uns der Übersichtlichkeit halber auf einen einzelnen harmonischen Oszillator als Umgebung $\hat{H}_{Umg} = \hbar\omega_{Umg} b^\dagger b$ und erwähnen hier nur, daß die Verallgemeinerung auf Ensembles voneinander unabhängiger Oszillatoren wegen der Bilinearität der Korrelationsfunktionen keine größeren Probleme bereiten sollte.

i) $\hat{H}_{WW} = \lambda(ab^\dagger + a^\dagger b)$:

Dieser Ausdruck liefert keine Wechselwirkung im üblichen Sinne (d.h. von einer Ordnung in Erzeugern/Vernichtern von größer als 2), sondern eine Verschränkung zwischen System und Umgebung.

Zunächst wollen wir die Nebenbedingung (14) für diesen einfachen Fall der Kopplung überprüfen; dabei gilt unter Anwendung von Gleichung (28) und (29):

$$\hat{H}^I_{WW}(t) \;=\; \lambda\big(e^{i(\omega_{Umg}-\omega_{Sys})t} ab^\dagger + e^{-i(\omega_{Umg}-\omega_{Sys})t} a^\dagger b\big) \tag{38}$$

wobei mit (13) folgt:

$$\begin{aligned}
tr_{Umg}\big\{\big[\hat{H}^I_{WW}(t), \rho^I_{tot}(0)\big]\big\} \;&=\; \lambda \sum_{|j\rangle} \langle j|\big[\hat{H}^I_{WW}(t), \rho^I_{tot}(0)\big]|j\rangle \\
= \;& \lambda \frac{e^{i(\omega_{Umg}-\omega_{Sys})t}}{tr_{Umg}\{e^{-\beta \hat{H}_{Umg}}\}} \times \\
& \times \sum_{|j\rangle} \big(a\rho_{Sys}(0) \cdot \langle j|b^\dagger e^{-\beta \hat{H}_{Umg}}|j\rangle - \rho_{Sys}(0)a \cdot \langle j|e^{-\beta \hat{H}_{Umg}} b^\dagger|j\rangle\big) \\
+ \;& \lambda \frac{e^{-i(\omega_{Umg}-\omega_{Sys})t}}{tr_{Umg}\{e^{-\beta \hat{H}_{Umg}}\}} \times \\
& \times \sum_{|j\rangle} \big(a^\dagger \rho_{Sys}(0) \cdot \langle j|b e^{-\beta \hat{H}_{Umg}}|j\rangle - \rho_{Sys}(0)a^\dagger \cdot \langle j|e^{-\beta \hat{H}_{Umg}} b|j\rangle\big) \\
= \;& \lambda \frac{e^{i(\omega_{Umg}-\omega_{Sys})t}}{tr_{Umg}\{e^{-\beta \hat{H}_{Umg}}\}} \sum_{|j\rangle} e^{-\beta\hbar\omega_{Umg} j} \underbrace{\langle j|b^\dagger|j\rangle}_{=0} \big(a\rho_{Sys}(0) - \rho_{Sys}(0)a\big) \\
+ \;& \lambda \frac{e^{-i(\omega_{Umg}-\omega_{Sys})t}}{tr_{Umg}\{e^{-\beta \hat{H}_{Umg}}\}} \sum_{|j\rangle} e^{-\beta\hbar\omega_{Umg} j} \underbrace{\langle j|b|j\rangle}_{=0} \big(a^\dagger \rho_{Sys}(0) - \rho_{Sys}(0)a^\dagger\big)
\end{aligned} \tag{39}$$

womit sich für dieses Beispiel Annahme (14) bestätigt.

Mittels Gleichungen (21), (31)-(34) erhalten wir:

$$
\begin{aligned}
\dot{\rho}^I_{Sys}(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t & \left[a(t)a^\dagger(t')\rho^I_{Sys}(t') - a^\dagger(t')\rho^I_{Sys}(t')a(t)\right]\left\langle b^\dagger(t)b(t')\right\rangle_{Umg} \\
& +\left[\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger(t')a(t) - a(t)\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger(t')\right]\left\langle b(t')b^\dagger(t)\right\rangle_{Umg} \\
& +\left[a^\dagger(t)a(t')\rho^I_{Sys}(t') - a(t')\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger(t)\right]\left\langle b(t)b^\dagger(t')\right\rangle_{Umg} \\
& +\left[\rho^I_{Sys}(t')a(t')a^\dagger(t) - a^\dagger(t)\rho^I_{Sys}(t')a(t')\right]\left\langle b^\dagger(t')b(t)\right\rangle_{Umg} dt' \\
= -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t & e^{i(\omega_{Sys}-\omega_{Umg})(t'-t)}\Big[\left[aa^\dagger\rho^I_{Sys}(t') - a^\dagger\rho^I_{Sys}(t')a\right]\langle\hat{n}\rangle_{Umg} \\
& +\left[\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger a - a\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger\right]\left(\langle\hat{n}\rangle_{Umg}+1\right)\Big] \\
& +e^{-i(\omega_{Sys}-\omega_{Umg})(t'-t)}\Big[\left[a^\dagger a\rho^I_{Sys}(t') - a\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger\right]\left(\langle\hat{n}\rangle_{Umg}+1\right) \\
& +\left[\rho^I_{Sys}(t')aa^\dagger - a^\dagger\rho^I_{Sys}(t')a\right]\langle\hat{n}\rangle_{Umg}\Big] dt'
\end{aligned}
\tag{40}
$$

Betrachten wir einzelne Matrixelemente bezüglich der Basis der Teilchenzahl-Eigenzustände des Systems, so ergibt sich:

$$
\begin{aligned}
\dot{\rho}^I_{m,n}(t) \;&:=\; < m|\dot{\rho}^I_{Sys}(t)|n > \qquad (41)\\
= -\tfrac{1}{\hbar^2}\int_0^t & e^{i(\omega_{Sys}-\omega_{Umg})(t'-t)}\Big[\left[(m+1)\rho^I_{m,n}(t') - \sqrt{mn}\rho^I_{m-1,n-1}(t')\right]\langle\hat{n}\rangle_{Umg} \\
& +\left[n\rho^I_{m,n}(t') - \sqrt{(m+1)(n+1)}\rho^I_{m+1,n+1}(t')\right]\left(\langle\hat{n}\rangle_{Umg}+1\right)\Big] \\
& +e^{-i(\omega_{Sys}-\omega_{Umg})(t'-t)}\Big[\left[m\rho^I_{m,n}(t') - \sqrt{(m+1)(n+1)}\rho^I_{m+1,n+1}(t')\right]\times \\
& \times\left(\langle\hat{n}\rangle_{Umg}+1\right) + \left[(n+1)\rho^I_{m,n}(t') - \sqrt{mn}\rho^I_{m-1,n-1}(t')\right]\langle\hat{n}\rangle_{Umg}\Big] dt'
\end{aligned}
$$

Auf den ersten Blick fällt hierbei auf, daß für einen gegebenen Teilchenzahl-Eigenzustand als reiner Anfangszustand bei der Zeitentwicklung nur Diagonal-Terme der Dichtematrix involviert werden; Nichtdiagonal-Elemente bleiben offenbar unbeteiligt. Unter dieser Kopplung zerfällt also ein System-Teilchenzahl-Eigenzustand in ein statistisches Gemisch solcher Eigenzustände.

Desweiteren können wir für reine Teilchenzahl-Anfangszustände:

$$\rho_{Sys}(0) := |k_0\rangle\langle k_0| \tag{42}$$

noch gemäß Gl. (38) die thermischen Grenzfälle $T = 0$ und $T \to \infty$ betrachten; dabei gilt in unserem Fall kanonischer Kalkulation für die mittlere Bosonen-Zahl der Umgebung:

$$\langle\hat{n}\rangle_{Umg} \overset{T\to 0}{=} 0 \tag{43}$$

$$\langle\hat{n}\rangle_{Umg} \overset{T\to\infty}{\simeq} \infty \tag{44}$$

Für $T \to 0$ folgt aus der obigen Mastergleichung:

$$\dot{\rho}^I_{k,k}(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t 2cos[(\omega_{Sys}-\omega_{Umg})(t'-t)]\big(k\rho^I_{k,k}(t')-(k+1)\rho^I_{k+1,k+1}(t')\big)\,dt' \tag{45}$$

woraus direkt ersichtlich wird, daß nur Diagonalterme $\rho_{k,k}(t)$ integrativ nichtverschwindende Anteile bei der Zeitentwicklung bilden können, falls $k \le k_0$ gilt, die anderen Diagonalterme (wie auch schon die nichtdiagonalen) treten im Tieftemperatur-Limes nicht auf.

Im Falle $T \gg 0$ ergibt sich für die Mastergleichung:

$$\begin{aligned}\dot{\rho}^I_{k,k}(t) &= -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t 2cos[(\omega_{Sys}-\omega_{Umg})(t'-t)] \\ &\quad \big[(2k+1)\rho^I_{k,k}(t')-(k+1)\rho^I_{k+1,k+1}(t')-k\rho^I_{k-1,k-1}(t')\big]\,dt'\end{aligned} \tag{46}$$

d.h. alle Diagonalterme werden im Verlauf der Zeit einen integrativen Anteil von dem Startzustand aufnehmen.

Genauere Aussagen über den qualitativen wie quantitativen Verlauf des Zustandszerfalles (der offenbar wegen der fehlenden Nicht-Diagonalterme in ein statistisches Gemisch mündet) lassen sich an dieser Stelle entweder aus numerischen Untersuchungen oder möglicherweise aus einer analytischen Behandlung der gekoppelten Integro-Differential-Gleichungen treffen.

ii) $\hat{H}_{WW} = \lambda_\pm(a^\dagger \pm a)b^\dagger b$:

Hierbei steht die Summe der System-Erzeuger/Vernichter offenbar für eine orts-, die Differenz für eine impuls-sensitive Kopplung des Systems an seine Umgebung; um Hermitizität zu gewährleisten gilt für die Kopplungskonstante $\lambda_+ \in \mathbb{R}$, respektive $\lambda_- \in i\mathbb{R}$.

Auch hier wollen wir Bedingung (14) untersuchen:

$$\hat{H}^I_{WW}(t) = \lambda_\pm\big(e^{i\omega_{Sys}t}a^\dagger b^\dagger b \pm e^{-i\omega_{Sys}t}ab^\dagger b\big) \tag{47}$$

so daß:

$$\begin{aligned} tr_{Umg}\big\{[\hat{H}^I_{WW}(t),\rho^I_{tot}(0)]\big\} &= \sum_{|j\rangle}\langle j|[\hat{H}^I_{WW}(t),\rho^I_{tot}(0)]|j\rangle \\ &= \lambda_\pm e^{i\omega_{Sys}t}\sum_{|j\rangle}\big(a^\dagger\rho_{Sys}(0)\cdot\langle j|b^\dagger b\rho_{Umg}|j\rangle - \rho_{Sys}(0)a^\dagger\cdot\langle j|\rho_{Umg}b^\dagger b|j\rangle\big) \\ &\quad \pm \lambda_\pm e^{-i\omega_{Sys}t}\sum_{|j\rangle}\big(a\rho_{Sys}(0)\cdot\langle j|b^\dagger b\rho_{Umg}|j\rangle - \rho_{Sys}(0)a\cdot\langle j|\rho_{Umg}b^\dagger b|j\rangle\big) \\ &= \lambda_\pm\langle\hat{n}\rangle_{Umg}\Big[e^{i\omega_{Sys}t}\big(a^\dagger\rho_{Sys}(0)-\rho_{Sys}(0)a^\dagger\big) \\ &\quad \pm e^{-i\omega_{Sys}t}\big(a\rho_{Sys}(0)-\rho_{Sys}(0)a\big)\Big]\end{aligned} \tag{48}$$

So bestätigt sich die ursprüngliche Annahme (14) für diesen Fall nicht, und wir müssen diesen ersten vom System-Anfangszustand abhängigen Anteil in unserer folgenden Herleitung der Mastergleichung berücksichtigen.

Damit erhalten wir als Mastergleichung in Born'scher Approximation:

$$
\begin{aligned}
\dot\rho^I_{Sys}(t) \;=\; & -\frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat n\rangle_{Umg}\Big[e^{i\omega_{Sys}t}\big(a^\dagger\rho_{Sys}(0)-\rho_{Sys}(0)a^\dagger\big) \\
& \qquad \pm e^{-i\omega_{Sys}t}\big(a\rho_{Sys}(0)-\rho_{Sys}(0)a\big)\Big] \\
& -\frac{\lambda_\pm^2}{\hbar^2}\int_0^t dt'\Big\{\big[a^\dagger(t)a^\dagger(t')\rho^I_{Sys}(t')-a^\dagger(t')\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger(t)\big] \\
& \quad +\big[\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger(t')a^\dagger(t)-a^\dagger(t)\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger(t')\big] \\
& \quad \pm\big[a^\dagger(t)a(t')\rho^I_{Sys}(t')-a(t')\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger(t)\big] \\
& \quad \pm\big[\rho^I_{Sys}(t')a(t')a^\dagger(t)-a^\dagger(t)\rho^I_{Sys}(t')a(t')\big] \\
& \quad \pm\big[a(t)a^\dagger(t')\rho^I_{Sys}(t')-a^\dagger(t')\rho^I_{Sys}(t')a(t)\big] \\
& \quad \pm\big[\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger(t')a(t)-a(t)\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger(t')\big] \\
& \quad +\big[a(t)a(t')\rho^I_{Sys}(t')-a(t')\rho^I_{Sys}(t')a(t)\big] \\
& \quad +\big[\rho^I_{Sys}(t')a(t')a(t)-a(t)\rho^I_{Sys}(t')a(t')\big]\Big\}\Big\langle\hat n^2\Big\rangle_{Umg} \\
=\; & -\frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat n\rangle_{Umg}\Big[e^{i\omega_{Sys}t}\big(a^\dagger\rho_{Sys}(0)-\rho_{Sys}(0)a^\dagger\big) \\
& \qquad \pm e^{-i\omega_{Sys}t}\big(a\rho_{Sys}(0)-\rho_{Sys}(0)a\big)\Big] \\
& -\frac{\lambda_\pm^2}{\hbar^2}\langle\hat n^2\rangle_{Umg}\int_0^t dt' e^{i\omega_{Sys}(t+t')}\times \\
& \qquad \times\big[a^\dagger a^\dagger\rho^I_{Sys}(t')-2a^\dagger\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger+\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger a^\dagger\big] \\
& +e^{-i\omega_{Sys}(t+t')}\big[aa\rho^I_{Sys}(t')-2a\rho^I_{Sys}(t')a+\rho^I_{Sys}(t')aa\big] \\
& \pm e^{i\omega_{Sys}(t-t')}\big[a^\dagger a\rho^I_{Sys}(t')-a\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger-a^\dagger\rho^I_{Sys}(t')a+\rho^I_{Sys}(t')aa^\dagger\big] \\
& \pm e^{i\omega_{Sys}(t-t')}\big[aa^\dagger\rho^I_{Sys}(t')-a^\dagger\rho^I_{Sys}(t')a-a\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger+\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger a\big]
\end{aligned}
\tag{49}
$$

Führt man Gleichung (49) wie bei (41) auf Matrixelemente zurück, so ergibt sich:

$$
\begin{aligned}
\dot\rho^I_{m,n}(t) \;=\; & -\frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat n\rangle_{Umg}\Big[e^{i\omega_{Sys}t}\big(\sqrt{m}\rho_{m-1,n}(0)-\rho_{m,n+1}(0)\sqrt{n+1}\big) \\
& \qquad \pm e^{-i\omega_{Sys}t}\big(\sqrt{m+1}\rho_{m+1,n}(0)-\rho_{m,n-1}(0)\sqrt{n}\big)\Big] \\
& -\frac{\langle\hat n^2\rangle_{Umg}}{\hbar^2}\int_0^t e^{i\omega_{Sys}(t+t')}\Big[\sqrt{m(m-1)}\rho^I_{m-2,n}(t') \\
& \qquad -2\sqrt{m(n+1)}\rho^I_{m-1,n+1}(t')+\sqrt{(n+1)(n+2)}\rho^I_{m,n+2}(t')\Big]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&+\ e^{-i\omega_{Sys}(t+t')}\Big[\sqrt{(m+1)(m+2)}\rho^I_{m+2,n}(t') - 2\sqrt{(m+1)n}\rho^I_{m+1,n-1}(t') \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad + \sqrt{n(n-1)}\rho^I_{m,n-2}(t')\Big] \\
&\pm\ 2cos[\omega_{Sys}(t-t')]\Big[m\rho^I_{m,n}(t') - \sqrt{(m+1)(n+1)}\rho^I_{m+1,n+1}(t') \\
&\qquad\qquad - \sqrt{mn}\rho^I_{m-1,n-1}(t') + (n+1)\rho^I_{m,n}(t')]\langle\hat{n}\rangle_{Umg}\Big]\, dt' \qquad (50)
\end{aligned}
$$

eine Zeitentwicklung, die sich für einen reinen Anfangszustand der Form (42) nicht mehr nur auf den diagonalen Anteil der Dichtematrix beschränkt.
Dabei werden Matrixelemente parallel und senkrecht zur Diagonalen miteinbezogen, so daß sich ein anfangs reiner Zustand auf seine "nächstliegenden" Matrixelemente verteilt.

Es stellt sich nun die Frage, wie groß die Wirkung dieses in der Kopplungskonstanten linearen Termes ist; dabei wollen wir dessen zeitlichen Einfluß für gewisse Operator-Erwartungswerte wie folgt näher betrachten:

$$
\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{O}\rangle_t \quad =: \quad \Big(\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{O}\rangle_t\Big)_{(lin)} + \Big(\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{O}\rangle_t\Big)_{(quadr)} \qquad (51)
$$

mit:

$$
\begin{aligned}
\Big(\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{O}\rangle_t\Big)_{(lin)} := -\frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat{n}\rangle_{Umg} tr_{Sys}\Big\{\Big[& e^{i\omega_{Sys}t}\hat{O}\big(a^\dagger\rho_{Sys}(0) - \rho_{Sys}(0)a^\dagger\big) \\
&\pm\ e^{-i\omega_{Sys}t}\hat{O}\big(a\rho_{Sys}(0) - \rho_{Sys}(0)a\big)\Big]\Big\} \qquad (52)
\end{aligned}
$$

Wesentlich ist hierbei der Ausgangszustand $\rho_{Sys}(0)$; untersuchen wir Gleichung (51) für den Fall eines reinen Teilchenzahl-Eigenzustandes:

$$
\rho_{Sys}(0) := |k_0\rangle\langle k_0| \qquad (42)
$$

so ergibt sich für die zeitliche Veränderung des System-Teilchenzahl-Operators $\hat{N} := a^\dagger a$ (stellvertretend für $\hat{H}_{Sys}$):

$$
\begin{aligned}
\Big(\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{N}\rangle_t\Big)_{(lin)} \quad &= \quad -\frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat{n}\rangle_{Umg} tr_{Sys}\Big\{\Big[e^{i\omega_{Sys}t}\hat{N}\big(a^\dagger\rho_{Sys}(0) - \rho_{Sys}(0)a^\dagger\big) \\
&\qquad\qquad \pm\ e^{-i\omega_{Sys}t}\hat{N}\big(a\rho_{Sys}(0) - \rho_{Sys}(0)a\big)\Big]\Big\} \\
&= \quad -\frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat{n}\rangle_{Umg} tr_{Sys}\Big\{\Big[e^{i\omega_{Sys}t}\big((k_0+1)^{3/2}|k_0+1\rangle\langle k_0| - (k_0)^{3/2}|k_0\rangle\langle k_0-1|\big) \\
&\qquad \pm\ e^{-i\omega_{Sys}t}\big(\sqrt{k_0}(k_0-1)|k_0-1\rangle\langle k_0| - \sqrt{k_0+1}k_0|k_0\rangle\langle k_0+1|\big)\Big]\Big\} \\
&= \quad 0 \qquad (53)
\end{aligned}
$$

diese Identität läßt sich analog für statistische Gemische (d.h. Linearkombinationen solcher reiner Anfangs-Dichtematrizen) herleiten.

Im Falle allgemeiner Anfangs-Dichtematrizen tragen zum Erwartungswert des Teilchenzahl-Operators gemäß (52) der (i.a. nicht-verschwindende) ober- und unter-diagonale Anteil von ρ_{Sys} bei.

