

Dekohärenz gekoppelter Spin- und Qubit-Systeme

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

vorgelegt von
Johannes Wernz
aus Königsbronn

Hauptberichter: Prof. Dr. U. Weiß
Mitberichter: Prof. Dr. G. Mahler
Tag der mündlichen Prüfung: 18. August 2003

Institut für Theoretische Physik II
Universität Stuttgart

2003

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	1
Symbolverzeichnis	2
Einleitung	6
1 Grundlagen des Quantencomputings	10
1.1 Grundlagen	10
1.2 Gatter	10
1.3 Algorithmen	11
1.3.1 Faktorisierung	12
1.3.2 Quanten-Fourier-Transformation	12
1.3.3 Aktuelle kryptographische Methode	14
1.4 Fehlerkorrektur	15
1.5 Mögliche Realisierungen von Quantencomputing	15
1.5.1 Ionenfallen	15
1.5.2 NMR-Methoden	15
1.5.3 Josephson-Kontakte	15
2 Influenzfunktionalmethode	18
2.1 Klassische Betrachtung	18
2.2 Quantenmechanische Betrachtung	20
2.2.1 Pfadintegralmethodik	20
2.2.2 Konkrete Ausführung der Methodik für ein Boson-Bad	21
2.2.3 Noninteracting-Blip Approximation (NIBA)	24
3 Redfield-Methode	27
3.1 Zeit-Entwicklung der reduzierten Dichtematrix	27
3.1.1 Zeit-Entwicklung im Wechselwirkungsbild	28
3.1.2 Liouville-von-Neumann-Gleichung im Wechselwirkungsbild	28
3.2 Markov-Annahme	29
3.3 Die Redfield-Gleichungen	32
3.3.1 Die Säkular-Approximation	33

4	Einzelnes Qubit: Dekohärenz	34
4.1	Influenzkern: Analytische Grenzfälle	34
4.1.1	$T = 0$	36
4.1.2	$T \rightarrow 0$	36
4.1.3	$T \rightarrow \infty$	38
4.1.4	Überblick	38
4.2	Resultierende Dynamik	39
4.2.1	$T = 0$	39
4.2.2	$T \rightarrow \infty$	41
4.2.3	Überblick	42
4.3	Abbildungen zur Ein-Qubit-Dekohärenz	43
5	Zwei-Spin-System: Influenzfunktionalmethode	48
5.1	Verhalten des Zwei-Spin-Systems ohne Bad	49
5.2	Dichtematrixdarstellung der freien Propagation	52
5.3	Ankopplung an das Bad	57
5.4	Influenzfunktional	58
5.5	Influenzkern	62
5.6	Dynamik	63
5.7	Algorithmus	64
5.8	Analyse der Dynamik beim Zwei-Spin-System	69
5.9	Matrixmethode	72
6	Zwei-Spin-System: Redfield-Methode	77
6.1	Hamiltonian	77
6.2	Algorithmus	80
6.3	Thermisches Gleichgewicht	82
7	Zwei-Spin-System: Resultate	84
7.1	Spin-Bad mit Influenzfunktionalmethode	84
7.2	Boson-Bad mit Influenzfunktionalmethode	90
7.3	Boson-Bad mit Redfield-Methode	93
7.4	Gültigkeitsbereiche der beiden Verfahren	105
8	Drei-Spin-System: Influenzfunktionalmethode	109
8.1	Drei-Spin-System ohne Bad	110
8.2	Drei-Spin-System mit Ankopplung an das Wärmebad	113
8.3	Dynamik	114
8.4	Influenzkern	114
8.5	Algorithmus	115
9	Drei-Spin-System: Redfield-Methode	117
9.1	Hamiltonian	117

10 Drei-Spin-System: Resultate	120
11 Zusammenfassung	127

Kurzfassung

In dieser Arbeit wird die Dynamik gekoppelter Spin- bzw. Qubit-Systeme, die wiederum an ein Bad koppeln, mit verschiedenen Methoden untersucht. Gekoppelte Spin-Systeme sind für Anwendungen wie z.B. Quantencomputing von großem Interesse. Unlängst wurde ein Quantencomputer mit sieben Qubits (siehe Abbildung 1) realisiert. Die Hoffnung besteht, daß sich in nächster Zeit auch größere Quantencomputer realisieren lassen. Ein großer Teil der angedachten Operationen, die ein Quantencomputer ausführen muß, sind 2-Qubit-Operationen. Hier spielt Dekohärenz eine wichtige Rolle, denn das System soll möglichst lang kontrollierbar sein, seine Kohärenzzeiten sollen lang sein. Mit den analytischen und numerischen Methoden, die hier verwendet werden, kann die Dynamik gekoppelter Qubit-Systeme in allen Parameterbereichen berechnet werden. Jede der vorgestellten Methoden hat in bestimmten Parameterbereichen ihre Stärken. So wird zum Beispiel im Bereich schwacher Ankopplung an das Bad ein Redfield-Algorithmus implementiert, für stärkere Ankopplungen wird ein rekursiver Algorithmus im Rahmen der Pfadintegralmethode verwendet. Es werden die Einflüsse sowohl von Boson-Bädern als auch von Spin-Bädern betrachtet.

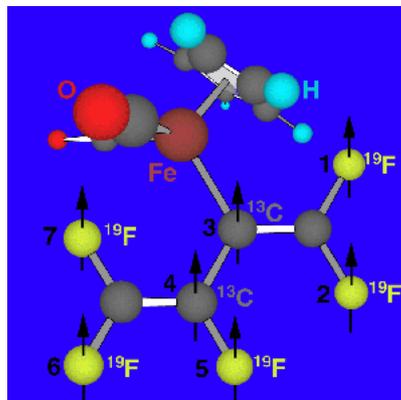


Abbildung 1: Molekül mit sieben Qubits, Quelle: IBM

Symbolverzeichnis

a, a_0, b, c, d, r	Register-Werte
$\mathcal{A}[q]$	freier Propagator
b, s	Bad- und Systemkoordinaten
B_n	Bias-Faktor
B_x, B_z	Komponenten des Magnetfeldes
c_n^\dagger, c_n	Teilchenerzeuger bzw. -vernichter am Gitterplatz n
c_α	System-Bad-Kopplungen
C, T	verschlüsselter Text, Originaltext
C_g, C_J	Kapazitäten
$\mathcal{D}q$	Pfadintegralmaß
e	Ladung
e_0	Elementarladung
E	Energie
E_C	Ladungsenergie
E_J	Josephsonenergie
\mathcal{E}	Badpolarisation
$\hat{f}(\lambda)$	Laplacetransformierte einer Funktion $f(t)$
F, Q	Bad- und Systemoperatoren
$F_{\text{FV}}[q, q']$	Feynman-Vernon-Influenzfunktional für faktorisierende Anfangszustände
$F_G[q, q'; s]$	verallgemeinertes Influenzfunktional
g, k	privater und öffentlicher Schlüssel
$g(\lambda), h(\lambda)$	Influenzkerne
G_{kl}	Zwei-Spin-Korrelationsfunktion
$G(\omega)$	normierte Spektraldichte
$G_D(\omega)$	normierte Spektraldichte eines Debye-Bades
h	Plancksches Wirkungsquantum
H	Hamiltonoperator, Hadamard-Gatter
H_S	Hamiltonoperator des Systems
H_B	Hamiltonoperator des Wärmebades
H_I	Hamiltonoperator der System-Bad-Wechselwirkung