Für den System-Vernichtungs-Operator a (bzw. dessen Erwartungswert) erhalten wir mit (42):

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial t}\langle a\rangle_t\right)_{(lin)} &= -\frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat{n}\rangle_{Umg} e^{i\omega_{Sys}t} tr_{Sys}\Big\{a\big(a^\dagger\rho_{Sys}(0)-\rho_{Sys}(0)a^\dagger\big)\Big\} \\ &= -\frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat{n}\rangle_{Umg} e^{i\omega_{Sys}t} tr_{Sys}\big\{(k_0+1)|k_0\rangle\langle k_0| - k_0|k_0-1\rangle\langle k_0-1|\big\} \\ &= -\frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat{n}\rangle_{Umg} e^{i\omega_{Sys}t} \end{aligned} \tag{54}$$

entsprechend für den Erzeugungs-Operator $a^\dagger$:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial t}\langle a^\dagger\rangle_t\right)_{(lin)} &= -\frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat{n}\rangle_{Umg} e^{i\omega_{Sys}t} tr_{Sys}\Big\{a^\dagger\big(a^\dagger\rho_{Sys}(0)-\rho_{Sys}(0)a^\dagger\big)\Big\} \\ &= -\frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat{n}\rangle_{Umg} e^{-i\omega_{Sys}t} tr_{Sys}\big\{k_0|k_0\rangle\langle k_0| - (k_0+1)|k_0+1\rangle\langle k_0+1|\big\} \\ &= \frac{i\lambda_\pm}{\hbar}\langle\hat{n}\rangle_{Umg} e^{-i\omega_{Sys}t} \end{aligned} \tag{55}$$

Offenbar scheint gerade für kleine Kopplungskonstanten dieser lineare Term für Operatoren, die in den System-Vernichtern und Erzeugern linear sind nicht gegenüber dem integrativen (in λ quadratischen) Anteil vernachlässigbar zu sein.

iii) $\hat{H}_{WW} = \lambda_\pm a^\dagger a(b^\dagger \pm b)$:

Diesmal handelt es sich um eine Kopplung, die Bosonenzahl-empfindlich gegenüber dem System ist, während die Wechselwirkung linear in Ort, bzw. Impuls der Umgebung ist.

Bei der Überprüfung der Annahme (14) erkennt man analog zur Herleitung von Gleichung (42), daß die zu den Umgebungs-Erzeugern und Vernichtern linearen Terme in den Umgebungs-Erwartungswerten verschwinden; somit erweist sich die Annahme (14) zumindest als gültig für die Klasse von Kopplungen, bei denen $\hat{H}_{WW}$ linear in b und $b^\dagger$ ist.

Für die Mastergleichung folgt hierbei:

$$\begin{aligned}\dot{\rho}^I_{Sys}(t) = -\tfrac{1}{\hbar^2}\int_0^t & \big[a^\dagger a(t)a^\dagger a(t')\rho^I_{Sys}(t') - a^\dagger a(t')\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger a(t)\big] \\ & \big\langle(b^\dagger\pm b)(t)(b^\dagger\pm b)(t')\big\rangle_{Umg} \\ & + \big[\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger a(t')a^\dagger a(t) - a^\dagger a(t)\rho^I_{Sys}(t')a^\dagger a(t')\big] \\ & \big\langle(b^\dagger\pm b)(t')(b^\dagger\pm b)(t)\big\rangle_{Umg} \quad dt'\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
= \mp \tfrac{1}{\hbar^2} \int_0^t \quad & \left[(a^\dagger a)^2 \rho^I_{Sys}(t') - (a^\dagger a)\rho^I_{Sys}(t')(a^\dagger a)\right] \\
& \left[e^{i\omega_{Umg}(t-t')} \langle b^\dagger b\rangle_{Umg} + e^{-i\omega_{Umg}(t-t')} \langle b^\dagger b\rangle_{Umg}\right] \\
& + \left[\rho^I_{Sys}(t')(a^\dagger a)^2 - (a^\dagger a)\rho^I_{Sys}(t')(a^\dagger a)\right] \\
& \left[e^{-i\omega_{Umg}(t-t')} \langle b^\dagger b\rangle_{Umg} + e^{i\omega_{Umg}(t-t')} \langle b^\dagger b\rangle_{Umg}\right] dt' \\
= \mp \tfrac{1}{\hbar^2} \int_0^t \quad & (a^\dagger a)^2 \rho^I_{Sys}(t') 2\langle \hat{n}\rangle_{Umg} cos[\omega_{Umg}(t-t')] \\
& -(a^\dagger a)\rho^I_{Sys}(t')(a^\dagger a) 2[2\langle \hat{n}\rangle_{Umg} + 1] cos[\omega_{Umg}(t-t')] \\
& +\rho^I_{Sys}(t')(a^\dagger a)^2 2\langle \hat{n}\rangle_{Umg} cos[\omega_{Umg}(t-t')] \\
& +(a^\dagger a)^2 \rho^I_{Sys}(t') e^{-i\omega_{Umg}(t-t')} \\
& +\rho^I_{Sys}(t')(a^\dagger a)^2 e^{i\omega_{Umg}(t-t')} \qquad\qquad dt'
\end{aligned} \tag{56}
$$

woraus sich für die Matrixelemente ergibt:

$$
\begin{aligned}
\dot{\rho}^I_{m,n}(t) \quad = \quad & \mp \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \Big(m^2 2\langle \hat{n}\rangle_{Umg} cos[\omega_{Umg}(t-t')] \\
& \qquad -mn2\left[2\langle \hat{n}\rangle_{Umg} + 1\right] cos[\omega_{Umg}(t-t')] \\
& \qquad +n^2 2\langle \hat{n}\rangle_{Umg} cos[\omega_{Umg}(t-t')] \\
& +m^2 e^{-i\omega_{Umg}(t-t')} + n^2 e^{i\omega_{Umg}(t-t')} \Big) \rho^I_{m,n}(t')\, dt' \\
= \quad & \mp \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \Big(\left[(m-n)^2 \langle \hat{n}\rangle_{Umg} - 2mn\right] cos[\omega_{Umg}(t-t')] \\
& +m^2 e^{-i\omega_{Umg}(t-t')} + n^2 e^{i\omega_{Umg}(t-t')} \Big) \rho^I_{m,n}(t')\, dt'
\end{aligned} \tag{57}
$$

Offenbar sind hierbei alle beteiligten Terme “proportional” zu $\rho^I_{m,n}(t')$; demzufolge sich reine Anfangszustände (gemäß Gl.(42)) in Born'scher Näherung als robust erweisen, da die anderen Matrixelemente unbeeinflußt bleiben.

Ganz besonders fällt sogar auf, das selbst bei beliebigen Anfangszuständen die Diagonalelemente zeitlich erhalten bleiben, während man für die einzelnen nicht-diagonalen Elemente die ungekoppelten Integro-Differential-Gleichungen verhältnismäßig einfach wegen ihrer Faltungs-Struktur des Integrales mittels Laplace-Transformationen lösen kann (analog zum später behandelten Schritt: (72)→(73)).

2) Projektions-Operator-Formalismus:

Eine weitere Methode, die reduzierte Zeitentwicklung eines offenen Systems aus der Liouville-/von Neumann-Gleichung (4) abzuleiten, basiert auf der Einführung eines Projektions-Operator-Formalismus auf dem Raum der totalen Dichte-Matrizen ρ_{tot}.
Das unter anderen von L. van Hove und I. Prigogine[†] entworfene Konzept besteht darin, auf dem Raum aller totalen Dichte-Operatoren eine Unterteilung in einen sogenannten "relevanten" und einen "irrelevanten" Anteil zu treffen. Diese Aufspaltung wird formal durch Verwendung eines Projektions-Operators $\mathbb{P}$ beschrieben, der die totale Dichtematrix auf den uns interessierenden "relevanten" Anteil reduziert, während hingegen $\mathbb{Q} := (\mathbb{1} - \mathbb{P})$ auf den restlichen, "irrelevanten" Anteil projeziere.
Wir erhalten dabei 2 gekoppelte Differentialgleichungen, die wir zumindest formal in eine Integro-Differential-Gleichung (ähnlich der Form von Gl. (15)) umwandeln werden
Wir orientieren uns größtenteils an einem Artikel von J. Kupsch[(Kup,'96)] und an den vielzitierten Arbeiten von R. Zwanzig[(Zwzg,'60a,b)]:

Sei $\rho_{Sys}(t) = tr_{Umg}\{\rho_{tot}(t)\}$ wie gewohnt gegeben; wir nehmen wie in II.1.i) an, daß der Zustand der Umgebung ein thermisches Bad im Gleichgewicht sei:

$$\rho_{Umg} := \frac{e^{-\beta \hat{H}_{Umg}}}{tr_{Umg}\{e^{-\beta \hat{H}_{Umg}}\}} \tag{13}$$

Wie bereits erwähnt, "leben" die totalen Dichte-Operatoren auf dem Tensor-Produkt der beiden Teilsystem-Hilberträume: $\mathscr{H}_{tot} := \mathscr{H}_{Sys} \otimes \mathscr{H}_{Umg}$; unter der Annahme, daß die Dynamik der Umgebung im Gleichgewicht effektiv unbeeindruckt von der Entwicklung von ρ_{Sys} ist, setzen wir den Projektions-Operator $\mathbb{P}$ wie folgt an[§]:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\rho_{tot}(t) &:= \rho_{Sys}(t) \otimes \rho_{Umg} && (58) \\ &= tr_{Umg}\{\rho_{tot}(t)\} \otimes \rho_{Umg} && (59) \end{aligned}$$

Die Linearität und Idempotenz dieses Operators ist offensichtlich, somit gilt gleiches für:

$$\mathbb{Q} := (\mathbb{1} - \mathbb{P}) \tag{60}$$

Mittels folgender Notation:

$$\begin{aligned} \rho_{tot}(t) &= \underbrace{\mathbb{P}\rho_{tot}(t)} + \underbrace{\mathbb{Q}\rho_{tot}(t)} \\ &= \quad \rho_{rel} \quad + \quad \rho_{irr} && (61) \end{aligned}$$

---

†: Siehe (GPR, '72), (vHv, '55) und (vHv, '59).
§: Siehe z.B. auch die Behandlung in (G&Z, '00) ab Seite 135.

resultiert aus der Linearität von:

$$\dot{\rho}_{tot}(t) \quad = \quad \mathcal{L}_{tot}\big(\rho_{tot}(t)\big) \tag{62}$$

mit $\mathcal{L}_{tot}(.)$ dem entsprechenden Liouville-/von Neumann-Operator der totalen Dichte-Matrix folgende gekoppelte Differentialgleichungen:

$$\dot{\rho}_{rel}(t) \quad = \quad \mathbb{P}\mathcal{L}_{tot}\big(\rho_{rel}(t)\big) + \mathbb{P}\mathcal{L}_{tot}\big(\rho_{irr}(t)\big) \tag{63}$$

$$\dot{\rho}_{irr}(t) \quad = \quad \mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot}\big(\rho_{rel}(t)\big) + \mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot}\big(\rho_{irr}(t)\big) \tag{64}$$

Betrachten wir folgende formale Lösung[$] von Gleichung (64):

$$\rho_{irr}(t) \quad = \quad e^{\mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot}t}\rho_{irr}(0) + \int_0^t e^{\mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot}(t-\tau)}\mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot}\rho_{rel}(\tau)\,d\tau \tag{65}$$

mit $e^{\mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot}t}$ dem formalen Ausdruck für die entsprechende Potenzreihe; so ergibt Einsetzen von Gleichung (65) in (63) als vorläufige Mastergleichung:

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_{rel}(t) \quad = \quad & \mathbb{P}\mathcal{L}_{tot}\rho_{rel}(t) + \int_0^t \mathbb{P}\mathcal{L}_{tot}e^{\mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot}(t-\tau)}\mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot}\rho_{rel}(\tau)\,d\tau \\ & + \mathbb{P}\mathcal{L}_{tot}e^{\mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot}t}\rho_{irr}(0)\end{aligned} \tag{66}$$

dabei ist der Bezug der Entwicklung des als "relevant" bezeichneten Systems $\rho_{rel}(t)$ zu den ausgeblendeten Anteilen nur noch über den Anfangszustand derselben: $\rho_{irr}(0)$ gegeben.

Im Falle unkorrelierter Anfangszustände (Gl. (12)) gilt offenbar $\rho_{irr}(0) = 0$ und unsere somit erhaltene Master-Gleichung läßt sich vereinfacht schreiben zu:

$$\dot{\rho}_{Sys}(t) \quad = \quad -\frac{i}{\hbar}\big[H, \rho_{Sys}(t)\big] + \int_0^t \mathbf{K}(t-\tau)\rho_{Sys}(\tau)\,d\tau \tag{67}$$

mit einem hamilton'schen Anteil:

$$-\frac{i}{\hbar}\big[H, \rho_{Sys}(t)\big] \quad := \quad tr_{Umg}\big\{\mathbb{P}\mathcal{L}_{tot}\mathbb{P}\rho_{tot}(t)\big\} \tag{68}$$

der der Liouville-Zeitentwicklung mit einem effektiven Hamiltonian[‡] entspricht:

$$H \quad := \quad H_{Sys} + tr_{Umg}\big\{H_{WW}\rho_{Umg}\big\} \tag{69}$$

sowie einem Operator $\mathbf{K}(t-\tau)$, der wie folgt die Korrelationen des derzeitigen (Dichte-Matrix-)Zustands zu denen der früheren Zeiten beschreibt:

$$\mathbf{K}(t-\tau)\rho_{Sys}(\tau) \quad := \quad tr_{Umg}\Big\{\mathcal{L}_{tot}e^{\mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot}(t-\tau)}\mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot}\big(\rho_{Sys}(\tau)\otimes\rho_{Umg}\big)\Big\} \tag{70}$$

[$]: Die Korrektheit dieses Ansatzes ergibt sich rückwirkend durch Substitution von Gl. (65) in (64) und Eindeutigkeit wegen 1. Ordnung dieser Differentialgleichung.
[‡]: Man beachte hierbei auch die Bedeutung der "technischen Nebenbedingung" (14).

Führen wir jetzt eine Laplace-Transformation durch:

$$\tilde{g}(\omega) \quad := \quad \int_0^\infty e^{-\omega t} g(t)\, dt \tag{71}$$

mit $\omega \in \mathbb{C}$, so ergibt sich aus unserer Master-Gleichung (67):

$$\omega \tilde{\rho}_{Sys}(\omega) + \rho_{Sys}(0) = -\frac{i}{\hbar}\big[H, \tilde{\rho}_{Sys}(\omega)\big] + \int_0^\infty e^{\omega t} \int_0^t \mathbf{K}(t-\tau)\rho_{Sys}(\tau)\, d\tau\, dt \tag{72}$$

Entsprechend des Faltungstheorems für Laplace-Transformationen folgt:

$$\omega \tilde{\rho}_{Sys}(\omega) = -\rho_{Sys}(0) - \frac{i}{\hbar}\big[H, \tilde{\rho}_{Sys}(\omega)\big] + \tilde{\mathbf{K}}(\omega) \cdot \tilde{\rho}_{Sys}(\omega) \tag{73}$$

An dieser Stelle zerlegt Zwanzig$^{(Zwzg,'60a)}$ den Liouville-Operator $\mathcal{L}_{tot}$ in einen "relevanten" Anteil $\mathcal{L}_{rel} := \mathbb{P}\mathcal{L}_{tot}\mathbb{P}$ und den als "kleine Störung" zu behandelnden Rest: $\mathcal{L}_{irr} := \mathcal{L}_{tot} - \mathcal{L}_{rel}$.

$$\mathcal{L}_{tot} \quad := \quad \mathcal{L}_{rel} + \mathcal{L}_{irr} \tag{74}$$

Wobei offenbar gilt:

$$\mathbb{P}\mathcal{L}_{rel} \quad = \quad \mathcal{L}_{rel}\mathbb{P} \quad = \quad \mathcal{L}_{rel} \tag{75}$$

sowie:

$$\begin{array}{rrcl} & \mathbb{Q}\mathcal{L}_{rel} = \mathcal{L}_{rel}\mathbb{Q} & = & 0 \\ \Rightarrow & \mathbb{Q}\mathcal{L}_{tot} & = & \mathbb{Q}\mathcal{L}_{irr} \\ & \mathcal{L}_{tot}\mathbb{Q} & = & \mathcal{L}_{irr}\mathbb{Q} \end{array} \tag{76}$$

Für Gleichung (70) folgt daraus:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{K}}(\omega) &= \int_0^\infty e^{-\omega t}\mathbb{P}\mathcal{L}_{irr}\mathbb{Q}e^{\mathbb{Q}\mathcal{L}_{irr}t}\mathbb{Q}\mathcal{L}_{irr}\mathbb{P}\, dt \\ &= \mathbb{P}\mathcal{L}_{irr}\int_0^\infty e^{(-\omega+\mathbb{Q}\mathcal{L}_{irr})t}\, dt \quad \mathbb{Q}\mathcal{L}_{irr}\mathbb{P} \\ &= \mathbb{P}\mathcal{L}_{irr}\big(\mathbb{Q}\mathcal{L}_{irr} - \omega\big)^{-1}\mathbb{Q}\mathcal{L}_{irr}\mathbb{P} \end{aligned} \tag{77}$$

Es bietet sich an, $\tilde{\mathbf{K}}(\omega)$ in eine Potenzreihe von $\mathcal{L}_{irr}$ zu entwickeln:

$$\tilde{\mathbf{K}}(\omega) \quad = \quad \mathbb{P}\mathcal{L}_{irr}\sum_0^\infty \big(\mathbb{1} - \mathbb{Q}\mathcal{L}_{irr} + \omega\big)^n \mathbb{Q}\mathcal{L}_{irr}\mathbb{P} \tag{78}$$

Sofern zu Gleichung (73) im laplace-transformierten Bild eine Lösung gefunden wird, läßt sich somit mittels der inversen Laplace-Transformation $\rho_{Sys}(t)$ bestimmen.

R. Zwanzig wiederum kommt für den von ihm benannten "Streu-Operator" $\mathcal{T}(\omega)$ in analoger Rolle wie $\tilde{\mathbf{K}}(\omega)$ in (73) zu einer etwas anders gearteten Gleichung vom Lippman-Schwinger-Typ, deren Weiterbehandlung er im Rahmen der üblichen Streutheorie empfiehlt$^{(Zwzg,'60a)}$.

Insbesondere sei hierbei der Feshbach-Formalismus$^{(Fshb,'58\&'62)}$ erwähnt, bei der Feshbach (zeitgleich, aber offenbar unabhängig von Zwanzig et al.) eine ähnliche Methode der projektiven Aufteilung untereinander gekoppelter Bereiche in der Streutheorie entwickelt hat.

Chaturvedi und Shibata$^{(C\&S,'79)}$ benutzen einen rückwärts gerichteten Propagator bezüglich des "störenden" Liouville-Anteiles, um die Zeitfaltung mit $\rho_{Sys}(\tau)$ in Gl. (67) aufzulösen, und erhalten dabei eine in der Zeitvariablen lokale Differentialgleichung der Form:

$$\dot{\rho}_{Sys}(t) \quad = \quad \mathcal{K}(t)\big(\rho_{Sys}(t)\big) \tag{79}$$

deren zeitabhängiger Operator $\mathcal{K}(t)$ von ihnen in der Regel nur in Form der ersten Terme einer in ihrer Arbeit angegebenen Potenzreihe bestimmt werden kann. Diese approximative Bestimmung von $\mathcal{K}(t)$ ermöglicht allerdings eine formal sehr einfache Lösung der Mastergleichung:

$$\rho_{Sys}(t) \quad = \quad e^{\int_0^t \mathcal{K}(\tau)\, d\tau} \rho_{Sys}(0) \tag{80}$$

3) Herleitung der Lindblad-Mastergleichung im endlich-dimensionalen Falle:

Ein anderer, abstrakterer Zugang zu Mastergleichungen basiert auf der Formulierung der Zeitentwicklung eines offenen Quantensystems anhand der sogenannten **"dynamischen Halbgruppe"**.

Dieser 1972 von Kossakowski$^{(Kos,'72)}$ eingeführte Begriff wurde u.a. von Ingarden$^{(I\&K,'75)}$, Gorini und Sudarshan $^{(GKS,'76)}$ fortentwickelt, bis schließlich Lindblad in einer seiner Arbeiten$^{(Lbld,'76)}$ einen grundlegenden Beweis für die allgemeingültige Form einer markov'schen Mastergleichung erbracht hat, die nach ihm benannte **Lindblad-Gleichung**:

$$\dot{\rho}_{Sys}(t) = -\frac{i}{\hbar}\big[H_0, \rho_{Sys}(t)\big] + \frac{1}{2}\sum_j \Big(\big[L_j, \rho_{Sys}(t)L_j^\dagger\big] + \big[L_j\rho_{Sys}(t), L_j^\dagger\big]\Big) \qquad (81)$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\big[H_0, \rho_{Sys}(t)\big] + \sum_j \Big(L_j\rho_{Sys}(t)L_j^\dagger - \frac{1}{2}L_j^\dagger L_j\rho_{Sys}(t) - \frac{1}{2}\rho_{Sys}(t)L_j^\dagger L_j\Big)$$

Wie bereits bei den vorherigen Herleitungen erkennt man einen ersteren hamilton'schen Anteil, der im Falle eines verschwindenden Lindblad-Operator-Einflusses (z.B. wenn Dichtematrix und Lindbladoperatoren $L_j^{(\dagger)}$ kommutieren) eine rein unitäre Zeitentwicklung verursacht.
Der letztere Lindblad-Anteil hingegen bewirkt entsprechend der $L_j^{(\dagger)}$ ein dissipatives, irreversibles Verhalten der Mastergleichung.