H_{TSS}	Hamiltonoperator des isolierten Zweizustandssystems
$H_{2\text{qb}}$	Hamiltonoperator des isolierten gekoppelten Zweizustandssystems
I	Identität
J	Kopplungsparameter
J_x, J_y, J_z	direkte Kopplungen
J_k	Entwicklungskoeffizienten des Influenzkerns $Q(z)$
$J(\omega)$	Spektraldichte des Bades
$J(q_f, q'_f, t; q_i, q'_i, 0)$	propagierende Funktion
$J_G(q_f, q'_f, t; q_i, q'_i; \bar{q}, \bar{q}')$	verallgemeinerte propagierende Funktion
k	Anzahl von Qubits
k_B	Boltzmann-Konstante
$k^+(\epsilon), k^-(\epsilon)$	Vorwärts- bzw. Rückwärtsrate
K	Kondo-Parameter
K_{zz}	direkte Kopplung
$K(q, x, t; q', x', 0)$	Feynman-Propagator
$K(t)$	Korrelationsfunktion der stochastischen Kraft
$K(\omega)$	Rauschspektrum der stochastischen Kraft
L	Induktivität, Anzahl von Bits
$L(t)$	Badkorrelationsfunktion
$ L\rangle, R\rangle$	lokalisierte Zustände
m_α	Massen der Badoszillatoren
$ m\rangle$	Eigenzustände des Systems
M	Systemmasse
n	Anzahl der Cooper-Paare
n_g	Eingangsladung
$ n\rangle$	Ladungszustände
N	Normierungsfaktor der Wellenfunktion, faktorisierbare Zahl
p	Aufenthaltswahrscheinlichkeit
p, q	Primzahlen
p_α	Impulse der Badoszillatoren
P	Population
$P_{\uparrow\uparrow}, P_{\uparrow\downarrow}, P_{\downarrow\uparrow}, P_{\downarrow\downarrow}$	Wahrscheinlichkeiten
q	Systemort
$q(t), q'(t)$	Systempfade
$Q(z)$	Influenzkern
R	Redfield-Tensor
s_i	Differenzzeit (Dauer des i -ten Sojourns)
$S[q, x]$	Wirkung des Gesamtsystems

$S_S[q], S_B[x], S_I[q, x]$	Wirkung von System, Bad und Wechselwirkung
t	Zeit
t_i	Sprungzeit
t_s	stationärer Punkt
T	Temperatur
u_i	Sprungzeit
U	Ein-Bit-Gatter
V	Spannung
V_a, V_b, V_c, V_0	Qubit-Zustände
V_b	Barrierrhöhe
V_g	Gate-Spannung
V_{SB}	Wechselwirkungsoperator
V_0	Potentialhöhe einer Punktbarriere
$V(q)$	potentielle Energie
W_B	kanonische Dichtematrix des Bades
W_β	kanonische Dichtematrix des Gesamtsystems
$W(t)$	zeitabhängige Dichtematrix des Gesamtsystems
x_α	Orte der Badoszillatoren
$x(t), x'(t)$	Pfade der Badoszillatoren
X	NOT-Gatter
$X_{j,k}$	Wechselwirkung zwischen Sojourn j und Blip k
$X(t)$	verschobener Influenzkern
$y(t)$	Relativkoordinate
z	komplexwertige Zeit
z_s	stationärer Punkt
Z	Zustandssumme
$Z(\omega)$	Impedanz
$Z_{ne}(\rho, \kappa, \nu, t)$	erzeugendes Funktional
$ \alpha\rangle$	Eigenzustände des Bads
β	inverse Temperatur
$\gamma, \tilde{\gamma}$	verschiedene Zerfallskonstanten
$\gamma(t)$	Dämpfungskern
Γ	Raten im Redfield-Formalismus
$\Gamma(z)$	Eulersche Gammafunktion
δ_s	dimensionsloser Kopplungsparameter
$\delta(t)$	Diracsche Deltafunktion
Δ	Tunnelmatrizelement
Δ_0	ungedresstes Tunnelmatrizelement
$\Delta_{\text{eff}}, \Delta_r, \Delta_s$	renormierte Tunnelmatrizelemente
ϵ	Bias
$\zeta(t)$	antisymmetrisierter Systemort
$\zeta(y, q)$	verallgemeinerte Riemannsche Zeta-Funktion
η	Viskosität

$\eta(t)$	symmetrisierter Systemort
Θ	Phase
$\Theta(t)$	Heaviside-Stufenfunktion
κ	Temperaturparameter
λ	Laplacevariable
λ_{ij}	System-Bad-Kopplung
$\lambda(q_i, q'_i; \bar{q}, \bar{q}')$	Präparationsfunktion
$\Lambda_{j,k}$	Wechselwirkung zwischen den Blips j und k
$\rho(t)$	reduzierte Dichtematrix
$\rho_B(t)$	Dichtematrix des Bads
$\rho_S(t)$	Systemdichtematrix
$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$	Pauli-Matrizen
$\Sigma(\lambda)$	Selbstenergie
τ_c	Korrelationszeit
τ_i	Differenzzeit (Dauer des i -ten Blips)
ϕ, ϕ_{ext}	Fluß durch einen SQUID
$\phi_{\text{FV}}[q, q'], \phi[q, q']$	Influenzphase
χ	symmetrisierter Systemort
$\chi_x(t), \chi_z(t)$	σ_x - bzw. σ_z -Antwortfunktion
$\tilde{\chi}_x(\omega), \tilde{\chi}_z(\omega)$	σ_x - bzw. σ_z -Suszeptibilität
$\psi(z)$	Eulersche Digammafunktion
Ψ	Wellenfunktion
$\Psi^\dagger(x)$	Fermion-Erzeugungsoperator
ω_0	typische Systemfrequenz
ω_c	Cutoff-Frequenz des Bades
ω_l	adiabatische Cutoff-Frequenz
ω_α	Frequenzen der Badoszillatoren
$\Omega, \tilde{\Omega}$	Systemfrequenzen
$ 0\rangle, 1\rangle$	Qubit-Zustände
$ +\rangle, -\rangle$	Energieeigenzustände des Spin-Boson-Modells
$ \uparrow\rangle, \downarrow\rangle$	lokalisierte Zustände

Einleitung

In den letzten Jahren haben sich auf dem Feld des Quantencomputings interessante Entwicklungen ergeben. Einerseits wurden Algorithmen vorgeschlagen, die die besonderen Aspekte der Quantenmechanik (Verschränkung von Zuständen, Parallelität) ausnutzen und dadurch einem Quantencomputer bei einigen Fragestellungen klare Vorteile gegenüber einem klassischen Computer verschaffen. Auf der anderen Seite ist man erst unlängst wieder einen guten Schritt bei der technischen Realisierung von Quantencomputern vorangekommen. In einem IBM-Laboratorium konnte ein Algorithmus zur Faktorisierung von Zahlen implementiert werden, und zwar mit dem Quantencomputer aus Abbildung 1. Die Diskussion über das Quantencomputing hat zu einem Zusammenwirken der theoretischen Informatik, der Mathematik, insbesondere der Zahlentheorie, und der Physik geführt. So beruht der zur Zeit aktuelle Algorithmus zur Verschlüsselung von Daten, der von Software-Paketen wie der Secure Shell (SSH) usw. verwendet wird, auf einer mathematischen Methode, die in Ref. [1] vorgeschlagen wurde. Diese Methode wird jedoch bei einer Realisierung von größeren Quantencomputern hinfällig werden, da ein Quantencomputer schnelle Faktorisierungen großer Zahlen leisten könnte. In Ref. [2] wird die Implementierung der Faktorisierung angegeben, die durch die Gesetzmäßigkeiten der Quantenmechanik möglich wird. Ein zentrales Problem beim Quantencomputing ist die Dekohärenz. Die Ergebnisse der durchgeführten Qubit-Operationen lassen sich nur dann sinnvoll auslesen,

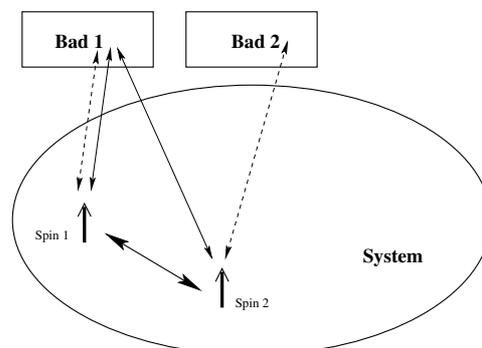


Abbildung 2: Zwei Spins wechselwirken untereinander und mit dem Bad, bzw. mit den Bädern.