Im Gegensatz zur unitären, reversiblen Zeitentwicklung geschlossener Systeme (gemäß Gl. (1)) wird als mathematische Grundstruktur der irreversiblen Zeit-Transformationen eines offenen Systems die dynamische Halbgruppe angesetzt.
Wie der Name schon verrät, handelt es sich dabei um eine 1-parametrige Halbgruppe: $\Lambda_t : \mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys}) \to \mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys})$ $(t \in \mathbb{R}_0^+)$ von linearen Abbildungen auf dem Raum der Spurklasse-Operatoren$^{\aleph}$ $\mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys})$ des uns interessierenden Zustand-Hilbert-Raumes. Die Zeitentwicklung eines offenen Systems wird also durch die Wirkung dieser (zeit-indizierten) Familie von Transformationen auf eine gegebenen Anfangs-Zustands-Dichtematrix realisiert.

Anhand der Eigenschaft von Λ_t Kontraktion$^{\beth}$ zu sein, folgt aus dem sogenannten Hille-Yosida-Theorem$^{(Yos,'48)}$ die Existenz eines linearen Operators $\mathcal{L}$, dem sogenannten **Generator der Halbgruppe**, für den gilt:

$$\lim_{t\searrow 0}\Big\|\mathcal{L}X - \frac{1}{t}\big(\Lambda_t X - X\big)\Big\| \;=\; 0 \qquad (82)$$

$\aleph$: $\mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys}) := \{A : A \in \mathcal{B}(\mathscr{H}_{Sys}) \wedge |tr\{A\}| < \infty\}$
$\beth$: Details hierzu siehe: (GKS, '76) und dortige Referenzen.

Hieraus berechnen sich die Zeittransformationen zu: $\Lambda_t = e^{\mathcal{L}t}$, so daß dessen Generator $\mathcal{L}$ wie folgt die entsprechende Mastergleichung vorgibt:

$$\dot{\rho}_{Sys}(t) \quad = \quad \mathcal{L}\big(\rho_{Sys}(t)\big) \tag{83}$$

3.1 Begriff der dynamischen Halbgruppe:

Im Folgenden führen wir das Konzept der dynamischen Halbgruppe als die grundlegende Evolutions-Halbgruppe offener quantenmechanischer Systeme ein. Die grundlegenden Begriffe werden z.B. in Kossakowski's Arbeit$^{(Kos,'72)}$ dargestellt.

Definition 3.1:

Eine dynamische Halbgruppe nennen wir eine 1-parametrige Familie linearer Abbildungen: $\Lambda_t : \mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys}) \to \mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys})$, falls für die dazu duale Familie von Transformationen$^{\daleth}$: $\Lambda_t^* : \mathcal{B}(\mathscr{H}_{Sys}) \to \mathcal{B}(\mathscr{H}_{Sys})$ gilt:

a) Λ_t^* ist positiv$^{\diamondsuit}$ $\forall t \in \mathbb{R}_0^+$

b) $\Lambda_t^*(\mathbb{1}_{\mathcal{H}_{Sys}}) = \mathbb{1}_{\mathcal{H}_{Sys}}$

c) $\Lambda_s^* \cdot \Lambda_t^* = \Lambda_{s+t}^*$

d) $\Lambda_t^*(X) \overset{t\to 0}{\longrightarrow} X$ ultraschwach$^{\heartsuit}$

e) Λ_t^* ist normal$^{\heartsuit}$ (ultraschwach stetig) .

a) gewährleistet, daß die Positivität, b), daß die Spur ursprünglicher Dichtematrizen erhalten bleibt; c) entspricht einer zeitlichen Homogenität der Transformationen, d) und e) geben gewissermaßen die Regularität des Prozesses wieder.

Diese dynamischen Halbgruppen müssen, um zeitliche Transformationen auf dem Raum der Dichtematrizen eines offenen Systems zu sein, einer weiteren Positivitäts-Eigenschaft genügen, nämlich der der vollständigen Positivität:

Definition 3.2:

Eine lineare Abbildung: $\Phi : \mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys}) \to \mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys})$ heißt vollständig positiv, falls gilt:

die tensorierten Abbildungen:

$\Phi^{(n)} := \Phi \otimes \mathbb{1}_n : \mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys}) \otimes M_n(\mathbb{C}) \to \mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys}) \otimes M_n(\mathbb{C})$

sind positiv $\forall n \in \mathbb{N}$.

$^{\daleth}$: die dualen Transformationen sind definiert per: $tr\{\rho(\Lambda_t^* A)\} := tr\{(\Lambda_t\rho)A\}$, entsprechen also dem Heisenberg-Bild.

$^{\diamondsuit}$: $\Phi : \mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys}) \to \mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys})$ positiv heißt: hermitesche, positive Operatoren endlicher Spur werden auf eben solche abgebildet (Details siehe: (I&K, '75)).

Die Notwendigkeit dieser stärkeren Bedingung für Transformationen, die den Raum der Dichtematrizen auf sich selbst abbilden, wird in einer der Arbeiten von Kraus$^{(Kraus,'71)}$ gezeigt; für den uns interessierenden endlich-dimensionalen Fall findet man einen kurzen Beweis im Anhang A.

3.2 Herleitung einer Lindblad-Gleichung für endlich-dimensionale Systeme:

In Anlehnung an eine Arbeit von Gorini, Kossakowski und Sudarshan$^{(GKS,'76)}$ werden wir einen Versuch der Herleitung der Lindblad-Form für N-dimensionale Systeme unternehmen. In diesem Falle vereinfacht sich die im Allgemeinen wesentliche Differenzierung des Operator-Raumes zu:

$$\mathcal{T}(\mathscr{H}_{Sys}) = \mathcal{B}(\mathscr{H}_{Sys}) = M_N(\mathbb{C}) \tag{84}$$

Für die weitere Behandlung des endlich-dimensionalen Falles leiten wir zuerst ein paar (Hilfs-)Sätze, bzw. Lemmata her:

Sei $\{P_1, ..., P_N\}$ eine Familie 1-dimensionaler, untereinander orthogonaler Projektoren aus $M_N(\mathbb{C})$. So folgt nach Theorem 4' aus (I&K, '75):

Satz 3.1:

Eine lineare Abbildung: $L : M_N(\mathbb{C}) \to M_N(\mathbb{C})$ ist genau dann Generator einer dynamischen Halbgruppe von $M_N(\mathbb{C})$, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind:

a) $tr_{Sys}\{P_j(LP_k)\} \geq 0 \qquad \forall j \neq k \in \{1, ..., N\}$

b) $\sum_{j=1}^{N} tr_{Sys}\{P_j(LP_k)\} \geq 0 \qquad \forall k \in \{1, ..., N\}$

Lemma 3.1:

Λ_t ist genau dann eine vollständig positive Halbgruppe von $M_N(\mathbb{C})$, wenn $\Lambda_t \otimes \mathbb{1}_N$ eine dynamische Halbgruppe von $M_N(\mathbb{C}) \otimes M_N(\mathbb{C})$ ist.

Beweis:

Laut Theorem 5 von (Choi, '72) ist eine lineare Abbildung $\Phi : M_N(\mathbb{C}) \to M_N(\mathbb{C})$ genau dann vollständig positiv, falls $\Phi \otimes \mathbb{1}_N$ positiv ist.

Um die Aussage von Choi's Theorem auf dynamische Halbgruppen zu erweitern, verbleibt es, den Spur-Erhalt nachzuweisen; sei dazu ein beliebiger Operator: $A \in M_N(\mathbb{C}) \otimes M_N(\mathbb{C})$, mittels der $M_N(\mathbb{C})$-Basis $(E_{j,k})_{l,m} := \delta_{j,l}\delta_{k,m}$ dargestellt durch:

$$A = \sum_{j,k} A_{j,k} \otimes E_{j,k} \qquad A_{j,k} \in M_N(\mathbb{C}) \tag{85}$$

gegeben.

$^{\heartsuit}$: der Begriff der ultraschwachen (auch: schwach*-) Konvergenz wird z.B. in den Büchern von Haag$^{(Haag,'96)}$ und Kato$^{(Kato,'76)}$ erläutert; im wesentlichen bezeichnet es die Operator-Konvergenz bezüglich des Systems von Halbnormen der Form: $|tr\{\rho A\}|$ mit: ρ beliebiger Dichtematrix.

So gilt:

$$
\begin{aligned}
tr_{N^2}\big\{(\Phi\otimes \mathbb{1}_N)A\big\} &= \sum_{j,k=1}^{N} tr_{N^2}\big\{\Phi A_{j,k}\otimes E_{j,k}\big\} \\
&= \sum_{j,k=1}^{N} tr_N\big\{\Phi A_{j,k}\big\} tr_N\big\{E_{j,k}\big\} \\
&= \sum_{j=1}^{N} tr_N\big\{\Phi A_{j,k}\big\} \qquad (86)
\end{aligned}
$$

□

<u>Lemma 3.2:</u>
Sei $\Phi : M_N(\mathbb{C}) \to M_N(\mathbb{C})$ linearer Operator, $\big\{F_j\big\}_{j\in\{1,\dots,N^2\}}$ vollständiges Orthonormal-System auf $M_N(\mathbb{C})$; dann läßt sich Φ eindeutig schreiben als:

$$
\Phi(A) = \sum_{j,k=1}^{N^2} c_{j,k} F_j A F_k^\dagger \qquad \forall A \in M_N(\mathbb{C}) \qquad (87)
$$

Insbesondere:

$$
\Phi(A^\dagger) = \Phi(A)^\dagger \quad \Leftrightarrow \quad c_{j,k} = c_{k,j}^* \qquad (88)
$$

<u>Beweis:</u>
Bezeichne $\mathscr{L}(M_N(\mathbb{C}))$ den Vektorraum der linearen Abbildungen auf $M_N(\mathbb{C})$ und $\big\{G_j\big\}$ ein vollständiges ON-System auf $M_N(\mathbb{C})$, so erhalten wir offenbar ein Skalarprodukt auf $\mathscr{L}(M_N(\mathbb{C}))$ mittels:

$$
\begin{aligned}
\big\langle \Phi, \Psi \big\rangle &:= \sum_{j=1}^{N^2} \big(\Phi(G_j), \Psi(G_j)\big) \qquad (89) \\
&:= \sum_{j=1}^{N^2} tr_N\big\{\Phi(G_j)^\dagger \Psi(G_j)\big\} \qquad (90)
\end{aligned}
$$

Um Gleichung (87) nachzuweisen, müssen wir jetzt nur noch zeigen, daß

$$
\Gamma_{j,k} : A \to F_j A F_k^\dagger \qquad (91)
$$

ein vollständiges ON-System von $\mathscr{L}(M_N(\mathbb{C}))$ ist.

Dazu:

$$
\begin{aligned}
\big\langle \Gamma_{j,k}, \Gamma_{l,m} \big\rangle &= \sum_{\mu=1}^{N^2} tr_N\big\{\Gamma_{j,k}(G_\mu)^\dagger \Gamma_{l,m}(G_\mu)\big\} \\
&= \sum_{\mu} tr_N\big\{\big(F_j G_\mu F_k^\dagger\big)^\dagger \big(F_l G_\mu F_m^\dagger\big)\big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= tr_N\Big\{F_k\Big(\sum_{\mu=1}^{N^2} G_\mu^\dagger F_j^\dagger F_l G_\mu\Big)F_m^\dagger\Big\} \\
&= tr_N\{F_j^\dagger F_l\} tr_N\{F_m^\dagger F_k\} \\
&= \delta_{j,l}\delta_{k,m} \qquad (92)
\end{aligned}
$$

Wobei der vorletzte Schritt der Definition der Spur entspricht.
Vollständigkeit ergibt sich aus Dimensionsgründen, Gleichung (88) durch Einsetzen von (87).

$\square$

Lemma 3.3:

Sei $\{F_j\}_{j=1,..,N^2}$ eine beliebige vollständige ON-Basis von $M_N(\mathbb{C})$ mit der Nebenbedingung: $F_{N^2} = \frac{1}{\sqrt{N}}\mathbb{1}_N$ und $L \in \mathscr{L}(M_N(\mathbb{C}))$ so, daß $L(A^\dagger) = L(A)^\dagger$ und $tr_N\{L(A)\} = 0\ \forall A \in M_N(\mathbb{C})$ gelte.

Dann kann L eindeutig geschrieben werden in der Form:

$$
L(A) = -i[H,A] + \frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^{N^2-1} c_{j,k}\Big([F_j, AF_k^\dagger] + [F_jA, F_k^\dagger]\Big) \qquad (93)
$$

mit: $H = H^\dagger$, $tr_N\{H\} = 0$ und $c_{j,k} = c_{k,j}^*$.

Beweis:

Nach Lemma 3.2 gibt es zu $\{F_j\}$ eine eindeutige Darstellung von L der Form:

$$
\begin{aligned}
L(A) &= \sum_{j,k=1}^{N^2} c_{j,k}F_jAF_k^\dagger \qquad (87) \\
&= \frac{1}{N}c_{N^2,N^2}A + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N^2-1}\left(c_{j,N^2}F_jA + c_{N^2,j}AF_j^\dagger\right) + \sum_{j,k=1}^{N^2-1} c_{j,k}F_jAF_k^\dagger \\
&= -i[H,A] + \{G,A\} + \sum_{j,k=1}^{N^2-1} c_{j,k}F_jAF_k^\dagger \qquad (94)
\end{aligned}
$$

mit: $H := \frac{1}{2i}\left(F^\dagger - F\right)$ und $G := \frac{1}{2N}c_{N^2,N^2}\mathbb{1}_N + \frac{1}{2}\left(F^\dagger + F\right)$

wobei: $F := \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N^2-1} c_{j,N^2}F_j$.

Wegen: $0 = tr_N\{L(A)\} = tr_N\Big\{\Big(2G + \sum_{j,k=1}^{N^2-1} c_{j,k}F_k^\dagger F_j\Big)A\Big\}\ \forall A \in M_N(\mathbb{C})$ gilt:

$$
G = -\frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^{N^2-1} c_{j,k}F_k^\dagger F_j \qquad (95)
$$

Einsetzen von Gleichung (95) in (94) ergibt offenbar Behauptung (93). Hermitizität und Spurlosigkeit von H lassen sich leicht nachprüfen; die Eindeutigkeit dieser Darstellung folgt aus der Eindeutigkeit von Gleichung (87). Die Selbstadjungiertheit von $c_{j,k}$ folgt wiederum aus Relation (88).

$\square$

Nehmen wir nun an, daß die gemäß Lemma 3.3 zu einer gegebenen Basis $\{F_j\}_{j=1,..,N^2}$ eindeutigen Koeffizienten $c_{j,k}$ folgende Faktorisierungsbedingung erfüllen♠:

$$c_{j,k} \quad = \quad \lambda_j \lambda_k^* \tag{96}$$

mit entsprechenden $\lambda_j \in \mathbb{C}$, wobei die Hermitizität der Koeffizienten offenbar erhalten bleibt, so ergibt sich aus Gleichung (93) in offensichtlicher Weise eine Lindblad-Form wie folgt:

$$\begin{aligned} L(A) &= -i[H,A] + \frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^{N^2-1} c_{j,k}\Big(\big[F_j, AF_k^\dagger\big] + \big[F_jA, F_k^\dagger\big]\Big) && (93) \\ &= -i[H,A] + \frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^{N^2-1}\Big(\big[\lambda_j F_j, A\lambda_k^* F_k^\dagger\big] + \big[\lambda_j F_j A, \lambda_k^* F_k^\dagger\big]\Big) \\ &= -i[H,A] + \frac{1}{2}\Big(\big[V, AV^\dagger\big] + \big[VA, V^\dagger\big]\Big) && (97) \end{aligned}$$

mit:

$$V \quad := \quad \sum_j \lambda_j F_j \tag{98}$$

als Lindblad-Operator.

An dieser Stelle haben wir noch nicht die vollständige Positivität der dadurch generierten dynamischen Halbgruppe diskutiert. Dazu greifen wir auf Lemma 3.1 zurück, wonach L genau dann Generator einer vollständig positiven dynamischen Halbgruppe ist, falls $L \otimes \mathbb{1}_N$ eine dynamische Halbgruppe erzeugt. Letztere Bedingung weisen wir mittels Satz 3.1 nach.

Wegen Invarianz der endlich-dimensionalen Spur unter zyklischer Permutation und weil L und somit auch $L \otimes \mathbb{1}_N$ für beliebige Dichtematrizen (also insbesondere für 1-dimensionale Projektionsoperatoren P_k) eine Summe von Kommutatoren darstellt, ist Satz 3.1 b) offenbar erfüllt.

♠:Eine Eigenschaft, die sich bei näherer Betrachtung als unabhängig von der ursprünglichen Basiswahl der F_j erweist.

Es verbleibt nachzuprüfen, daß:

$$tr_{N^2}\{P^{(1)}[(L\otimes \mathbb{1}_N)P^{(2)}]\} \quad \geq \quad 0$$

für beliebige, untereinander orthogonale, selbstadjungierte Projektoren $P^{(j)}$ auf $M_N(\mathbb{C})\otimes M_N(\mathbb{C})$ gilt.

Sei ein beliebiges solches Projektoren-System gegeben, so folgt anhand der üblichen tensoriellen Entwicklung:

$$P^{(\mu)} \quad = \quad \sum_{j,k} P^{(\mu)}_{j,k}\otimes E_{j,k} \tag{99}$$

für die gesuchte Spur:

$$\begin{aligned}
tr_{N^2}\{P^{(1)}[(L\otimes \mathbb{1}_N)P^{(2)}]\} &= \sum_{j,k}^{N} tr_N\{P^{(1)}_{j,k}(LP^{(2)}_{k,j})\} \\
= \quad & -i\sum_{j,k}^{N} tr_N\{P^{(1)}_{j,k}[H,P^{(2)}_{k,j}]\} + \sum_{j,k}^{N}\Big(tr_N\{P^{(1)}_{j,k}VP^{(2)}_{k,j}V^\dagger\} \\
& \qquad -\frac{1}{2}tr_N\{P^{(1)}_{j,k}V^\dagger VP^{(2)}_{k,j}+P^{(1)}_{j,k}P^{(2)}_{k,j}V^\dagger V\}\Big) \\
= \quad & \sum_{j,k}^{N} tr_N\{P^{(1)}_{j,k}VP^{(2)}_{k,j}V^\dagger\} && (100) \\
= \quad & \sum_{j,k,l,m}^{N} tr_N\{P^{(1)}_{j,l}P^{(1)}_{l,k}VP^{(2)}_{k,m}P^{(2)}_{m,j}V^\dagger\} && (101) \\
= \quad & tr_N\left\{\Big(\sum_{j=1}^{N}P^{(1)}_{l,j}VP^{(2)}_{j,m}\Big)\Big(\sum_{j=1}^{N}P^{(1)}_{l,j}VP^{(2)}_{j,m}\Big)^\dagger\right\} \\
=: \quad & tr_N\{\tilde{V}\tilde{V}^\dagger\} \quad \geq \quad 0 && (102)
\end{aligned}$$

Gleichung (100) ergibt sich aus der Orthogonalität der Projektoren, für (101) wurde die Projektivitätseigenschaft verwendet. Positivität von (102) folgt aus der Positivität von $\tilde{V}\tilde{V}^\dagger$.

Somit haben wir gezeigt, daß eine Spurlosigkeit bewirkende *-Abbildung mit Faktorisierungseigenschaft (96) eine vollständig positive dynamische Halbgruppe auf $M_N(\mathbb{C})$ erzeugt.

3.3 Dissipationsfunktion nach Lindblad:

Im Folgenden werden wir, um einen tieferen Einblick in die Struktur des Lindblad-Theorems zu bekommen, den Fall der endlich-dimensionalen Systeme auf die ursprünglich abstrakter formulierte Herleitung von G. Lindblad$^{(Lbld,'76)}$ übertragen.
Dabei bezeichnet im folgenden $\mathcal{A}$ eine W^*-Algebra, $M_n(\mathcal{A}) := \mathcal{A} \otimes M_n(\mathbb{C})$.

Um eine klarere Differenzierung des hamilton'schen zum dissipativen Anteil eines Generators einer dynamischen Halbgruppe zu erhalten, führte Lindblad die sogenannte **Dissipationsfunktion** ein:

Definition 3.2:
Sei $L : \mathcal{A} \to \mathcal{A}$ linearer Operator, so ist die Dissipationsfunktion von L gegeben durch: $D(L; X, Y) := L(X^\dagger Y) - L(X^\dagger)Y - X^\dagger L(Y)$.

Offenbar gibt diese Dissipationsfunktion von L gewissermaßen ein Maß dafür an, wie sehr der jeweilige Generator von einer Derivation abweicht (auf denen die Dissipationsfunktion verschwindet).

Auf dem Raum der vollständig positiven Operatoren ($CP(\mathcal{A})$) läßt sich wie folgt eine Halbordnung einführen:

Definition 3.3:
Sei Ψ,$\Phi \in CP(\mathcal{A})$, so ergibt: $\Psi \leq \Phi :\Leftrightarrow \Phi - \Psi \in CP(\mathcal{A})$ eine Halbordnung auf $CP(\mathcal{A})$.

Anhand dieser Dissipationsfunktion definiert Lindblad eine weitere spezielle Klasse von Operatoren:

Definition 3.4:
Sei $L : \mathcal{A} \to \mathcal{A}$ beschränkte *-Abbildung (i.e. linear und $L(X^\dagger) = L(X)^\dagger$) mit $L(\mathbb{1}) = 0 \; \forall X \in \mathcal{A}$ sowie $D(L_n; X, X) \geq 0 \; \forall X \in M_n(\mathcal{A})$ so nennen wir L vollständig dissipativ, kurz: $L \in CD(\mathcal{A})$. Mit $CD(\mathcal{A})_\sigma$ bezeichnen wir die Teilmenge der ultraschwach(schwach*)-stetigen Elemente aus $CD(\mathcal{A})$.

Die Eigenschaften: $L(X^\dagger) = L(X)^\dagger$ und $L(\mathbb{1}) = 0$ übertragen sich auf die tensorierten Abbildungen $L_n := L \otimes \mathbb{1}_n$ in offensichtlicher Weise.
Für $D(L) : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \to \mathcal{A}$ gilt wegen Bilinearität die übliche Polarisations-Identität, d.h. insbesondere ist $D(L)$ bereits eindeutig durch seine "Diagonal-Werte" $D(L; X, X)$ bestimmt.

Aus der wesentlichen Vereinfachung (84) der Operatoren auf einem endlich-dimensionalen Hilbertraum ergibt sich die Beschränktheit und beliebige Stetigkeitsanforderungen der betrachteten Abbildungen L unmittelbar; dies führt zu einer erleichterten Behandlung folgender Sätze.

Satz 3.2:
$D(L)$ determiniert L bis auf einen Hamiltonian (d.h. einen liouville'schen Term).

Beweis:
Offenbar ist $D(L)$ linear in L, somit folgt aus $D(L) = D(K)$: $D(L-K) = 0$. Sei nun $M := L - K$, so wissen wir mittels $D(M) = 0$, daß M eine Derivation ist. Jede Derivation einer W^*-Algebra (also insbesondere für $M_N(\mathbb{C})$) ist eine innere, i.e. $\exists! Y \in \mathcal{A}$ mit: $M(X) = [Y, X]$ $\forall X \in \mathcal{A}$. Aus der Hermitizität von M folgt selbiges für $H := \frac{1}{i} Y$.

□

Für Generatoren L, die Derivationen sind, ergibt sich offenbar die gewohnte unitäre Zeitentwicklung gemäß Gleichung (5). Umgekehrt läßt sich zeigen, falls L eine Gruppe generiert, so ist $D(L) = 0$, also L Derivation und als Liouville-Term darstellbar. Dementsprechend liefert uns D auch ein Kriterium für Irreversibilität der erzeugten Evolutions-Halbgruppe.

Satz 3.3:
Sei $\Lambda_t : M_N(\mathbb{C}) \to M_N(\mathbb{C})$ eine durch eine hermitesche, lineare Abbildung generierte Halbgruppe, somit sind folgende Aussagen äquivalent:

i) $\Lambda_t(X^\dagger)\Lambda_t(X) \leq \Lambda_t(X^\dagger X)$ $\forall X \in M_N(\mathbb{C})$ und $\Lambda_t(\mathbb{1}_N) = \mathbb{1}_N$

ii) $D(L; X, X) \geq 0$ $\forall X \in M_N(\mathbb{C})$ und $L(\mathbb{1}_N) = 0$

Beweis:

"⇒":
Ableitung der Ungleichung nach der Zeit bei $t = 0$ ergibt[§]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\left(e^{Lt}(X^\dagger)e^{Lt}(X)\right)_{t=0} &\leq \frac{\partial}{\partial t}\left(e^{Lt}(X^\dagger X)\right)_{t=0} \\ L(X^\dagger)X + X^\dagger L(X) &\leq L(X^\dagger X) \\ \Rightarrow \qquad 0 &\leq D(L; X, X) \end{aligned} \tag{103}$$

Aus der Konstantheit von $\Lambda_t(\mathbb{1}_N)$ folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{Lt}(\mathbb{1}_N)\right)_{t=0} = L(\mathbb{1}_N) = 0 \tag{104}$$

[§]: Hierbei geht natürlich mit ein, daß zum Zeitpunkt $t = 0$ die Gleichheit der Ungleichung eingenommen wird, sowie die im endlich-dimensionalen Falle unkritischen Anforderungen an die Stetigkeit.

"$\Leftarrow$":

Die umgekehrte Beweisrichtung läßt sich leider nicht direkt durchführen. Stattdessen beweisen wir, daß L mit Bedingung ii) eine norm-kontrahierende Halbgruppe erzeugt, für die wir wiederum $\forall t$ eine gegen Λ_t konvergierende Folge von Abbildungen betrachten, die jeweils die gewünschte Eigenschaft i) erfüllen, somit selbiges für den Limes gilt.

Gemäß Lindblad$^{(Ldbd,'76)}$ ist L genau dann Generator einer norm-kontrahierenden Halbgruppe, falls gilt:

$$\Theta(L) \quad := \quad \lim_{t \searrow 0} \frac{1}{t}\big(\|\mathbb{1}_{N^2} - tL\| - 1\big) \quad \leq \quad 0 \tag{105}$$

Laut Korollar 1 aus (D&R, '66) läßt sich die Norm einer linearen Abbildung wie folgt abschätzen:

$$\|\mathbb{1}_{N^2} - tL\| \quad = \quad \sup_U\big\{\|U + tL(U)\|\big\} \tag{106}$$

Mittels Bedingung ii) und für $t \leq \frac{1}{2}\|L\|^{-1}$ erhalten wir:

$$\begin{aligned} \|U + tL(U)\|^2 \quad &= \quad \|\mathbb{1}_N + t(L(U^\dagger)U + U^\dagger L(U) + t^2 L(U^\dagger)L(U)\| \\ &\overset{ii)}{\leq} \quad \|\mathbb{1}_N + t^2 L(U^\dagger)L(U)\| \\ &\leq \quad 1 + t^2\|L\|^2 \end{aligned} \tag{107}$$

Woraus direkt folgt:

$$\frac{1}{t}\big(\|\mathbb{1}_{N^2} - tL\| - 1\big) \quad \leq \quad t\|L\|^2 \quad \overset{t\searrow 0}{\longrightarrow} \quad 0 \tag{108}$$

L erzeugt also eine norm-kontrahierende Halbgruppe; wegen $\Lambda_t(\mathbb{1}_N) = \mathbb{1}_N$ folgt nach oben benanntem Korollar 1$^{(D\&R,'66)}$ die Positivität von Λ_t, welche somit ebenfalls gilt für:

$$S_\lambda \quad := \quad \lambda \int_0^\infty e^{-\lambda t}\Lambda_t\, dt \quad = \quad \frac{\lambda}{\lambda - L} \qquad \forall \lambda > 0 \tag{109}$$

Setzen wir nun an $Y := \frac{1}{\lambda - L}X$, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} S_\lambda(X^\dagger X) \quad &= \quad S_\lambda\big(\lambda^2 Y^\dagger Y - \lambda[L(Y^\dagger)Y + Y^\dagger L(Y)] + L(Y^\dagger)L(Y)\big) \\ &\geq \quad S_\lambda\big(\lambda(\lambda - L)Y^\dagger Y\big) \quad = \quad \lambda^2 Y^\dagger Y \quad = \quad S_\lambda(X^\dagger)S_\lambda(X) \end{aligned} \tag{110}$$

wobei wir an der Ungleichung die Eigenschaft verwendet haben, daß positive Abbildungen positiver Elemente wiederum positiv sind.

Diese Ungleichung läßt sich wie folgt induktiv auf Potenzen von S_λ fortführen. Sei: ${S_\lambda}^n(X^\dagger X) \geq {S_\lambda}^n(X^\dagger){S_\lambda}^n(X)$ gegeben, so folgt mit $Z := {S_\lambda}^n(X)$ aus der Positivität und Hermitizität von S_λ:

$$\begin{aligned} 0 \quad &\leq \quad S_\lambda\big[{S_\lambda}^n(X^\dagger X) - {S_\lambda}^n(X^\dagger){S_\lambda}^n(X)\big] \\ &= \quad {S_\lambda}^{n+1}(X^\dagger X) - S_\lambda(Z^\dagger Z) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\leq \; {S_\lambda}^{n+1}(X^\dagger X) - S_\lambda(Z^\dagger Z) + \big(S_\lambda(Z^\dagger Z) - S_\lambda(Z^\dagger) S_\lambda(Z)\big) \\ &= \; {S_\lambda}^{n+1}(X^\dagger X) - {S_\lambda}^n(X^\dagger) {S_\lambda}^n(X) \end{aligned} \tag{111}$$

Berücksichtigt man nun die (Norm-)Konvergenz: ${S_{n/t}}^n \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} e^{Lt} = \Lambda_t$, so resultiert Bedingung i) aus Stetigkeitsgründen.
Die Konstantheit von Λ_t auf $\mathbb{1}_N$ ist offenbar.

$\square$

Satz 3.3 ermöglicht es uns, eines der grundlegende Theoreme von Lindblad abzuleiten:

Theorem 3.1:
Sei $L : M_N(\mathbb{C}) \to M_N(\mathbb{C})$ hermitesch, $\Lambda_t := e^{Lt}$; so ist Λ_t genau dann vollständig positiv ($\Lambda_t \in CP(M_N(\mathbb{C}))$, falls $L \in CD(M_N(\mathbb{C}))$.

Beweis:

"$\Rightarrow$":
Die vollständige Dissipativität ergibt sich direkt aus Anwendung von Satz 3.3 auf alle $(\Lambda_t)_n$, bzw. L_n.

"$\Leftarrow$":
Im umgekehrten Fall schließen wir mittels Bedingung 3.3 i) wie folgt auf die Positivität von Λ_t, was sich auf die tensorierten Abbildungen $(\Lambda_t)_n$ direkt übertragen läßt:

Sei $Y \in M_N(\mathbb{C})$ positiv, so läßt es sich darstellen als: $Y = X^\dagger X$ (siehe z.B. Theorem 1.4.4 aus (Sakai, '71)), woraus folgt:

$$\begin{aligned} \Lambda_t(Y) \quad &= \quad \Lambda_t(X^\dagger X) \\ &\overset{S.3.4i)}{\geq} \quad \Lambda_t(X^\dagger)\Lambda_t(X) \quad \geq \quad 0 \end{aligned} \tag{112}$$

$\square$

Für allgemeine W^*-Algebren $\mathcal{A}$ erweitert Lindblad sein Theorem 1 zu folgendem Korollar:

Korollar 3.1:
$\Lambda_t := e^{Lt} : \mathcal{A} \to \mathcal{A}$ ist genau dann norm-stetige dynamische Halbgruppe, wenn $L \in CD(\mathcal{A})_\sigma$.

Diese Verfeinerung hinsichtlich der schwach*-Stetigkeit ist für unsere endlichdimensionale Betrachtung offenbar ohne Belang.

3.4 Generelle Form des Lindblad-Theorems:

Zur Vorbereitung auf seine allgemein-gültige (z.B. auf $\mathcal{A} := \mathcal{B}(\mathscr{H})$ mit beliebigem Hilbertraum $\mathscr{H}$ geltende) Herleitung des Lindblad-Theoremes sei hier das Stinespring-Theorem$^{(Stg,'55)}$ sowie eine erweiterte Fassung nach Kraus$^{(Kraus,'71)}$ angegeben.

Lemma 3.4:
$\Phi : \mathcal{A} \to \mathcal{B} \subset \mathcal{B}(\mathscr{H})$ ist genau dann vollständig positiv, falls eine *-Darstellung $\pi : \mathcal{A} \to \mathscr{K}$, sowie eine beschränkte Abbildung $V : \mathscr{H} \to \mathscr{K}$ in einen (größeren) Hilbertraum $\mathscr{K}$ existieren mit:

$$\Phi(X) \quad = \quad V^{\dagger}\pi(X)V \tag{113}$$

Dabei läßt sich insbesondere die *-Darstellung π so wählen, daß $\pi(\mathbb{1}_{\mathcal{A}}) = \mathbb{1}_{\mathscr{K}}$ gilt$^{(Stg,'55)}$.

Lemma 3.5:
$\Phi \in CP(\mathscr{H})_{\sigma} \Leftrightarrow \Phi(X) = \sum_j V_j^{\dagger} X V_j$, wobei: $V_j, \sum_j V_j^{\dagger} V_j \in \mathcal{B}(\mathscr{H})$.

An dieser Stelle betrachtet Lindblad den Fall, daß $\mathcal{A}$ einen hyperfiniten Faktor$^{(Sakai,'71)}$ in einem separablen Hilbertraum darstellt (dies schließt insbesondere $\mathcal{B}(\mathscr{H})$ ein).
Solch eine Algebra ist generiert durch eine Folge von Typ $I_{n(p)}$-Faktoren $\mathcal{A}_p$ mittels $\mathcal{A} = \big(\bigcup_p \mathcal{A}_p\big)''$ (wobei: $\mathcal{A}_p \subset \mathcal{A}_{p+1})^{(Ldsm,'98)}$. Die Mengen der unitären Elemente aus $\mathcal{A}_p$ bilden hierbei kompakte Gruppen mit invariantem Mittel $\mathcal{M}_p$, gegeben durch das Haar'sche Maß.

Auf dieser Grundlage beweist Lindblad folgenden Satz:

Satz 3.4:
Falls $L \in CD(\mathcal{A})_{\sigma}$, so existiert ein $\Psi \in CP(\mathcal{A})_{\sigma}$ sowie $H \in \mathcal{A}$ hermitesch, so daß $\forall X \in \mathcal{A}$ gilt:

$$L(X) \quad = \quad \Psi(X) - \frac{1}{2}\big\{\Psi(\mathbb{1}_{\mathcal{A}}), X\big\} + i\big[H, X\big] \tag{114}$$

Beweis:

Sei $K_p \in \mathcal{A}$ gegeben durch:

$$K_p \quad := \quad \mathcal{M}_p\big[L(U^{\dagger})U\big] \tag{115}$$

wobei offenbar gilt:

$$\|K_p\| \quad \leq \quad \|L\| \tag{116}$$

Wegen der Invarianz des Mittels $\mathcal{M}_p$ ergibt sich für unitäre $V \in \mathcal{A}$:

$$\mathcal{M}_p\big[L(VU^{\dagger})U\big] \quad = \quad \mathcal{M}_p\big[L(U^{\dagger})UV\big] \quad = \quad K_pV \tag{117}$$

Da sich jedes $X \in \mathcal{A}_p$ als endliche Linearkombination von unitären Elementen aus $\mathcal{A}_p$ darstellen läßt, folgt:

$$\mathcal{M}_p\big[L(XU^\dagger)U\big] \quad = \quad K_p X \tag{118}$$

und für die Dissipationsfunktion resultiert im Mittel:

$$\mathcal{M}_p\big[D(L;UX,UY)\big] \quad = \quad L(X^\dagger)Y - K_p X^\dagger Y - X^\dagger Y K_p^\dagger \tag{119}$$

Definieren wir nun wie folgt:

$$\Psi_p(X) \quad := \quad L(X) - K_p X - X K_p^\dagger \tag{120}$$

woraus wegen $L \in CD(\mathcal{A})$ folgt:

$$\Psi_p(X^\dagger X) \quad = \quad \mathcal{M}_p\big[D(L;UX,UX)\big] \quad \geq \quad 0 \tag{121}$$

d.h. $\Psi_p|_{\mathcal{A}_p}$ ist positiv.

Dieses Argument läßt sich erweitern auf die tensorierten Abbildungen per: $\mathcal{M}_{p,n}\big[L_n(U^\dagger)U\big] \quad = \quad K_p \otimes \mathbb{1}_n$, wobei wir vollständige Positivität von $\Psi_p|_{\mathcal{A}_p}$ erhalten.

Betrachten wir jetzt allgemeiner:

$$\Psi_K(X) \quad := \quad L(X) - KX - XK^\dagger \qquad \forall K \in \mathcal{A} \tag{122}$$

sowie:

$$\Gamma_p \quad := \quad \big\{K \in \mathcal{A} : \Psi_K|_{\mathcal{A}_p} \in CP(\mathcal{A}_p, \mathcal{A}), \|K\| \leq \|L\|\big\} \tag{123}$$

so stellen wir fest, daß mit $K_p \in \Gamma_p$ gilt $\Gamma_p \neq \emptyset$. Wegen $\Gamma_{p+1} \subset \Gamma_p$ ist jeder endliche Schnitt über Γ_p's nichtleer; außerdem ist Γ_p schwach abgeschlossen.

Da der Einheitsball in $\mathcal{A}$ kompakt bezüglich der schwachen Topologie ist, ergeben sich die Γ_p ebenfalls als schwach kompakt, woraus folgt: $\Gamma := \bigcap_p \Gamma_p \neq \emptyset$. Wählen wir ein $K \in \Gamma$ aus, so ist Ψ_K vollständig positiv auf $\bigcup_p \mathcal{A}_p$ und wegen der Schwach*-Stetigkeit von L sogar vollständig positiv auf ganz $\big(\bigcup_p \mathcal{A}_p\big)''$.

Offenbar gilt: $\Psi(\mathbb{1}_\mathcal{A}) = -K - K^\dagger$, womit die Behauptung folgt mittels: $H := \frac{i}{2}(K^\dagger - K)$.

□

Satz 3.5:

Falls $\Psi \in CP(\mathcal{A})$, $H \in \mathcal{A}$ hermitesch, dann ist:

$$L(X) \quad = \quad \Psi(X) - \frac{1}{2}\big\{\Psi(\mathbb{1}_\mathcal{A}), X\big\} + i\big[H, X\big] \tag{124}$$

vollständig dissipativ.

Beweis:
$L(\mathbb{1}_N) = 0$ und $L(X^\dagger) = L(X)^\dagger$ offenbar.
Für die Dissipationsfunktion gilt:

$$\begin{aligned} D(L;X,X) &= L(X^\dagger X) - X^\dagger L(X) - L(X^\dagger)X \\ &= \Psi(X^\dagger X) - X^\dagger \Psi(X) - \Psi(X^\dagger)X + X^\dagger \Psi(\mathbb{1}_{\mathcal{A}})X \\ &= V^\dagger \pi(X^\dagger X)V - X^\dagger V^\dagger \pi(X)V - V^\dagger pi(X^\dagger)VX + X^\dagger V^\dagger VX \\ &= (\pi(X)V - VX)^\dagger(\pi(X)V - VX) \;\geq\; 0 \end{aligned} \tag{124}$$

wobei wir für die vorletzte Gleichung das Stinespring-Theorem (Lemma 3.4) mit der Nebenbedingung $\pi(\mathbb{1}_{\mathcal{A}}) = \mathbb{1}_{\mathscr{H}}$ benutzt haben.
Das gleiche Argument läßt sich auf die Dissipationsfunktionen der tensorierten Abbildungen $D(L_n;X,X)$ anwenden.

□

Mithilfe der letzten beiden Sätze (sowie Lemma 3.5) läßt sich jetzt wie folgt das allgemeine Lindblad-Theorem beweisen:

Theorem 3.2:
$L \in CD(\mathscr{H})_\sigma$ genau dann, wenn es darstellbar ist als:

$$L(X) = \sum_j \left(V_j^\dagger X V_j - \frac{1}{2}\{V_j^\dagger V_j, X\}\right) + i[H,X] \tag{125}$$

wobei: V_j,$\sum_j V_j^\dagger V_j \in \mathcal{B}(\mathscr{H})$, $H \in \mathcal{B}(\mathscr{H})$ hermitesch.

Beweis 3.5:

$\Rightarrow$:
Wende Satz 3.4 an, sowie Lemma 3.5 auf das dabei auftretende $\Psi \in CP(\mathscr{H})_\sigma$.