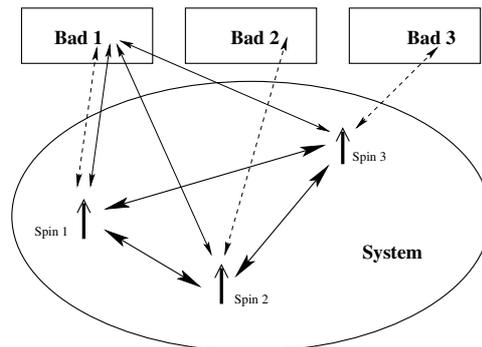


Abbildung 3: Drei Spins wechselwirken untereinander und mit dem Bad, bzw. mit den Bädern.

wenn die Dekohärenz des Systems im relevanten Zeitraum nicht allzu groß ist. Die Dekohärenz wird in entscheidendem Maße von der Wechselwirkung mit der Umgebung bestimmt. Die Umgebung wird hier oft als Bad bezeichnet. Das Bad ist entweder ein bosonisches Bad oder ein Spin-Bad. Jeder dieser Bad-Typen hat seine physikalische Relevanz. Der wesentliche Parameter des Bades ist dessen Temperatur. Außerdem spielt natürlich die interne Wechselwirkung des gekoppelten Qubit-Systems eine entscheidende Rolle. Die Effekte, die sich aus dem Zusammenspiel dieser Parameter ergeben, werden hier untersucht. Dies erfolgt für Zwei- und Drei-Spin-Systeme. Ein Schema solcher Systeme ist in den Abbildungen 2 und 3 skizziert. Dabei bietet sowohl die Ankopplung an ein einzelnes, als auch die Ankopplung an verschiedene Bäder interessante Aspekte (siehe Abbildungen 4 und 5).

Ein gekoppeltes Spin- bzw. Qubitsystem, das in Wechselwirkung mit der Umgebung steht, ist außerdem ein gutes Modell für den quantenmechanischen Meßprozeß. Dabei repräsentiert der eine Spin das System und der andere Spin die Meßapparatur. Weitere Anwendungen dieses Modells sind gekoppelte Kondo-Verunreinigungen [3], Paare von Tunneldefekten, die mit Phononen oder Elektronen wechselwirken [4] und Paare von Chromophoren in einem großen Molekül, die an Phononen oder Polaritonen koppeln [5]. Bei vielen Gläsern kann dieses Modell herangezogen werden [6]-[11]. Das gekoppelte Spinsystem kann auch für die Erweiterung von Wilson's Nukleon-Meson-Modell [12] auf zwei Nukleonen verwendet werden. Spin-Bäder sind insbesondere zur Modellierung magnetischer Verunreinigungen von Interesse.

Um gekoppelte Qubit-Systeme bzw. deren Dekohärenzverhalten zu betrachten, wurden zwei Algorithmen implementiert. Der eine fußt auf der Pfadintegralmethode, der andere auf einem störungstheoretischen Ansatz (Redfield). Die Implementierung von zwei Algorithmen ist notwendig, da der Pfadintegralansatz aus technischen Gründen nicht im ganzen Parameterbereich gute quantitative Ergebnisse liefert. Um auch die Parameterbereiche sehr schwacher Ankopplung an die Umgebung auszuschöpfen, wurde der zweite Algorithmus, beruhend auf der

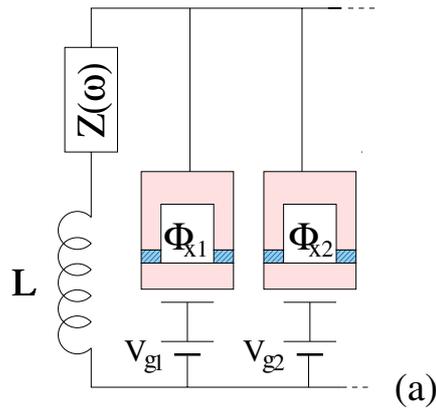


Abbildung 4: Die Konfiguration (a) der Josephson-Qubits entspricht der Ankopplung an ein gemeinsames Bad. Dabei ist L eine Induktivität und $Z(\omega)$ ist die Impedanz.

Redfield-Methode, implementiert. Im Zusammenspiel der Algorithmen konnten im ganzen Parameterraum Ergebnisse gewonnen werden.

In Kapitel 1 werden die Prinzipien des Quantencomputings und mögliche Algorithmen, die man mit einem Quantencomputer realisieren kann, vorgestellt. Die Frage der Dekohärenz und ihrer Konsequenzen für das Quantencomputing sowie denkbare Auswege werden diskutiert. In Kapitel 2 und 3 werden die methodischen Ansätze beschrieben, wie Dekohärenz bei der Berechnung der Dynamik gekoppelter Qubit-Systeme berücksichtigt werden kann. Dies geschieht einerseits im Rahmen der Influenzfunktionalmethode und andererseits im Rahmen der Redfield-Methode. In Kapitel 4 wird das Dekohärenzverhalten eines einzelnen Qubits für ein Spin-Bad angegeben. In Kapitel 5 und 6 werden diese Methoden numerisch und teils analytisch auf ein gekoppeltes 2-Qubit-System angewendet. Kapitel 7 beinhaltet Abbildungen dazu. In Kapitel 8 und 9 wird ein gekoppeltes 3-Qubit-System diskutiert. Abbildungen dazu folgen in Kapitel 10.

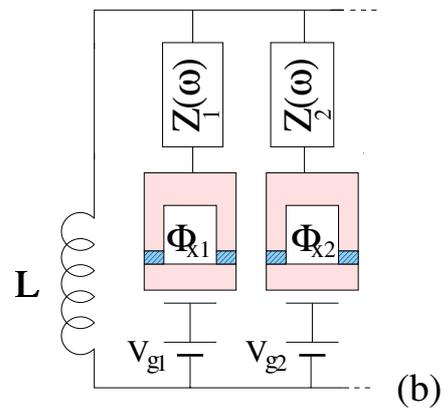


Abbildung 5: Die Konfiguration (b) der Josephson-Qubits entspricht einer Ankopplung an verschiedene Bäder. Dabei ist L eine Induktivität und $Z_1(\omega)$ und $Z_2(\omega)$ sind Impedanzen.

Kapitel 1

Grundlagen des Quantencomputings

In diesem Kapitel werden Grundlagen und Prinzipien des Quantencomputings vorgestellt. Die bisher bekannten Problemstellungen und zugehörigen Algorithmen, bei denen das Quantencomputing dem herkömmlichen Computing überlegen ist, werden skizziert. Schließlich werden noch Realisierungsmöglichkeiten des Quantencomputings andiskutiert, die gerade von experimenteller Seite getestet werden und einigermaßen erfolversprechend sind.

1.1 Grundlagen

Der Hauptaspekt, der Quantencomputing von anderen Formen des Computings unterscheidet, ist der, daß man im Bereich der Quantenphysik über den erwarteten Zustand des Systems nur Wahrscheinlichkeits-Aussagen treffen kann. Das System besteht hier aus einer Anzahl von Quantenbits, den sogenannten Qubits. Es erscheint auf den ersten Blick eher störend im Zusammenhang mit Computing, daß über den System-Zustand nur Wahrscheinlichkeits-Aussagen gemacht werden können. Allerdings hat es sich gezeigt, daß es Problemstellungen gibt, die gerade aus diesem Aspekt Profit ziehen. Von Shor konnte ein Algorithmus zur Faktorisierung von Zahlen aufgezeigt werden, der klassischen Implementierungen weit überlegen ist [2]. Dieser Algorithmus macht sich das Prinzip der Quanten-Fourier-Transformation zunutze, welches in Abschnitt 1.3.2 besprochen wird.