$\Leftarrow$:
Gemäß Lemma 3.5 ist das Ψ, das sich aus Umwandlung von Gleichung (125) in (114) ergibt aus $CP(\mathscr{H})_\sigma$, woraus mittels Satz 3.5 folgt: $L \in CD(\mathscr{H})$. Die schwach*-Stetigkeit bleibt offenbar in Relation (114) erhalten.

□

Dies stellt wohlgemerkt die Version der Lindblad-Gleichung im Heisenberg-Bild dar, für unser gewohntes Schrödinger-Bild ergibt sich eine analoge Form:

$$L(\rho) = \sum_j \left([V_j\rho, V_j^\dagger] + [V_j, \rho V_j^\dagger]\right) - i[H,\rho] \tag{126}$$

Man könnte versucht sein, die Darstellung (126) der Generatoren als Zerlegung in einen hamilton'schen (bzw. liouville'schen) und einen dissipativen Anteil zu interpretieren; dabei sollte man aber nicht vergessen, daß diese Zerlegung nach Lindblad (im Gegensatz zur endlich-dimensionalen sehr konstruktiven Herleitung in Kapitel 3.2) im allgemeinen keine eindeutige ist.

Dementsprechend stellt sich hier die Frage, inwieweit man diese Herleitung physikalisch interpretieren darf.

Wie wir festgestellt haben, liefert uns die Dissipationsfunktion $D(L;X,X)$ nicht nur eine konstruktive Möglichkeit, die Generatoren vollständig positiver Halbgruppen der Form nach zu klassifizieren; sie gibt uns auch ein Kriterium, auf $CD(\mathscr{H})_\sigma$ wie folgt eine Äquivalenzrelation einzuführen:

$$L \sim L' \quad :\Leftrightarrow \quad D(L;X,X) = D(L';X,X) \quad \forall X \in \mathcal{B}(\mathscr{H}) \tag{127}$$

d.h. solche dissipativen Abbildungen werden gleichgesetzt, die sich nur um einen liouville'schen Term unterscheiden (siehe: Satz 3.2).

Betrachten wir nun den Quotientenraum bezüglich dieser Äquivalenz, so läßt sich darauf ebenfalls eine Halbordnung definieren mittels:

$$L \leq L' \quad :\Leftrightarrow \quad D(L_n;X,X) = D(L'_n;X,X) \quad \forall X \in M_n(\mathcal{B}(\mathscr{H})), \quad \forall n \in \mathbb{N} \tag{128}$$

Wobei sich die Repräsentantenunabhängigkeit dieser Definition aus Satz 3.2 ergibt.

Es bietet sich an, anhand dieser Kategorisierung weitere Untersuchungen vollständig dissipativer Generatoren anzustreben.

G. Lumer und R.S. Phillips$^{(L\&P,'61)}$, sowie E.B. Davies$^{(Dav,'76)}$ haben eine etwas andere Charakterisierung für Dissipativität von Generatoren verwendet, nämlich die Negativität des Realteiles der Erwartungswerte.

Aus dieser Definition resultiert die Erzeugung stark (i.e. norm-)stetiger, kontrahierender Halbgruppen (und umgekehrt ergibt Sie sich als notwendige Voraussetzung an Generatoren solcher Halbgruppen). Im endlich-dimensionalen Falle spielen die unterschiedlichen Stetigkeits-Kriterien offenbar keine Rolle; insbesondere werden wir für den Fall hermitescher Lindblad-Operatoren in Kapitel 3.6 die stark-stetige Dissipativität direkt nachweisen und interpretieren.

3.5 Exakte Lösbarkeit der endlich-dimensionalen Lindblad-Gleichung:

Da sich die endlich-dimensionale lineare Lindblad-Gleichung:

$$\dot{\rho}_{Sys}(t) = -\frac{i}{\hbar}\big[H_0, \rho_{Sys}(t)\big] + \sum_j \Big(L_j \rho_{Sys}(t) L_j^\dagger - \frac{1}{2} L_j^\dagger L_j \rho_{Sys}(t) - \frac{1}{2}\rho_{Sys}(t) L_j^\dagger L_j \Big) \tag{81}$$

zu einer beliebigen Basis von $M_N(\mathbb{C})$ als (N^2-dimensionale) Matrix-Gleichung wie folgt beschreiben und lösen läßt:

$$\begin{aligned} \dot{\vec{\rho}}_{Sys}(t) &= \hat{\mathcal{L}} \vec{\rho}_{Sys}(t) \\ \Rightarrow \quad \vec{\rho}_{Sys}(t) &= e^{\hat{\mathcal{L}} t} \vec{\rho}_{Sys}(0) \end{aligned} \tag{129}$$

verlagert sich die Problematik somit auf die Bestimmung der Eigenwerte und Eigenvektoren von $\hat{\mathcal{L}}$.

3.6 Verhalten der Lindblad-Gleichung für hermitesche Lindblad-Operatoren:

Betrachten wir auf dem Raum der System-Dichtematrizen das Skalarprodukt:

$$\big\langle \rho_1 | \rho_2 \big\rangle \quad := \quad tr_{Sys}\big\{ \rho_1^\dagger \rho_2 \big\} \tag{130}$$

und zerlegen die Lindblad-Gleichung wie folgt in den hamilton'schen und den dissipativen Anteil:

$$\mathcal{L}_{red}(\rho) := \underbrace{-i\big[H_0, \rho\big]}_{T_1} \underbrace{- \sum_j \Big(\frac{1}{2} L^{(j)\dagger} L^{(j)} \rho - L^{(j)} \rho L^{(j)\dagger} + \frac{1}{2} \rho L^{(j)\dagger} L^{(j)} \Big)}_{T_2} \tag{131}$$

So erkennt man offenbar für den ersten vom System-Hamiltonian abhängigen Anteil T_1 ein bezüglich unseres Skalarproduktes antisymmetrisches Verhalten:

$$\big\langle \rho_1 | T_1 \rho_2 \big\rangle \quad = \quad -\big\langle T_1 \rho_1 | \rho_2 \big\rangle \tag{132}$$

Für den Lindblad-Anteil T_2 weist man im Falle selbstadjungierter Lindblad-Operatoren ($L^{(j)\dagger} = L^{(j)}$) leicht Symmetrie nach:

$$\begin{aligned} \big\langle T_2 \rho_1 | \rho_2 \big\rangle &= tr_{Sys}\Big\{ \sum_j \Big(\frac{1}{2} L^{(j)\dagger} L^{(j)} \rho_1 - L^{(j)} \rho_1 L^{(j)\dagger} + \frac{1}{2} \rho_1 L^{(j)\dagger} L^{(j)} \Big)^\dagger \rho_2 \Big\} \\ &= tr_{Sys}\Big\{ \sum_j \Big(\frac{1}{2} \rho_1^\dagger L^{(j)\dagger} L^{(j)} - L^{(j)} \rho_1^\dagger L^{(j)\dagger} + \frac{1}{2} L^{(j)\dagger} L^{(j)} \rho_1^\dagger \Big) \rho_2 \Big\} \\ &= tr_{Sys}\Big\{ \sum_j \rho_1^\dagger \Big(\frac{1}{2} L^{(j)\dagger} L^{(j)} \rho_2 - L^{(j)\dagger} \rho_2 L^{(j)} + \frac{1}{2} \rho_2 L^{(j)\dagger} L^{(j)} \Big) \Big\} \\ &= \big\langle \rho_1 | T_2 \rho_2 \big\rangle \end{aligned} \tag{133}$$

Daraus folgt für den uns interessierenden Fall der Eigenwert-Lösungen ρ_j:

$$\begin{aligned} T\rho_j &= \lambda_j \rho & (134) \\ \Rightarrow \langle \rho_j | T\rho_j \rangle &= \lambda_j \langle \rho_j | \rho_j \rangle \\ &= \underbrace{\langle \rho_j | T_1 \rho_j \rangle}_{\in i\mathbb{R}} - \underbrace{\langle \rho_j | T_2 \rho_j \rangle}_{\in \mathbb{R}} & (135) \end{aligned}$$

Wohlgemerkt muß eine Lösung ρ_j der Eigenwertgleichung (139) nicht notwendig Eigen"zustand" der beiden Teiloperationen T_1, bzw. T_2 sein; aber es wird erkennbar, daß der reellwertige (und somit dissipative, da im Falle negativer Werte exponentiell vernichtende) Einfluß von T_2 ausgeht.

Für den Fall selbstadjungierter Lindblad-Operatoren kann man für den reellwertigen Anteil insbesondere zeigen:

$$\begin{aligned} \langle \rho | T_2 \rho \rangle &= tr\Big\{ \sum_j \rho^\dagger \Big(L^{(j)} L^{(j)} \rho - 2L^{(j)} \rho L^{(j)} + \rho L^{(j)} L^{(j)} \Big) \Big\} \\ &= tr\Big\{ \sum_j \rho^\dagger L^{(j)} L^{(j)} \rho - L^{(j)} \rho^\dagger L^{(j)} \rho - \rho^\dagger L^{(j)} \rho L^{(j)} + L^{(j)} \rho^\dagger \rho L^{(j)} \Big\} \\ &= tr\Big\{ \sum_j \Big(\rho^\dagger L^{(j)} - L^{(j)} \rho^\dagger \Big) \Big(L^{(j)} \rho - \rho L^{(j)} \Big) \Big\} \\ &= tr\Big\{ \sum_j \Big(L^{(j)} \rho - \rho L^{(j)} \Big)^\dagger \Big(L^{(j)} \rho - \rho L^{(j)} \Big) \Big\} \\ &= tr\Big\{ \sum_j \Big[L^{(j)}, \rho \Big]^\dagger \Big[L^{(j)}, \rho \Big] \Big\} \\ &= \Big\langle \sum_j \Big[L^{(j)}, \rho \Big] \Big| \Big[L^{(j)}, \rho \Big] \Big\rangle \\ &= \Big\| \sum_j \Big[L^{(j)}, \rho \Big] \Big\|^2 \quad \geq \quad 0 & (136) \end{aligned}$$

wobei wir abermals die zyklische Invarianz der (endlichdimensionalen) Spur genutzt haben.

Offenbar ergibt sich hieraus für die gesuchten N^2 Eigen"zustände" der Gleichung $T\rho_j = \lambda_j \rho_j$ automatisch ein nicht-positiver Realanteil. Somit dürfen wir (zumindest im Falle selbstadjungierter Lindblad-Operatoren) das typische Verhalten erwarten, daß einige (mutmaßlich die meisten) Anteile einer beliebigen Anfangs-Dichtematrix $\rho(0)$ exponentiell schnell verschwinden.

Demgegenüber unterliegen die übriggebliebenen stationären Anteile, nämlich diejenigen, die laut Gleichung (141) mit dem Lindblad-Operator kommutieren, nur noch einer phasenwertigen Fluktuation (bedingt durch den System-Hamiltonian).

4) Vergleich der Methoden:

Wir haben drei recht unterschiedliche Zugangsweisen untersucht, für offene quantenmechanische Systeme, bzw. deren reduzierte Dichtematrix Mastergleichungen herzuleiten.

Unser erster, auf erheblichen approximativen Annahmen basierende Zugang führt uns bei gegebenem Hamiltonian unmittelbar zu einer Mastergleichung, die sich in den meisten (exemplarischen) Fällen zumindest numerisch lösen läßt. Weitergehende Untersuchungen ergeben allerdings, daß solche Lösungen dieser näherungsweise abgeleiteten Mastergleichungen nur sehr begrenzt gültig sind.

Wesentlicher Ansatz dieser approximativen Behandlung besteht in der Annahme, daß ein reduziertes System **S** in einer als stationär (weil physikalisch erheblich größer) vorausgesetzten Umgebung **R** hinreichend genau mittels einer Entwicklung um den faktorisierten "Zustand" $\rho_{Sys}(t) \otimes \rho_{Umg}$ beschrieben werden könne.

Diese Idee ist auch Ausgangspunkt der Projektions-Operator-Technik, die eine Zerlegung des totalen Dichte-Operators ρ_{tot} in einen solchen faktorisierten Term und den restlichen als "irrelevant" bezeichneten Anteil propagiert. Das Verfahren der Projektions-Operatoren liefert dabei eine exakte Umformulierung des Problems entweder in eine laplace-transformierte Gleichung† oder eine sehr einfache Form der Mastergleichung$^{(C\&S,'79)}$ der Form:

$$\dot{\rho}_{Sys}(t) \;=\; \mathcal{K}(t)\big(\rho_{Sys}(t)\big) \tag{79}$$

mit formaler Lösung:

$$\rho_{Sys}(t) \;=\; e^{\int_0^t \mathcal{K}(\tau)\,d\tau}\rho_{Sys}(0) \tag{80}$$

Wobei in der Regel $\mathcal{K}(t)$ nur in den ersten Termen einer Potenzreihe bestimmbar ist. Dennoch bleibt fraglich oder zu erörtern, inwieweit sich der sogenannte "irrelevante" Anteil an der Zustandsentwicklung, bzw. dem totalen Liouville-Operator, als störungstheoretisch behandelbar erweist.

Demgegenüber führt uns der allgemeingültige Ansatz, aus den notwendigen Voraussetzungen eines zeitlich homogenen, den Status der Dichtematrizen erhaltenden Prozesses auf die Lindblad-Gleichung (81) als Grundstruktur zu schließen, zu einer noch einfacheren Mastergleichung:

$$\dot{\rho}_{Sys}(t) \;=\; \mathcal{L}\big(\rho_{Sys}(t)\big) \tag{83}$$

mit formaler Lösung:

$$\rho_{Sys}(t) \;=\; e^{\mathcal{L}t}\rho_{Sys}(0) \tag{137}$$

†: Die formal relativ überschaubare Gleichung (73) sollte nicht darüber hinwegtäuschen, daß das wesentliche Problem darin besteht, $\tilde{\mathbf{K}}(\omega)$ mittels $\mathcal{L}_{irr}$ und $\mathbb{Q}\mathcal{L}_{irr}$ zu bestimmen.

Dies ermöglicht uns zwar eine sehr klare Formulierung des Verhaltens offener Systeme; insbesondere für die von uns betrachteten endlichdimensionalen Fälle lassen sich leicht Schlußfolgerungen auf das qualitative, diffusive Verhalten solcher Mastergleichungen ziehen.

Dennoch zeigt uns diese abstrakte Betrachtung nicht explicit, wie wir von einem Modell eines Gesamtsystems auf die Mastergleichung des "relevanten" (Sub)Systems zu schließen haben; eine Herleitung der Lindblad-Operatoren für konkrete Modelle ist hierbei noch nicht gegeben.

Ein weiterer wesentlicher Unterschied (weswegen die Mastergleichung nach der Lindblad-Form auch meist "markov'sch" genannt wird) liegt in der zeitlichen Nicht-Homogenität der ersten beiden Mastergleichungen begründet.

Ausgehend von einem ausgezeichneten faktorisierten Anfangszustand des Gesamtsystems ergeben sich bei den ersten zwei störungstheoretischen Ansätzen (Integro-)Differential-Gleichungen, bei denen offenbar eine retardierte Zeitabhängigkeit zu berücksichtigen ist, deren rückwärtige Reichweite durch den Zeitpunkt $t = 0$ des korrelationsfreien Anfangszustandes begrenzt ist.

Die Beschreibung der Entwicklung eines offenen Systems mittels dynamischer Halbgruppen setzt wiederum eine zeitliche Homogenität des Prozesses voraus, die offenbar maßgeblich zur Einfachheit der endgültigen Lindblad-Form beiträgt.

Eine weitere Einschränkung der Allgemeingültigkeit der Darstellung nach Lindblad ergibt sich aus der geforderten Norm-Stetigkeit der Evolutions-Halbgruppe (d.h.: Beschränktheit des entsprechenden Generators); dabei handelt es sich um eine Zusatzannahme, die im Falle endlich-dimensionaler Betrachtungen natürlich automatisch (für schwach*-stetige Λ_t) erfüllt ist.

IV. Quantum State Diffusion:

1) Quantum State Diffusion als alternative Beschreibung der Dynamik offener quantenmechanischer Systeme:

Bisher haben wir für offene quantenmechanische Systeme Mastergleichungen hergeleitet, deren numerisch oder analytisch bestimmbare Lösungen $\rho_{Sys}(t)$ die Zeitentwicklung des Systems beschreiben. Dabei stellt im Regelfall diese System-Dichtematrix keinen reinen quantenmechanischen Zustand dar, sondern repräsentiert ein statistisches Gemisch; dessen physikalische Eigenschaften sind anhand seiner Observablen-Erwartungswerte gemäß Gleichung (6) determiniert.

N. Gisin und I.C. Percival$^{(G\&P,'92;'93)}$ haben 1992 den Begriff der Quantum State Diffusion (**QSD**) entwickelt, wobei sie versucht haben, die Dynamik offener Systeme anhand der Zeitentwicklung einzelner "Zustände" zu untersuchen. Dabei ist der Begriff "Zustand" als Repräsentant einer möglichen, individuellen "Trajektorie" (auch genannt: "Quantentrajektorie") des Systems zu verstehen, die somit stochastischen Einflüssen unterliegt.

Das Konzept der QSD besteht nun darin, zu einer gegebenen Mastergleichung ein korrespondierendes Ensemble stochastischer Schrödingergleichungen zu finden, deren Lösungen im folgenden Sinne mathematisch äquivalent zu der Lösung $\rho_{Sys}(t)$ der Mastergleichung sind‡:

$$\rho_{sys}(t) = \int P(z)|\psi_z(t)\rangle\langle\psi_z(t)|\, dz \tag{138}$$

$$=: M\big[|\psi_z(t)\rangle\langle\psi_z(t)|\big] \tag{139}$$

$M[..]$ bezeichne hierbei den sogenannten Ensemble-Erwartungswert gemittelt über das klassische Rauschen z_t bezüglich eines gewissen Verteilungs-Funktionals $P(z)$.

Sind die Lösungen $|\psi_z(t)\rangle$ einer entsprechenden stochastischen Schrödingergleichung bekannt, so lassen sich mittels benannter Ensemble-Mittelung wie folgt Erwartungswerte einer Observablen $\hat{O}$ des Systems bestimmen:

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{O} \right\rangle_t &= tr_{Sys}\{\hat{O}\rho_{Sys}(t)\} && (6)\\
&= \sum_{|j\rangle}\langle j|\hat{O}\rho_{Sys}(t)|j\rangle \\
&= M\Big[\sum_{|j\rangle}\langle\psi_z(t)|j\rangle\langle j|\hat{O}|\psi_z(t)\rangle\Big] \\
&= \int P(z)\langle\psi_z(t)|\hat{O}|\psi_z(t)\rangle\, dz \quad =: M\Big[\langle\hat{O}\rangle_{z,t}\Big] && (140)
\end{aligned}$$

‡: N. Gisin hat bereits 1984 eine stochastische Schrödingergleichung entworfen, aus deren Lösungen im Ensemble-Mittel die Dichtematrix zu einer entsprechenden Mastergleichung resultiert$^{(Gisin,'84)}$.

Dabei ist zu beachten, daß das Ensemble-Mittel über den entsprechende Raum aller möglichen Zufallsvariablen zu berechnen ist, was in der Regel nur näherungsweise möglich ist. Dennoch haben sich in den zahlreichen numerischen Untersuchungen sehr "realistische" Ergebnisse gezeigt (siehe z.B.: (G&P, '92), (DGS, '98), (DGS, '99), etc.).

Einer der großen (numerischen) Vorteile dieses Verfahrens besteht trotz des Mehraufwandes der Ensemble-Mittelung darin, daß bezüglich der Lösung der Differentialgleichungen (die man im stochastischen Falle meist mittels Monte-Carlo-Methoden erhält) für die Bestimmung der Funktionen $|\psi_z(t)\rangle$ nur N Komponenten zu berücksichtigen sind, gegenüber N^2 (bzw. $N^2/2$) im Falle der Dichtematrizen. Welche Methode sich in der Praxis als günstiger erweist, hängt natürlich vom gegebenen Einzelfall ab.

Die Äquivalenz zwischen deterministischen Lösungen einer (Fokker-Planck-) Mastergleichung und der Mittelung der Lösungen einer korrespondierenden stochastischen Differentialgleichung (vom Langevin-Typ) ist bereits in anderen Zusammenhängen erkannt worden (dazu: (Lemm, '99) und (vKp, '81)).

2) QSD-Gleichungen im Lindblad-Falle:

Die zu einer gegebenen Mastergleichung korrespondierenden stochastischen "Schrödingergleichungen"[%] (im folgenden QSD-Gleichungen genannt) sind nicht eindeutig bestimmt. Für den Fall einer Mastergleichung in Lindblad-Form (81) lassen sich 2 ausgezeichnete QSD-Gleichungen bestimmen, dabei orientieren wir uns im folgenden an den Artikeln von Strunz et al ((DGS, '98), (YDGS, '99)) und verwenden daher das sogenannte Stratonovich-Kalkül (siehe Anhang B).

2.1 Lineare QSD-Gleichung für nicht-normierte Zustände:

Der Übersichtlichkeit halber behandeln wir hier das Auftreten eines einzelnen Lindblad-Operators (der allgemeine Fall ergibt sich durch Einfügen von Indices und Summierung über selbige); für die entsprechende lineare stochastische Schrödinger-Gleichung erhalten wir:

$$\frac{d}{dt}\psi_z(t) = -\frac{i}{\hbar}H\psi_z(t) + L\psi_z(t) \circ z_t - \frac{1}{2}L^\dagger L\psi_z(t) \tag{141}$$

$\circ$ stellt hierbei das Stratonovich-Produkt$^{(H\&E,'80)}$ dar, bei z_t handelt es sich um einen komplexwertigen Wiener-Prozeß$^{(Arnld,'73)}$ mit Erwartungswert $M[z_t] = 0$ und folgender Korrelation:

$$M\big[z_t^* z_s\big] = \delta(t-s) \qquad\qquad M\big[z_t z_s\big] = 0 \tag{142}$$

Den Nachweis der Korrespondenz (118) erhält man durch das Differential:
$d\xi := z_t dt$ (für das gilt: $M\big[d\xi^* d\xi\big] = 2dt)^{(G\&P,'92)}$:

$$\begin{aligned}
|d\psi\rangle &= \Big[-\frac{i}{\hbar}H - \frac{1}{2}L^\dagger L\Big]|\psi\rangle dt + L|\psi\rangle \circ d\xi && (143)\\
\Rightarrow \langle d\psi| &= \langle\psi|\Big[\frac{i}{\hbar}H - \frac{1}{2}L^\dagger L\Big]dt + \langle\psi|L^\dagger \circ d\xi^* && (144)\\
\Rightarrow d\rho &= M\big[|d\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle d\psi| + |d\psi\rangle\langle d\psi|\big]\\
&= M\Big[\Big(-\frac{i}{\hbar}H - \frac{1}{2}L^\dagger L\Big)|\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\psi|\Big(\frac{i}{\hbar}H - \frac{1}{2}L^\dagger L\Big)dt\\
&\qquad + L|\psi\rangle\langle\psi|L^\dagger d\xi^* d\xi\Big] + \mathcal{O}(dt^{3/2}) && (145)
\end{aligned}$$

woraus unter Vernachlässigung der $\mathcal{O}(dt^{3/2})$-Terme die Gültigkeit der Lindblad-Gleichung folgt:

$$\begin{aligned}
\dot\rho &= \frac{d\rho}{dt}\\
&= -\frac{i}{\hbar}\big[H,\rho\big] - \frac{1}{2}\big[L^\dagger L\rho - 2L\rho L^\dagger + \rho L^\dagger L\big] && (146)
\end{aligned}$$

%: Wir meinen keine Schrödingergleichung im klassischen Sinne, sondern eine Differentialgleichung erster Ordnung, deren Lösungen wir als "Zustände" interpretieren wollen.

Der rechnerisch angenehme Effekt der Linearität dieser stochastischen Differentialgleichung geht allerdings leider auf Kosten nicht-normierter, bzw. nicht mit der Zeit norm-erhaltender Lösungen.

Insbesondere stellt sich bei näherer Untersuchung heraus, daß die Norm $||\psi_z(t)||$ der Lösungen mit Wahrscheinlichkeit 1 gegen 0 streben; praktisch alle numerisch erzeugten Lösungen dieser Differentialgleichung nehmen somit für größere Zeiten nur noch einen verschwindend geringen Anteil an der Darstellung der reduzierten Dichtematrix im stochastischen Mittel (Gl.(139)) ein.

2.2 Nicht-lineare QSD-Gleichung für normierte Zustände:

Um diesem Problem zu entgehen, bzw. auch um physikalisch "sinnvolle" (weil normierte) Zustände zu betrachten, führt man eine sogenannte Girsanov-Transformation$^{(DGS,'98)}$ durch, d.h. effektiv normiert man die Lösungen gemäß:

$$\tilde{\psi}_z(t) = \frac{\psi_z(t)}{||\psi_z(t)||} \tag{147}$$

und muß das Verteilungs-Funktional entsprechend zeitabhängig korrigieren:

$$\tilde{P}_t(z) = ||\psi_z(t)||^2 P(z) \tag{148}$$

Für die stochastische Schrödinger-Gleichung resultiert daraus:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\psi}_z(t) = -\frac{i}{\hbar}H\tilde{\psi}_z(t) \quad &+ \quad \big(L - \langle L \rangle_t\big)\tilde{\psi}_z(t) \circ \big(z_t + \langle L^\dagger \rangle_t\big) \\ &- \quad \frac{1}{2}\big(L^\dagger L - \langle L^\dagger L \rangle_t\big)\tilde{\psi}_z(t) \end{aligned} \tag{149}$$

mit:

$$\langle A \rangle_t := \langle \tilde{\psi}(t)|A|\tilde{\psi}(t)\rangle \tag{150}$$

Dabei sollte man nicht vergessen, daß es sich hierbei um eine stochastische Gleichung nach Stratonovich handelt; im Itô-Kalkül ergeben sich etwas andere Terme (siehe Anhang B).
Neben der "Korrektur" der Lindblad-Operator-Terme um deren zeitabhängige Erwartungswerte trägt insbesondere das "geshiftete Rauschen" $z_t + \langle L^\dagger \rangle_t$ zur Nicht-Linearität dieser QSD-Gleichung bei.

3) Zeitlich nicht-lokale QSD-Gleichungen:

Strunz et al.$^{(DGS,'99),(YDGS,'99)}$ haben folgendes Modell einer Umgebung als Ensemble voneinander unabhängiger harmonischer Oszillatoren (bei gegebener Frequenzverteilung), sowie einer in den Umgebungs-Variablen linearen Kopplung untersucht:

$$H_{tot} := H_{sys} - \sum_{\lambda} g_{\lambda}(L\hat{a}_{\lambda}^{\dagger} + L^{\dagger}\hat{a}_{\lambda}) + \sum_{\lambda} \omega_{\lambda}\hat{a}_{\lambda}^{\dagger}\hat{a}_{\lambda} \tag{151}$$

Mittels der Feynman-Vernon-Einfluß-Funktional-Methode§ ergibt sich daraus eine lineare stochastische Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{d}{dt}\psi_z(t) = -\frac{i}{\hbar}H\psi_z(t) + L\psi_z(t) \circ z_t - L^{\dagger}\int_0^t \alpha(t,s)\frac{\delta\psi_z(t)}{\delta z_s}\, ds \tag{152}$$

Der stochastische Einfluß der Umgebung wird dabei durch einen komplexwertigen Gauß-Prozeß z_t beschrieben; allerdings handelt es sich hier i.a. nicht mehr um ein weißes Rauschen, sondern es gilt für die Korrelation vielmehr:

$$M\big[z_t^* z_s\big] = \alpha(t,s) \qquad\qquad M\big[z_t z_s\big] = 0 \tag{153}$$

wobei $\alpha(t,s)$ mit Umgebungs-Korrelationsfunktion bezeichnet wird.
Im Wesentlichen ist hier der zeitlich nicht-lokale Einfluß (quasi das zeitliche "Erinnerungsvermögen") der gekoppelten Umgebung verschlüsselt.

Kern dieses Ausdrucks ist die funktionale Ableitung $\delta\psi_z(t)/\delta z_s$, die wir in Anwendung auf den Zustand $\psi_z(t)$ formal als Operator schreiben wollen:

$$\hat{O}(t,s,z)\psi_z(t) := \frac{\delta\psi_z(t)}{\delta z_s} \tag{154}$$

Im Falle des sogenannten "markov'schen Limes", i.e.:

$$\alpha(t,s) \sim \delta(t-s) \tag{155}$$

erhalten wir gemäß (141):

$$\hat{O}(t,t,z) = L \tag{156}$$

Die Zeit- und Zufallsvariablen-Abhängigkeit von $\hat{O}(t,s,z)$ läßt sich in einigen Fällen bestimmen anhand folgender vorausgesetzter **Konsistenz-Bedingung**:

$$\frac{d}{dt}\frac{\delta}{\delta z_s}\psi_z(t) = \frac{\delta}{\delta z_s}\frac{d}{dt}\psi_z(t) \tag{157}$$

§: Siehe dazu (Strz, '96) und (D&S, '97), sowie die dort angegebenen Referenzen:(F&V, '63), (F&H, '65) und den häufig zitierten Artikel (C&L, '83).

Wie bereits erwähnt stellen sich die Lösungen der linearen stochastischen Differentialgleichungen (152) als nicht normerhaltend heraus; daher wird analog zur lindblad'schen QSD eine Girsanov-Transformation durchgeführt, bei der man erhält$^{(YDGS,'99)}$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\psi}_z(t) &= -\frac{i}{\hbar}H\tilde{\psi}_z(t) + \big(L - \langle L\rangle_t\big)\tilde{\psi}_z(t) \circ \tilde{z}_t \\ & - \int_0^t \alpha(t,s)\Big[\big(L^\dagger - \langle L^\dagger\rangle_t\big)\hat{O}(t,s,\tilde{z}) \\ & - \Big\langle \big(L^\dagger - \langle L^\dagger\rangle_t\big)\hat{O}(t,s,\tilde{z})\Big\rangle_t\Big]\, ds\tilde{\psi}_z(t) \end{aligned} \tag{158}$$

wobei sich das "geshiftete" Rauschen ergibt zu:

$$\tilde{z}_t = z_t + \int_0^t \alpha(t,s)^* \langle L^\dagger\rangle_s\, ds \tag{159}$$

3.1 Approximative Behandlung der zeitlich nicht-lokalen QSD:

Um die zeitlich nicht-lokalen QSD-Gleichungen (numerisch) lösen zu können, muß man $\hat{O}(t,s,z)$, bzw. $\int_0^t \alpha(t,s)\hat{O}(t,s,\tilde{z})\, ds$ bestimmen. Es bieten sich hierbei zwei approximative Möglichkeiten an:

i) Zeitliche Entwicklung von $\hat{O}(t,s,z)$:

Unter der Annahme, daß vom Operator $\hat{O}(t,s,z)$ bei kurzen Korrelationszeiten im sogenannten Memory-Integral: $\int_0^t \alpha(t,s)\hat{O}(t,s,z)\, ds$ nur Anteile zum Tragen kommen mit geringer zeitlicher Differenz $(t-s)$, läßt sich wie folgt eine zeitliche Taylor-Entwicklung des Operators ansetzen:

$$\begin{aligned} \hat{O}(t,s,z) &= \hat{O}(s,s,z) + \frac{\partial \hat{O}(t,s,z)}{\partial t}\Big|_{t=s}(t-s) \\ & + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \hat{O}(t,s,z)}{\partial t^2}\Big|_{t=s}(t-s)^2 + \ldots \end{aligned} \tag{160}$$

Im " markov'schen Grenzfall" (155) ergibt sich bei expliciter Untersuchung[&]:

$$\hat{O}(s,s,z) = L \tag{161}$$

$$\frac{\partial \hat{O}(t,s,z)}{\partial t}\Big|_{t=s} = -\frac{i}{\hbar}[H,L] - \int_0^s \alpha(s,u)\, du\, [L^\dagger, L]L \tag{162}$$

Mit den in der Regel zeitunabhängigen Operatoren: H und L.

[&]: Eine ausführliche Herleitung ist (YDGS, '99) zu entnehmen.

In 1. Ordnung der Zeitentwicklung erhalten wir als approximativen Ausdruck für $\int_0^t \alpha(t,s)\hat{O}(t,s,\tilde{z})\,ds$:

$$\hat{O}(t) \;:=\; g_0(t)L - g_1(t)\frac{i}{\hbar}[H,L] - g_2(t)[L^\dagger,L]L \tag{163}$$

mit folgenden zeitabhängigen Koeffizienten:

$$g_0(t) = \int_0^t \alpha(t,s)\,ds \tag{164}$$

$$g_1(t) = \int_0^t \alpha(t,s)(t-s)\,ds \tag{165}$$

$$g_2(t) = \int_0^t \int_0^s \alpha(t,s)\alpha(s,u)(t-s)\,du\,ds \tag{166}$$

wobei g_0 von der Größenordnung 1 ist, die anderen Koeffizienten der Größenordnung einer gewissen Umgebungs-Korrelationszeit τ_{cor} entsprechen.

In 1. Ordnung Zeitentwicklung ergibt sich daraus folgende zeitlich nicht-lokale QSD-Gleichung:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\tilde{\psi}_z(t) &= -\frac{i}{\hbar}H\tilde{\psi}_z(t) \;+\; \Delta(L)_t\tilde{\psi}_z(t)\circ\tilde{z}_t \\
&- \; g_0(t)\Big[\Delta(L^\dagger)_tL - \big\langle\Delta(L^\dagger)_tL\big\rangle_t\Big]\tilde{\psi}_z(t) \\
&+ \; \frac{i}{\hbar}g_1(t)\Big[\Delta(L^\dagger)_t[H,L] - \big\langle\Delta(L^\dagger)_t[H,L]\big\rangle_t\Big]\tilde{\psi}_z(t) \\
&+ \; g_2(t)\Big[\Delta(L^\dagger)_t[L^\dagger,L]L - \big\langle\Delta(L^\dagger)_t[L^\dagger,L]L\big\rangle_t\Big]\tilde{\psi}_z(t)
\end{aligned} \tag{167}$$

wobei: $\quad \Delta(A)_t := A - \big\langle A\big\rangle_t$.

Von dem System-Hamiltonian H erwarten wir in Gleichung (167) einen Anteil an der Zeitentwicklung in der Größenordnung einer typischen System-Frequenz ω_0 (z.B. falls man für das System einen harmonischen Oszillator ansetzt). Die Kombinationen der Form $L^\dagger L$ ergeben demgegenüber Terme der Größenordnung einer sogenannten System-Relaxationsrate Γ.

Für die explicit zeitabhängigen Korrekturfaktoren erwarten wir daher in den letzten beiden Zeilen Beiträge der Größe $\omega_0\tau_{cor}$, bzw. $\Gamma\tau_{cor}$.

Somit sollte eine approximative Gültigkeit dieser zeitlich nicht-lokalen QSD-Gleichung nur in solchen Fällen eintreten, bei denen die benannte Umgebungs-Korrelationszeit geringer als die typischen System-Zeitskalen ausfällt, d.h. falls gilt: $\tau_{cor} < \omega_0^{-1}$.

Bemerkenswerterweise treten in den Korrekturtermen keine Rauschfaktoren z_t auf, dieses stochastische Element wirkt hier also nur in lokaler Weise, während bei Entwicklungen höherer Ordnung noch weitere integrative Einflüsse von z_t berücksichtigt werden müssen.

Der Vollständigkeit halber geben wir ebenfalls die entsprechende lineare, nicht-normerhaltende QSD-Gleichung in Zeitentwicklung 1. Ordnung an:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\psi_z(t) &= -\frac{i}{\hbar}H\psi_z(t) + L\psi_z(t)\circ z_t - g_0(t)L^\dagger L\psi_z(t) \\ &\quad +\frac{i}{\hbar}g_1(t)L^\dagger\big[H,L\big]\psi_z(t) + g_2(t)L^\dagger\big[L^\dagger,L\big]L\psi_z(t)\end{aligned} \tag{168}$$

ii) Funktionale Entwicklung von $\hat{O}(t,s,z)$:

Ein weiterer Ansatz besteht darin, den Operator $\hat{O}(t,s,z)$ funktional nach Termen des Rauschens z_t zu entwickeln:

$$\begin{aligned}\hat{O}(t,s,z) &= \hat{O}_0(t,s) + \int_0^t \hat{O}_1(t,s,v)z_v\,dv \\ &\quad + \int_0^t\int_0^t \hat{O}_2(t,s,v_1,v_2)z_{v_1}z_{v_2}\,dv_1\,dv_2 + ... \\ &\quad ... + \int_0^t ... \int_0^t \hat{O}_n(t,s,v_1,...,v_n)z_{v_1}...z_{v_n}\,dv_1...\,dv_n + ...\end{aligned} \tag{169}$$

wobei die Operatoren $\hat{O}_n(t,s,v_1,...,v_n)$ jeweils unabhängig von den Rausch-Variablen z_{v_j} und symmetrisch in den letzten n Variablen sind.

Mithilfe der Konsistenzbedingung (157) und den Anfangsbedingungen (161) $\hat{O}(t,t,z) = L = \hat{O}_0(t,t)$, sowie: $\hat{O}_n(t,t,v_1,...,v_n) = 0\ \forall n \geq 1$ erhält man aus der ursprünglichen QSD-Gleichung eine rekursive Kette von Differentialgleichungen 1. Ordnung für alle $\hat{O}_n(t,s,v_1,...,v_n)$.
Explicite Kalkulationen setzen wie üblich die Kenntnis von $\alpha(t,s)$ voraus.

Für den Term 0. Ordnung: $\hat{O}_0(t,s)$ ergibt sich hierbei gemäß Gleichung (162):

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_0(t,s) = -\frac{i}{\hbar}\big[H,\hat{O}_0(t,s)\big] - \big[L^\dagger\hat{\Omega}_0(t),\hat{O}_0(t,s)\big] \tag{170}$$

mit: $\hat{\Omega}_0(t) := \int_0^t \alpha(t,s)\hat{O}_0(t,s)\,ds$,
d.h. in grober Näherung $\hat{O}(t,s,z) \approx \hat{O}_0(t,s)$ erhalten wir für die QSD-Gleichung:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\tilde{\psi}_z(t) &= -\frac{i}{\hbar}H\tilde{\psi}_z(t) + \Delta(L)_t\tilde{\psi}_z(t)\circ\tilde{z}_t - \Delta(L^\dagger)_t\hat{\Omega}_0(t)\tilde{\psi}_z(t) \\ &\quad +\Big\langle\Delta(L^\dagger)_t\hat{\Omega}_0(t)\Big\rangle_t\tilde{\psi}_z(t)\end{aligned} \tag{171}$$

Rechtfertigen läßt sich diese Approximation wohl nur in solchen Fällen offener Quantensysteme, die nicht zu sehr von markov'scher Dynamik abweichen, d.h. wenn der erste (bzw. 0.) Term $\hat{O}_0(t,s)$ obiger Entwicklung dominant ist.
In der Tat ist dies für die Terme: $\hat{\Omega}_n(t,v_1,...,v_n) := \int_0^t \alpha(t,s)\hat{O}_n(t,s,v_1,...,v_n)\,ds$ im markov'schen Limes: $\alpha(t,s) \to \delta(t-s)$ wegen benannter Anfangsbedingungen zu erwarten; für den 0. Term gilt hierbei: $\hat{\Omega}_0(t) := \int_0^t \alpha(t,s)\hat{O}_0(t,s)\,ds \to \frac{1}{2}L$.

3.2 Einfache Beispiele zeitlich nicht-lokaler QSD-Gleichungen:

In Folgenden wollen wir einige einfache Modelle mittels zeitlich nicht-lokaler QSD-Gleichungen näher betrachten. Diese Beispiele sind den oben benannten Arbeiten von Strunz, Diosi und Gisin entnommen$^{(DGS,'98;'99),(YDGS,'99)}$, wo auch weitergehende numerische Ergebnisse angegeben sind.

i) Meßartige Kopplung:

Wir betrachten ein 2-Niveau-System. Unter Verwendung der bekannten Pauli-Spin-Matrizen$^{\aleph}$ sei der System-Hamiltonian gegeben durch:

$$H := \frac{\omega}{2}\sigma^z \tag{172}$$

die Kopplung mit der Umgebung stelle ein spin-messender Operator dar:

$$L := \lambda\sigma^z \tag{173}$$

mit: λ der gegebenen Kopplungsstärke.

Für den Operator, der die Funktional-Ableitung repräsentieren soll, nehmen wir den "markov'schen Limes" an:

$$\hat{O}(t,s,z) = \lambda\sigma^z \tag{174}$$

d.h. insbesondere unabhängig in allen drei Variablen.