1.2 Gatter

Einfache unitäre Operationen an Qubits werden logische Quanten-Gatter genannt. Wenn sich zum Beispiel ein Qubit in seiner zeitlichen Entwicklung wie $|0\rangle \rightarrow |0\rangle$ und $|1\rangle \rightarrow \exp(i\omega t)|1\rangle$ verhält, dann kann man sagen, daß für eine

Zeit t die Operation oder eben das Gatter

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\omega t) \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

auf das Qubit angewandt wurde. Einige Beispiele für Gatter sind die Identität

$$I \equiv |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|, \quad (1.2)$$

das NOT-Gatter

$$X \equiv |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \quad (1.3)$$

und das Hadamard-Gatter

$$H \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(|0\rangle + |1\rangle \right) \langle 0| + \left(|0\rangle - |1\rangle \right) \langle 1| \right]. \quad (1.4)$$

Diese Gatter wirken alle auf ein einzelnes Qubit. Das NOT-Gatter wird oft als X bezeichnet, denn es entspricht der Wirkung von σ_x .

Bei den möglichen 2-Bit-Gattern gibt es eine interessante Untergruppe, die wie folgt zustande kommt

$$|0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes U. \quad (1.5)$$

Dabei ist I die Ein-Bit-Identität und U ist ein anderes Ein-Bit-Gatter. Ein solches Zwei-Bit-Gatter wird kontrolliertes U genannt, weil entweder I oder U auf das zweite Qubit angewendet wird, je nachdem ob das erste Qubit im Zustand $|0\rangle$ oder $|1\rangle$ ist. Das kontrollierte NOT (CNOT) wirkt also wie folgt

$$\begin{aligned} |00\rangle &\rightarrow |00\rangle, \\ |01\rangle &\rightarrow |01\rangle, \\ |10\rangle &\rightarrow |11\rangle, \\ |11\rangle &\rightarrow |10\rangle. \end{aligned} \quad (1.6)$$

1.3 Algorithmen

Es gibt bisher zwei bekannte Problemstellungen und zugehörige Algorithmen, bei denen das Quantencomputing dem herkömmlichen Computing um einen sehr großen Zeitfaktor überlegen ist. Auf den Algorithmus zur Faktorisierung von Zahlen und die zugrundeliegende Quanten-Fourier-Transformation soll hier eingegangen werden. Wenn dieser Algorithmus für große Zahlen implementiert werden kann, dann wird das in Abschnitt 1.3.3 beschriebene kryptographische Verfahren hinfällig. Dies würde durchaus eine tiefgreifende Veränderung im Sektor der Daten-Verschlüsselung bewirken.

1.3.1 Faktorisierung

Das Problem der Faktorisierung ist deshalb von großem Interesse, weil eine schnelle Faktorisierung großer Zahlen die aktuelle Kryptographie-Methode (Abschnitt 1.3.3) außer Kraft setzen würde.

Die zu faktorisierende Zahl sei N und sei darstellbar durch L Bits. Die Grundidee der Faktorisierung durch einen Quantencomputer ist es, mittels einer Fourier-Transformation eine bestimmte Periode zu finden, welche es erlaubt, eine Faktorisierung der Zahl N durchzuführen. Um die Zahl N zu faktorisieren, werden zuerst zwei Residuen gesucht, für die $x^r \equiv 1 \pmod{N}$ bzw. $(x^{r/2} + 1)(x^{r/2} - 1) \equiv 0 \pmod{N}$ gilt. Daher muß $(x^{r/2} + 1)$ den einen und $(x^{r/2} - 1)$ den anderen Faktor von N enthalten. Diese können durch die Suche nach dem größten gemeinsamen Teiler von $(x^{r/2} + 1)$ und N bzw. von $(x^{r/2} - 1)$ und N in polynomischer Zeit gefunden werden. Im Faktorisierungs-Algorithmus sucht man die multiplikative Periode r . Wenn r gerade ist, kann i.a. gesagt werden, daß einer der gesuchten Faktoren damit der größte gemeinsame Teiler von $(x^{r/2} + 1)$ und N ist. Es wird in der Zahlentheorie gezeigt, daß durch Ausprobieren verschiedener Werte von x relativ schnell ein geeigneter Wert gefunden werden kann.