Dieser Ansatz erfüllt offenbar die Konsistenz-Bedingung (157). Für die nicht-lineare, zeitlich nicht-lokale QSD-Gleichung mit norm-erhaltenden Lösungen resultiert aus (158) und (159):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\psi}_z(t) &= -\frac{i}{\hbar}\frac{\omega}{2}\sigma^z\tilde{\psi}_z(t) + \lambda\big(\sigma^z - \langle\sigma^z\rangle_t\big)\tilde{\psi}_z(t) \times \\ &\quad \times\Big(z_t + \lambda\int_0^t \alpha^*(t,s)\langle\sigma^z\rangle_s\, ds + \lambda\int_0^t \alpha(t,s)\, ds\langle\sigma^z\rangle_t\Big) \end{aligned} \tag{175}$$

Um die reduzierte Dichtematrix dieses Modells analytisch zu untersuchen, benutzen wir allerdings die lineare QSD-Gleichung:

$$\frac{d}{dt}\psi_z(t) = -\frac{i}{\hbar}\frac{\omega}{2}\sigma^z\psi_z(t) + \lambda\sigma^z\psi_z(t)z_t + \lambda^2\int_0^t \alpha^*(t,s)\, ds\psi_z(t) \tag{176}$$

Die Lösung dieser Gleichung ergibt für die entsprechende Dichte-Matrix:

$$\rho_{sys}(t) = M\big[|\psi_z(t)><\psi_z(t)|\big] \tag{139}$$

$$= \begin{pmatrix} \rho_{11}(0) & \rho_{12}(0)e^{-F(t)} \\ \rho_{21}(0)e^{-F^*(t)} & \rho_{22}(0) \end{pmatrix} \tag{177}$$

$\aleph$: Der Index sei hier ausnahmsweise oben angebracht, um der Verwechslungsgefahr mit den Zufallsvariablen vorzubeugen.

wobei:

$$F(t) := i\omega t + 2\lambda^2 \int_0^t \int_0^s \big[\alpha(s,u) + \alpha^*(s,u)\big]\, du\, ds \tag{178}$$

Mittels zeitlicher Ableitung läßt sich daraus folgende korrespondierende Mastergleichung für diese Dichte-Matrix ableiten:

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{sys}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\frac{\omega}{2}\big[\sigma^z, \rho_{sys}(t)\big] \qquad (179)\\
&\quad -\frac{\lambda^2}{2}\int_0^t \big[\alpha(t,s) + \alpha^*(t,s)\big]\, ds \big[\sigma^z, \big[\sigma^z, \rho_{sys}(t)\big]\big] \\
&= -\frac{i}{\hbar}\frac{\omega}{2}\big[\sigma^z, \rho_{sys}(t)\big] + \int_0^t \mathcal{K}(t,s)\rho_{sys}(s)\, ds \qquad (180)
\end{aligned}$$

mit einem sogenannten "Memory Superoperator", operierend wie folgt:

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}(t,s)A &:= -\frac{\lambda^2}{2}\big[\alpha(t,s) + \alpha^*(t,s)\big] \times \qquad (181)\\
&\quad \times e^{-2\lambda^2 \int_s^t \int_0^u \big[\alpha(u,v) + \alpha^*(u,v)\big]\, dv\, du}\big[\sigma^z, \big[\sigma^z, A\big]\big]
\end{aligned}$$

Der meßartige Einfluß dieser Kopplung stellt sich für (exponentiell) schnell abfallende Korrelationsfunktionen heraus (d.h. $\alpha(t,s) = e^{-\gamma|t-s|}$); bei (quasi)periodischen Korrelationsfunktionen hingegen (z.B. im Fall einer Umgebung bestehend aus endlich vielen Oszillatoren) tritt diese Reduktion auf einen der beiden Eigenzustände nicht ein.

ii) Dissipative Kopplung:

Ausgehend vom System-Hamiltonian (172) ist ein einfaches Beispiel eines nicht-selbstadjungierten Operators L:

$$\begin{aligned}
L &:= \lambda\sigma_- \qquad (182)\\
&:= \frac{\lambda}{2}\big(\sigma_x - i\sigma_y\big) \qquad (183)
\end{aligned}$$

Dies stellt den Fall der Spin-Relaxation dar.

Mithilfe des folgenden Ansatzes für die Funktionalableitung:

$$\frac{\delta\psi_z(t)}{\delta z_s} = f(t,s)\sigma_-\psi_z(t) \tag{184}$$

mit einer noch noch näher zu bestimmenden Funktion $f(t,s)$; aus der Konsistenzbedingung (157) ergibt sich dabei:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} f(t,s)\sigma_-\psi_z(t) &= \Big[-i\frac{\omega}{2}\sigma^z - \lambda F(t)\sigma_+\sigma_-, f(t,s)\sigma_-\Big]\psi_z(t) \\
&= \big[i\omega + \lambda F(t)\big] f(t,s)\sigma_-\psi_z(t) \qquad (185)
\end{aligned}$$

mit:

$$F(t) := \int_0^t \alpha(t,s) f(t,s)\, ds \tag{186}$$

D.h. im Falle $\sigma_-\psi_z(t) \neq 0$ gilt für $f(t,s)$ folgende Diff.Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t,s) = \big[i\omega + \lambda F(t)\big] f(t,s) \tag{187}$$

mit Anfangswerten:

$$f(s,s) := \lambda \tag{188}$$

Die zu gegebener Korrelationsfunktion $\alpha(t,s)$ entsprechende zeitlich nicht-lokale QSD-Gleichung für normierte Zustände ergibt sich dabei zu:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\psi}_z(t) &= -i\frac{\omega}{2}\sigma^z\tilde{\psi}_z(t) - \lambda F(t)\big(\sigma_+\sigma_- - \langle\sigma_+\sigma_-\rangle_t\big)\tilde{\psi}_z(t) \\ &\quad + \lambda\big(\sigma_- - \langle\sigma_-\rangle_t\big)\tilde{\psi}_z(t) \times \\ &\quad \times \Big(z_t + \lambda\int_0^t \alpha^*(t,s)\langle\sigma_+\rangle_s\, ds + \langle\sigma_+\rangle_t F(t)\Big) \end{aligned} \tag{189}$$

Um die derzeit noch unbekannte Funktion $F(t)$ zu bestimmen, muß man zu gegebener Korrelationsfunktion die miteinander kombinierten Gleichungen (186) und (187) (i.a. numerisch) lösen. Im markov'schen Limes ($\alpha(t,s) \to \delta(t-s)$) ergibt sich offenbar $F(t) = f(t,t)/2 = \lambda/2$ und somit die gewohnte lindblad'sche QSD-Gleichung (149).

Für den Fall exponentiell abfallender Umgebungs-Korrelation:

$$\alpha(t,s) = \frac{\gamma}{2} e^{-\gamma|t-s| - i\Omega(t-s)} \tag{190}$$

ergibt sich aus den beiden obigen Gleichungen folgende Diff.Gleichung für $F(t)$:

$$\dot{F}(t) = -\gamma F(t) + i(\omega - \Omega)F(t) + \lambda F^2(t) + \frac{\lambda\gamma}{2} \tag{191}$$

mit Anfangsbedingung $F(0) = 0$.
Die analytische (wenn auch leider recht komplizierte) Lösung hierzu lautet:

$$\begin{aligned} F(t) &= \frac{\tilde{\gamma}}{2\lambda} - \frac{\sqrt{\tilde{\gamma}^2 - 2\tilde{\gamma}\lambda^2}}{2\lambda} \times \\ &\quad \times tanh\left[\frac{t}{2}\sqrt{\tilde{\gamma}^2 - 2\tilde{\gamma}\lambda^2} + arctanh\left(\frac{\tilde{\gamma}}{\sqrt{\tilde{\gamma}^2 - 2\tilde{\gamma}\lambda^2}}\right)\right] \end{aligned} \tag{192}$$

mit: $\tilde{\gamma} := \gamma - i(\omega - \Omega)$

Betrachten wir den Fall exakter Resonanz ($\Omega = \omega \Rightarrow \tilde{\gamma} = \gamma$), so ergibt sich im Falle schwacher Kopplung ($\gamma > 2\lambda^2$):

$$F(t) \stackrel{t\to\infty}{\longrightarrow} \frac{\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 2\gamma\lambda^2}}{2\lambda} \tag{193}$$

$$\stackrel{\gamma\gg\lambda}{\longrightarrow} \lambda/2 \tag{194}$$

wie bereits für den markov'schen Grenzfall erwartet.

Im umgekehrten Falle starker Kopplung bei exakter Resonanz divergiert $F(t)$:

$$F(t) \quad \stackrel{t \to t_c}{\longrightarrow} \quad +\infty \tag{195}$$

zum kritischen Zeitpunkt:

$$t_c \quad := \quad \left[\pi + 2arctanh\left(\frac{\gamma}{\sqrt{2\lambda^2\gamma - \gamma^2}} \right) \right] \sqrt{2\lambda^2\gamma - \gamma^2} \tag{196}$$

Dieses Verhalten von $F(t)$ führt dazu, daß in Gleichung (185) der 2. Term dominiert, da insbesondere der Spin in endlicher Zeit in den Grundzustand getrieben wird.

Aus der entsprechenden linearen QSD-Gleichung läßt sich abermals (mittels Variablensubstitution der Form: $\Phi_z(t) := e^{-i(\omega/2)\sigma^z t + \lambda\sigma_+\sigma_- \int_0^t F(s)\, ds}\psi_z(t)$ und einiger Kalkulation) für die korrespondierende Dichtematrix feststellen:

$$\begin{aligned} \rho_{sys}(t) \quad &= \quad M\big[|\psi_z(t) >< \psi_z(t)|\big] &(139)\\ &= \quad \begin{pmatrix} \rho_{11}(0)e^{-\int_0^t \left[F(s)+F^*(s)\right]\, ds} & \rho_{12}(0)e^{-i\omega t - \int_0^t F(s)\, ds} \\ \rho_{21}(0)e^{i\omega t - \int_0^t F^*(s)\, ds} & 1 - \rho_{11}(t) \end{pmatrix} &(197) \end{aligned}$$

Was wiederum zeigt, daß, sobald $Re\Big(\int_0^t F(s)\, ds\Big)$ in endlicher Zeit divergiert, die Dichtematrix ihren Grundzustand erreicht.

Rückwirkend ergibt sich daraus als Mastergleichung:

$$\begin{aligned} \dot\rho_{sys}(t) \quad &= \quad -i\frac{\omega}{2}\big[\sigma^z, \rho_{sys}(t)\big] + \lambda\big[F(t) + F^*(t)\big] \times &(198)\\ &\quad \times\big(\sigma_-\rho_{sys}(t)\sigma_+ - 1/2\big\{\sigma_+\sigma_-, \rho_{sys}(t)\big\}\big) \\ &= \quad -i\frac{\omega}{2}\big[\sigma^z, \rho_{sys}(t)\big] + \int_0^t \mathcal{K}(t,s)\rho_{sys}(s)\, ds &(199) \end{aligned}$$

mit:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(t,s)A \quad &:= \quad -\frac{\lambda^2}{2}\big[\alpha(t,s) + \alpha^*(t,s)\big] \times &(200)\\ &\quad \times\Big(2e^{-\lambda\int_s^t F(u)\, du}\sigma_- A\sigma_+ - \big\{\sigma_+\sigma_-, A\big\} \\ &\quad -2\big(e^{-\lambda\int_s^t F(u)\, du} - 1\big)\sigma_+\sigma_- A\sigma_+\sigma_-\Big) \end{aligned}$$

als weiteren “Memory Superoperator”.

iii) Energie-Messung:

Ein spezielles Beispiel einer meßartigen Kopplung ist der Fall einer energiesensiblen Kopplung ($L^{(\dagger)} := H$). Dabei ergibt sich für unseren Operator (154) der Funktionalableitung $\hat{O} = H$, also für die normerhaltende, nicht-lindblad'sche QSD-Gleichung:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\psi}_z(t) &= -i\frac{i}{\hbar}H\psi_z(t) - \big(H^2 - \langle H^2\rangle_t\big)\tilde{\psi}_z(t)\int_0^t \alpha(t,s)\,ds \\ &\quad + \big(H - \langle H\rangle_t\big)\tilde{\psi}_z(t)\bigg(z_t + \int_0^t \alpha^*(t,s)\langle H\rangle_s\,ds \\ &\quad + \int_0^t \alpha(t,s)\,ds\langle H\rangle_t\bigg) \end{aligned} \tag{201}$$

Die korrespondierende Mastergleichung ergibt sich dabei zu:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{sys}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\big[H, \rho_{sys}(t)\big] - \int_0^t \alpha(t,s)\,dsH\big[H, \rho_{sys}(t)\big] \\ &\quad - \int_0^t \alpha^*(t,s)\,ds\big[\rho_{sys}(t), H\big]H \end{aligned} \tag{202}$$

Woraus (zumindest in endlich-dimensionalen Fällen) erkennbar wird, daß der Energie-Erwartungswert $tr\{H\rho_{sys}(t)\}$ zeitlich konstant ist (da in der Spur nur Kommutator-Terme auftreten); ganz im Gegensatz zu den individuellen Erwartungswerten der Trajektorien $\langle H\rangle_{\tilde{\psi}_z(t)}$.

Falls die Korrelationsfunktion stetig zerfällt, d.h. $\int_0^t \alpha(t,s)\,ds \stackrel{t\gg 0}{\longrightarrow} cons.$, so erhalten wir im Limes großer Zeiten:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\psi}_z(t) &\stackrel{t\gg 0}{\simeq} -\frac{i}{\hbar}H\tilde{\psi}_z(t) - \big(H^2 - \langle H^2\rangle_t\big)\tilde{\psi}_z(t) \times cons. \\ &\quad + \big(H - \langle H\rangle_t\big)\tilde{\psi}_z(t)\big(z_t + cons. \times \langle H\rangle_t\big) \end{aligned} \tag{203}$$

Eine zeitlich lokale QSD-Gleichung von gleicher Struktur wie Gleichung (149).

iv) Quanten-Brown'schen Bewegung:

Zum Abschluß wollen wir noch einen Blick auf das häufig untersuchte Modell der Quanten-Brown'schen Bewegung eines harmonischen Oszillators werfen. Für den Hamiltonian gilt hierbei:

$$H = \frac{\omega}{2}\big(p^2 + q^2\big) \tag{204}$$

für den Kopplungs-Operator:

$$L = \lambda q \tag{205}$$

Die Umgebungs-Korrelation $\alpha(t,s)$ ist wie üblich erstmal beliebig.

Wie sich bei näherer Betrachtung herausstellt ist die Funktional-Ableitung in diesem Falle komplizierter, da explicit abhängig vom Rauschen z_t; es ergibt sich:

$$\frac{\delta\psi_z(t)}{\delta z_s} = \left[f(t,s)q + g(t,s)p + i\int_0^t j(t,s,u)z_u\,du\right]\psi_z(t) \tag{206}$$

mit noch unbekannten Funktionen: $f(t,s)$, $g(t,s)$ und $j(t,s,u)$, die die Konsistenz-Bedingung (157) wie folgt erfüllen sollten:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}f(t,s) &= \omega g(t,s) + i\lambda f(t,s)\int_0^t \big[\alpha(t,u)g(t,u)\big]\,du \\ &\quad -2i\lambda g(t,s)\int_0^t \big[\alpha(t,u)f(t,u)\big]\,du \\ &\quad -i\lambda\int_0^t \big[\alpha(t,u)j(t,u,s)\big]\,du\end{aligned} \tag{207}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}g(t,s) = -\omega f(t,s) - i\lambda g(t,s)\int_0^t \big[\alpha(t,u)g(t,u)\big]\,du \tag{208}$$

$$j(t,s,t) = \lambda g(t,s) \tag{209}$$

sowie:

$$\frac{\partial}{\partial t}j(t,s,u) = -i\lambda g(t,s)\int_0^t \big[\alpha(t,v)j(t,v,u)\big]\,dv \tag{210}$$

Zur Lösung dieses Systems von Gleichungen nehmen wir der Einfachheit halber exponentiell abfallende Umgebungs-Korrelationen an:

$$\alpha(t,s) = \frac{\gamma}{2}e^{-\gamma|t-s|} \tag{211}$$

und setzen der Übersichtlichkeit wegen für die mit der Umgebungs-Korrelation verknüpften Integrale unserer Hilfsfunktionen f,g,j deren Großbuchstaben ein:

$$X(t) := \int_0^t \alpha(t,s)x(t,s)\,ds \tag{212}$$

mit: $x \in \big\{f(s,t), g(s,t), j(s,t,u)\big\}$ und:

$$\tilde{J}(t) := \int_0^t \alpha(t,sJ(t,s)\,ds \tag{213}$$

Mit den Anfangsbedingungen: $F(0) = G(0) = \tilde{J}(0) = 0$ ergibt sich daraus in recht übersichtlicher Weise:

$$\dot{F}(t) = \frac{\lambda\gamma}{2} - \gamma F(t) + \omega G(t) - i\lambda F(t)G(t) - i\lambda\tilde{J}(t) \tag{214}$$

$$\dot{G}(t) = -\gamma G(t) - \omega F(t) - i\lambda G^2(t) \tag{215}$$

$$\dot{\tilde{J}}(t) = \frac{\lambda\gamma}{2}G(t) - 2\gamma\tilde{J}(t) - i\lambda G(t)\tilde{J}(t) \tag{216}$$

Mit der explicit von $G(s)$ abhängigen Lösung von $J(t,s)$:

$$J(t,s) \quad = \quad \lambda G(s) e^{-\int_s^t \left[\gamma + i\lambda G(u)\right] du} \tag{217}$$

folgt für die nicht-lindblad'sche QSD-Gleichung:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\psi}_z(t) \quad = \quad & -\frac{i}{\hbar}H\tilde{\psi}_z(t) - \left(q^2 - \langle q^2\rangle_t\right)\tilde{\psi}_z(t)F(t) \\ & -\left(qp - \langle qp\rangle_t - p\langle q\rangle_t + \langle p\rangle_t\langle q\rangle_t\right)\tilde{\psi}_z(t)G(t) \\ & +\left(q - \langle q\rangle_t\right)\tilde{\psi}_z(t)\Bigg(z_t + \int_0^t \alpha^*(t,s)\langle q\rangle_s\, ds + \langle q\rangle_t F(t) \\ & -i\int_0^t J(t,u)\left(z_u + \int_0^u \alpha^*(u,v)\langle q\rangle_v\, dv\right) du\Bigg) \end{aligned} \tag{218}$$

Bemerkenswert an dieser nicht-zeit-lokalen QSD-Gleichung ist der integrative Einfluß des Rauschens z_t im letzten Teil von (218). Ebenso überraschen auch die gemischten Operator-Terme qp, die weder im Hamiltonian, noch im Kopplungs-Operator auftreten.

V. Zusammenfassung und Ausblick:

Im ersten Teil der Arbeit haben wir verschiedene Ansätze studiert, eine Beschreibung offener quantenmechanischer Dynamik mittels Herleitung geeigneter Mastergleichungen durchzuführen; ein Vergleich der Methoden hat dabei gezeigt, daß man im wesentlichen zugunsten modell-bezogener Kalkulationen an Exaktheit einbüßt oder aber mittels einer abstrakten Klassifizierung der dynamischen Halbgruppe dissipativer Prozesse den Bezug zur ursprünglichen Liouville-Gleichung verliert.

Letztere Methode liefert allerdings eine formal wesentlich leichter zu lösende Mastergleichung, aus der wir für den endlich-dimensionalen Fall hermitescher Lindblad-Operatoren direkt auf den diffusiven Verlauf reduzierter System-Evolutionen schließen konnten.

Im Allgemeinen ungelöst bleibt aber das Problem, zu einem gegebenen Modell (welches die Eigenschaften eines Lindblad-Prozesses erfülle) auf die korrespondierenden Lindblad-Operatoren zu schließen$^{\diamondsuit}$. An diesem Punkt werden natürlich zahlreiche mehr oder weniger realistische Beispiele modelliert.

Ungeklärt ist auch noch die im theoretischen Sinne starke Einschränkung an den liouville'schen Anteil der Lindblad-Gleichung, der unter den gegebenen Annahmen nur durch einen beschränkten Hamiltonian erzeugt wird; dies entspricht zwar in den praktischen Fällen endlich-dimensionaler (numerischer) Näherung dem Regelfall, steht aber im Gegensatz zu den meisten, dimensional unbeschränkten Modell-Annahmen.

Die zwar nicht eindeutig, aber dennoch im lindblad'schen Falle recht einfach zu bestimmenden QSD-Gleichungen (je nach Anwendung norm-erhaltend oder linear) ermöglichen es, Methoden der stochastischen Analysis (z.B. entsprechender numerischer Integrationen) anzuwenden; somit können eventuell numerische Vorteile oder gegebenenfalls ein "realistischer" Eindruck von dem stochastischen Verhalten solcher dissipativer Dynamik erworben werden (entsprechend einer konkreten Beobachtung eines möglichen Prozeßverlaufes im Experiment).

Das zeitlich nicht-lokale Verhalten der (störungstheoretisch) hergeleiteten integro-differentiellen Mastergleichungen, das sich gegebenenfalls in Form von zeitabhängigen Korrelationsfaktoren beschreiben läßt, findet sein Analogon in den zeitlich nicht-lokalen QSD-Gleichungen; deren integrativer Anteil, der quasi die Rückkopplung der System-Entwicklung zu früheren Zeiten berücksichtigt, beinhaltet ebenfalls einen sogenannten Korrelations-Funktions-Faktor. Dieser nimmt die entsprechende Rolle ein, nämlich die Stärke der Rückkopplung durch die Umgebung als Funktion der Zeitdifferenz anzugeben (siehe Skizze).

$^{\diamondsuit}$: Ein möglicher Ansatz wäre, anhand entsprechender Annahmen über die Korrelationsfunktionen aus Gleichung (24) die störende Doppelsumme mittels geeigneter "Diagonalisierung" der "Matrix" $\langle \Gamma_k \Gamma_l \rangle$ auf eine Lindblad-Form zu reduzieren.

Mastergleichung-Formalismus	$\leftrightarrow$	**Quantum State Diffusion**
Integro-Diff.-Gl. $\leftrightarrow$ Lindblad-Form	|	zeitl. nicht-lokal $\leftrightarrow$ Lindblad-Form
(III 1),2)) (III 3))	|	(IV 2)) (IV 3))
$\Downarrow$	|	$\Downarrow$
Korr.fkten: $\langle \Gamma_j^I(s)\Gamma_k^I(t)\rangle =: \alpha_{j,k}(s,t)$	|	Korr.fkten: $M\left[z_t^* z_s\right] =: \alpha(s,t)$

Neben der praxisorientierten Unterscheidung von norm-erhaltender und nicht norm-erhaltender (respektive nicht-linearer und linearer) QSD-Gleichungen, läßt sich die Frage stellen, welche Bedeutung solchen Mehrdeutigkeiten verschiedener QSD-Gleichungen mit gleicher korrespondierender Mastergleichung zukommt; ob dies etwa vergleichbar der unterschiedlichen Erscheinungsform ein und demselben Dichteoperators bezüglich verschiedener Basisdarstellungen ist (d.h. die Ambivalenz keinerlei physikalische Relevanz besitzt) oder ob die Auswahl der bevorzugten QSD-Gleichung ein konkretes stochastisches Modell für die Zeitentwicklung individueller Quantentrajektorien voraussetzt.

Desweiteren könnte man in beiden Formalismen weitergehend untersuchen, welcher physikalische "Freiraum" (insbesondere in der Entwicklung spezifischer Modelle) den jeweiligen Korrelationsfunktionen zukommt, ob es eine eindeutige Zuordnung von "klassischen" Korrelationsfunktionen (wie in der "Born'schen Approximation") zu solchen der QSD gibt.

An dieser Stelle ergibt sich allgemein die Frage nach den Zusammenhängen zwischen dem Ensemble-Mittel $M\left[..\right] = \int P(z)..\, dz$ gegebener QSD-Gleichungen und den entsprechenden Zufallsvariablen z_t, sowie die Rolle nicht-δ-distributiver Verteilungsfunktionale $P(z)$ (bzw. korrespondierender Korrelationsfunktionen $\alpha(s,t)$) bei der Beschreibung zeitlich nicht-lokaler Prozesse.

Ein paar konkrete Ansätze in dieser Richtung haben wir in den entsprechenden Beispielen (Kapitel IV.3.2)) angeführt, eine modell-unabhängige Ableitung solcher QSD-Prozesse wäre erstrebenswert.

Einen Aspekt haben wir in unserer Darstellung der Herleitungsmethoden von Mastergleichungen nicht berücksichtigt, den der Pfad-Integral-Technik (siehe Kapitel **I**). Zahlreiche Untersuchungen stützen sich auf diesen Formalismus und leiten daraus in mehr oder minder approximativer Weise entsprechende Mastergleichungen ab.

Im Rahmen genauerer Vergleiche zwischen "konventionellen" Herleitungs-Methoden von Mastergleichungen und solchen mittels Verwendung von Pfad-Integralen könnte man gegebenenfalls deren Äquivalenz oder deren unterschiedliche Gültigkeitsbereiche näher untersuchen.

Anhang:

A. Beweis der vollständigen Positivität der Zeitentwicklungs-Operatoren:

Wir wollen für die Zeitentwicklungs-Operatoren offener Systeme im endlichdimensionalen Falle die vollständige Positivität zeigen, wie sie in den Herleitungen zur Lindblad-Form der Mastergleichung (siehe: II.3) gefordert wird.
Der Beweis ist dem entsprechenden Artikel von Gorini, Kossakowski und Sudarshan$^{(GKS,'76)}$ entnommen.

Gegeben sei ein an eine Umgebung **R** zu einem isolierten quantenmechanischen Gesamt-System gekoppeltes System **S**. Für (**S** + **R**) gilt die gewohnte unitäre Zeitentwicklung gemäß Gl. (5). Unter der Annahme eines ursprünglich unkorrelierten Anfangszustandes $\sigma \otimes \rho$, ergibt sich für die Heisenberg'sche Zeitentwicklung einer beliebigen System-Observablen $A : \mathscr{H}_{Sys} \to \mathscr{H}_{Sys}$:

$$tr_{tot}\Big\{(\sigma \otimes \rho)\big[U_t^\dagger(A \otimes \mathbb{1}_{\mathscr{H}_{Umg}})U_t\big]\Big\} \quad = \quad tr_{Sys}\Big\{\sigma\big(\Lambda_t A\big)\Big\} \tag{219}$$

Ein beliebiges Element $A^{(n)} \in \mathcal{B}(\mathscr{H}_{Sys}) \otimes M_n(\mathbb{C})$ kann man eindeutig bezüglich bekannter $M_n(\mathbb{C})$-Basis $\{E_{j,k}\}$ (mit: $(E_{j,k})_{l,m} = \delta_{j,l}\delta_{k,m}$) entwickeln:

$$A^{(n)} \quad = \quad \sum_{j,k=1}^{n} A_{j,k} \otimes E_{j,k} \tag{220}$$

mit: $A_{j,k} \in \mathcal{B}(\mathscr{H}_{Sys})$ entsprechend.

Sei nun $A^{(n)}$ positiv, so existiert$^{\$}$ eine Zerlegung der Form:

$$\begin{aligned} A^{(n)} &= B^\dagger B \\ &= \Big(\sum_{j,k=1}^{n} B_{j,k} \otimes E_{j,k}\Big)^\dagger \sum_{l,m=1}^{n} B_{l,m} \otimes E_{l,m} \\ &= \sum_{j,k=1}^{n} \Big(\sum_{l=1}^{n} B_{l,j}^\dagger B_{l,k}\Big) \otimes E_{j,k} \end{aligned} \tag{221}$$

Nun läßt sich ein Dichte-Operator auf $\mathcal{B}(\mathscr{H}_{Sys}) \otimes M_n(\mathbb{C})$ darstellen als endliche, konvexe Linearkombination von Zuständen der Form: $\sigma \otimes \omega$ mit σ einem entsprechenden Dichte-Operator auf $\mathcal{B}(\mathscr{H}_{Sys})$ und ω einem reinen Zustand von $M_n(\mathbb{C})$ (d.h.: $\omega(E_{j,k}) =: \bar{x}_j x_k$). Mit $\tilde{B}_{j,k} := U_t^\dagger B_{j,k} U_t$ und $Q_j := \sum_k x_k \tilde{B}_{j,k}$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} (\sigma \otimes \omega)\big[\Lambda_t^{(n)}(B^\dagger B)\big] &= (\sigma \otimes \omega)\Big[\sum_{j,k}\Big(\sum_l \Lambda_t(B_{l,j}^\dagger B_{l,k}) \otimes E_{j,k}\Big)\Big] \\ &= \sum_{j,k,l} \sigma\big[\Lambda_t(B_{l,j}^\dagger B_{l,k})\big]\bar{x}_j x_k \end{aligned} \tag{222}$$

$^{\$}$: Z.B. gemäß Theorem 1.4.4 im Sakai$^{(Sakai,'71)}$.

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{j,k,l} (\sigma \otimes \rho)\,[U_t^\dagger\,(B_{l,j}^\dagger B_{l,k} \otimes \mathbb{1}_{\mathscr{H}_{Umg}})U_t]\,\bar{x}_j x_k \\
&= \sum_{j,k,l} \bar{x}_j\,(\sigma \otimes \rho)\Big(\tilde{B}_{j,l}^\dagger \tilde{B}_{l,k}\Big)x_k \\
&= (\sigma \otimes \rho)\Big(\sum_l Q_l^\dagger Q_l\Big) \quad \geq \quad 0
\end{aligned}
$$

Endliche Konvex-Kombinationen von $\sigma \otimes \omega$ erhalten diese Positivität offenbar; wegen Beliebigkeit des positiven Operators $A^{(n)}$ und von n ist somit vollständige Positivität gezeigt.

□

B. stochastische Differentialgleichungen:

Die Differentialgleichung eines stochastischen Prozesses hat im Allgemeinen die Form:

$$
dx(t) \quad = \quad A[x(t),t]dt + B[x(t),t]\xi(t)dt \tag{223}
$$

mit $\xi(t)$ einen rapide variierenden (zufälligen) Fluktuationsterm bezeichnet (für gewöhnlich "weißes Rauschen").Das "weiße Rauschen" ist dabei wie folgt mit dem sogenannten Wiener-Prozeß$^{(Arnld,'73)}$ verknüpft:

$$
W(t) \quad = \quad \int_0^t \xi(t')\,dt' \tag{224}
$$

Da aber $x(t)$ in der Regel keine differenzierbare Funktion darstellt, ist Gleichung (223) als abkürzende Schreibweise zu lesen für:

$$
x(t) \quad = \quad x_0 + \int_{t_0}^t A[x(t'),t']\,dt' + \int_{t_0}^t B[x(t'),t']\xi(t')\,dt' \tag{225}
$$

Wobei das letzte Integral $\int_{t_0}^t f[x]\xi(t')\,dt'$ wegen der Irregularität von $\xi(t)$ in der Regel nicht wohldefiniert ist (weder im Riemann'schen noch im Lebesgue'schen Sinne). Zu verstehen ist dieser Ausdruck (analog zur Konstruktion des Riemann-Integralbegriffes) als Grenzwert einer Folge von Summationen:

$$
S_N \quad := \quad \sum_{j=1}^N f[x(\tau_j)]\big[W(t_j) - W(t_{j-1}\big] \tag{226}
$$

über eine zunehmend verfeinernde Folge von Unterteilungen: $t_0 < t_1 < \ldots < t_N := t$ (o.B.d.A. z.B. äquidistant); dabei ist von wesentlicher Bedeutung, welche Wahl der Zwischenpunkte $\tau_j \in [t_{j-1}, t_j]$ man trifft. In der Praxis stochastischer Integrale haben sich zwei verschiedene Konventionen dieser Zwischenpunkt-Wahl etabliert$^{(Lemm,'99)}$:

1) Itôs Kalkül:

Itôs Kalkül besteht darin, in Gleichung (226) jeweils den Funktionswert des linken Randes zu nehmen: $\tau_j := t_{j-1}$, d.h.

$$S_N^{Itô} \quad := \quad \sum_{j=1}^{N} f[x(t_{j-1})]\big[W(t_j) - W(t_{j-1}\big] \tag{227}$$

Hierbei handelt es sich um die natürliche Wahl des auszuwertenden Zeitpunktes hinsichtlich der Markov-Eigenschaft, nach der die Entwicklung eines Prozesses nur durch den letztbekannten Zustand der Vergangenheit bestimmt sein darf (d.h. unabhängig von allen vorherigen Ereignissen). Er ist für eine Vorwärts-Integration nach Cauchy-Euler der natürliche Ansatz.

2) Stratonovich-Kalkül:

Eine andere naheliegende Wahl ist der Mittelpunkt der einzelnen Intervalle: $\tau_j := \frac{t_j + t_{j-1}}{2}$,so daß

$$S_N^{Strat} \quad := \quad \sum_{j=1}^{N} f\Big[x\Big(\frac{t_j + t_{j-1}}{2}\Big)\Big]\big[W(t_j) - W(t_{j-1}\big] \tag{228}$$

die angemessene Wahl, wenn man die Dirac-Distribution als Idealisierung einer endlichen Kovarianz-Breite auffaßt; insbesondere wird hierbei der Zeitablauf symmetrisch (bezüglich Zeitumkehr) behandelt.
In diesem Formalismus ergeben sich vorteilhafterweise die klassisch bekannten Regeln für Variablensubstitution, während hingegen beim Itô-Kalkül noch Ableitungsterme 2. Ordnung berücksichtigt werden müssen.

Dennoch gibt es für stochastische Differential- bzw. Integral-Gleichungen der Form (223) folgende einfache Umrechnungs-Relation zwischen dem Itô- und dem Stratonovich-Formalismus$^{(Gard,'83)}$:

$$\begin{aligned} dx(t) &\overset{Itô}{=} A[x(t),t]dt + B[x(t),t]dW(t) \\ &\Updownarrow \\ dx(t) &\overset{Strat}{=} \big(A[x(t),t] - 1/2B[x(t),t]\partial_x B[x(t),t]\big)dt + B[x(t),t] \circ dW(t) \end{aligned} \tag{229}$$

bzw.

$$\begin{aligned} dx(t) &\overset{Strat}{=} A[x(t),t]dt + B[x(t),t] \circ dW(t) \\ &\Updownarrow \\ dx(t) &\overset{Itô}{=} \big(A[x(t),t] + 1/2B[x(t),t]\partial_x B[x(t),t]\big)dt + B[x(t),t]dW(t) \end{aligned} \tag{230}$$

Referenzen:

(A&Z, '96) J.R. Anglin und W.H. Zurek, Phys. Rev. Letters **70**, 1187 (1996)

(Araki, '99) H. Araki, "Mathematical Theory of Quantum Fields", (Oxford UP, Oxford, 1999)

(Arnld, '73) L. Arnold, "stochastische Differentialgleichungen", (Oldenbourg, München, 1973)

(BHR, '92) M. Brune, S. Haroche und J.M. Raimond et al., Phys. Rev. A **45**, 5193 (1992)

(BHR, '96a) M. Brune, S. Haroche und J.M. Raimond et al., Phys. Rev. Letters **76**, 1800 (1996)

(BHR, '96b) M. Brune, S. Haroche und J.M. Raimond et al., Phys. Rev. Letters **77**, 4887 (1996)

(BHR, '97) M. Brune, S. Haroche und J.M. Raimond et al., Phys. Rev. Letters **79**, 769 (1997)

(C-T, '97) C. Cohen-Tannoudji, B. Diu und F. Laloë, "Quantenmechanik", Bd. 1 & 2, (Walter de Gruyter, Berlin, 1997)

(C&L, '83) A.O. Caldeira und A.J. Leggett, Physica A **121**, 587 (1983)

(C&N, '00) I.L. Chuang und M.A. Nielsen, "Quantum Computation and Quantum Information", (Cambridge UP, Cambridge 2000)

(C&S, '79) S. Chaturvedi und F. Shibata, Z. Physik B **35**, 297 (1979)

(Choi, '72) M.D. Choi, Can. J. Math. **24**, 520 (1972)

(Cml, '93) H. Carmichael, "An Open Systems Approach to Quantum Optics", (Springer, Heidelberg, 1993)

(D&R, '66) H.A. Dye und B. Russo, Duke Math. J. **33**, 413 (1966)

(D&S, '97) L. Diósi und W.T. Strunz, Phys. Lett. A **235**, 569 (1997)

(Dav, '76) E.B. Davies "Quantum Theory of Open Systems", (Academic Press, London, 1976)

(DGS, '98) L. Diósi, N. Gisin und W.T. Strunz, Phys. Rev. A **58**, 1699 (1998)

(DGS, '99) L. Diósi, N. Gisin und W.T. Strunz, Phys. Rev. Letters **82**, 1801 (1998)

(F&H, '65) Feynman und A.R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals", (McGraw-Hill, New York, 1965)

(F&V, '63) R.P. Feynman und F.L. Vernon, Annals of Physics **24**, 118 (1963)

(Fshb, '58) H. Feshbach, Ann. Phys. (NY) **5**, 357 (1958)

(Fshb, '62) H. Feshbach, Ann. Phys. (NY) **19**, 287 (1962)

(G&O, '99) R.B. Griffiths und R. Omnès, Physics Today **52**, 26 (1999)

(G&P, '92) N. Gisin und I.C. Percival, J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 5677 (1992)

(G&Z, '00) C.W. Gardiner und P. Zoller, "Quantum Noise", (Springer, Heidelberg, 2000)

(Gard, '83) C.W. Gardiner, "Handbook of Stochastic Methods", (Springer, Berlin, 1983)

(Gisin, '84) N. Gisin, Phys. Rev. Letters **52**, 1657 (1984)

(GKS, '76) V. Gorini, A. Kossakowski und E.C.G. Sudarshan, J. Math. Phys. **89**, 45 (1976)

(GPR, '72) C. George, I. Prigogine und L. Rosenfeld, Kgl. Danske Videnskab. Selskab Mat.-Fys. Medd **38**, no 12 (1972)

(H&E, '80) H. Hasegawa und H. Ezawa, Progr. Theor. Phys. Suppl. **69**, 41 (1980)

(Haag, '96) R. Haag, "Local Quantum Physics", (Springer, Berlin, 1996)

(HPZ, '92) B.L. Hu, J.P. Paz und Y. Zhang, Phys. Rev. D **45**, 2843 (1992)

(HPZ, '93a) S. Habib, J.P. Paz und W.H. Zurek, Phys. Rev. Letters **70**, 1187 (1993)

(HPZ, '93b) S. Habib, J.P. Paz und W.H. Zurek, Phys. Rev. D **47**, 488 (1993)

(I&K, '75) R.S. Ingarden und A. Kossakowski, Annals of Physics **89**, 451 (1975)

(Kato, '76) T. Kato, "Perturbation Theory for Linear Operators", (Springer, Berlin, 1976)

(Kos, '72) A. Kossakowski, Rep. Math. Phys. **3**, 247 (1972)

(Kup, '96) D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer, J. Kupsch et al., "Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory" (Springer, Heidelberg, 1996)

(Kraus, '71) K. Kraus, Annals of Physics **64**, 311 (1971)

(L&P, '61) G. Lumer und R.S. Phillips, Pacific J. Math. **11**, 679 (1961)

(Lbld, '76) G. Lindblad, Commun. Math. Phys. **48**, 119 (1976)

(Ldsm, '98) N.P. Landsman, "Lecture Notes on C^*-Algebras, Hilbert C^*-modules, and Quantum Mechanics", arχiv: math-ph/9807030

(Lemm, '99) J.C. Lemm, "Notizen zur Vorlesung über Econophysics", S. 42 ff `http://pauli.uni-muenster.de/~lemm/econoWS99/econo.ps.gz`

(P&R, '97) J.P. Paz und L.D. Romero, Phys. Rev. A **55**, 4070 (1997)

(P&Z, '99) J.P. Paz und W.H. Zurek, Phys. Rev. Letters **82**, 5181 (1999)

(Sakai, '71) S. Sakai, "C*-Algebras and W*-Algebras", (Springer, Berlin, 1971)

(Stg, '55) W.F. Stinespring, Proc. Amer. Math. Soc. **6**, 211 (1955)

(Strz, '96) W.T. Strunz, Phys. Lett. A **224**, 25 (1996)

(U&Z, '89) W.G. Unruh und W.H. Zurek, Phys. Rev. D **40**, 1071 (1989)

(vHv, '55) L. van Hove, Physica **21**, 517 (1955)

(vHv, '59) L. van Hove, Physica **25**, 268 (1959)

(vKp, '81) N.G. von Kampen, "Stochastic Processes in Physics and Chemistry" (North-Holland, Amsterdam, 1981)

(vNm, '68) J. von Neumann, "Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik", (Springer, Berlin, 1968)

(YDGS, '99) T. Yu, L. Diósi, N.Gisin und W.T. Strunz, Phys.Rev. A **60**, 91 (1999)

(Yos, '48) K. Yosida, J. Math. Soc. Japan **1**, 15 (1948)

(Zurek, '81) W.H. Zurek, Phys. Rev. D **24**, 1516 (1981)

(Zurek, '82) W.H. Zurek, Phys. Rev. D **26**, 1862 (1982)

(Zurek, '91) W.H. Zurek, Physics Today **44**, 36 (1991)

(Zwzg, '60a) R. Zwanzig, J. Chem. Phys. **33**, 1338 (1960)

(Zwzg, '60b) R. Zwanzig, Lect. Theor. Phys. (Boulder) **3**, 106 (1960)

Danksagung:

Ich bin Prof. Dr. K. Dietz zu großem Dank verpflichtet für die Auswahl des sehr interessanten Themengebietes und die intensive Betreuung und Ausbildung, die er mir während der Anfertigung meiner Diplomarbeit hat zugute kommen lassen. Außerdem möchte ich mich bei Prof. Dr. R. Flume für die sehr engagierte Erfüllung seiner Korreferenz bedanken.

Mein besonderer Dank gilt all meinen Freunden, die mir während meiner Diplomarbeit so geduldig und verständnisvoll zur Seite standen.

Den Bewohner von Zimmer 131 schulde ich großen Respekt für die Zeit, die Sie mit mir verbracht haben.