Um nun die Periode für eine gegebenes x zu finden, wendet man die Quanten-Fourier-Transformation an. Diese wird im Abschnitt 1.3.2 beschrieben.

1.3.2 Quanten-Fourier-Transformation

Hier wird eine Quanten-Fourier-Transformation beschrieben, die auf L Qubits wirkt. Die Quanten-Fourier-Transformation bildet einen Zustand V_a auf eine Superposition der Zustände V_b ab:

$$V_a \rightarrow \frac{1}{2^{L/2}} \sum_{b=0}^{2^L-1} \exp(2\pi iab/2^L) V_b . \quad (1.7)$$

Hierbei ist a eine Zahl zwischen 0 und $2^L - 1$. Die Transformation (1.7) definiert eine unitäre Matrix. Man kann diese Transformation in eine Sequenz von Ein- und Zwei-Bit-Gattern zerlegen.

Der Computer hat im Wesentlichen 2 Register. In den folgenden direkten Produkten bezieht sich der erste Faktor immer auf das erste Register und der zweite Faktor bezieht sich auf das zweite Register.

Zuerst wird der Computer in einen Zustand versetzt, in dem das erste Register der Superposition aller möglicher Werte entspricht, also

$$\frac{1}{2^L} \sum_{a=0}^{2^{2L}-1} V_a \otimes V_0 . \quad (1.8)$$

Der Wert von a im ersten Register wird nun benutzt, um im zweiten Register den Wert $x^a \pmod{N}$ zu berechnen. Der Computer hat nun den Zustand

$$\frac{1}{2^L} \sum_{a=0}^{2^L-1} V_a \otimes V_{x^a \pmod{N}} . \quad (1.9)$$

Jetzt wird die Fourier-Transformation (1.7) vom ersten Register gebildet. Der Zustand ist dann

$$\frac{1}{2^{2L}} \sum_{a=0}^{2^L-1} \sum_{c=0}^{2^L-1} \exp(2\pi iac/2^{2L}) V_c \otimes V_{x^a \pmod{N}} . \quad (1.10)$$

Bei einer Zustandsmessung wird das Ergebnis $V_c \otimes V_{x^a \pmod{N}}$ mit einer Wahrscheinlichkeit, die dem Quadrat des jeweiligen Koeffizienten im Ausdruck (1.10) entspricht, gewonnen. Da viele Werte $x^a \pmod{N}$ gleich sind, tragen viele dieser Koeffizienten zur Wahrscheinlichkeit des gemessenen Zustands bei. Alle diese Werte von a , die denselben Wert $x^a \pmod{N}$ liefern, können als

$$a = a_0 + br \quad (1.11)$$

dargestellt werden. Hierbei ist a_0 der kleinste Wert und b eine Zahl zwischen 0 und $2^{2L}/r$. Die Wahrscheinlichkeit ist also

$$\frac{1}{2^{4L}} \left| \exp(2\pi i a_0 c / 2^{2L}) \sum_{b=0}^{\lfloor 2^{2L}/r \rfloor + \eta} \exp(2\pi i b r c / 2^{2L}) \right|^2 , \quad (1.12)$$

wobei η entweder 0 oder 1 ist, je nach Wert von $2^{2L} \pmod{r}$ und a_0 . Die Summe im Ausdruck (1.12) ist die geometrische Summe komplexer Zahlen, die mit gleichem Abstand auf dem Einheitskreis verteilt sind. Diese Summe ist klein, außer wenn diese Zahlen weitgehend in eine Richtung zeigen. Damit dies der Fall ist, sollte die Bedingung

$$\frac{rc}{2^{2L}} = d + O(r/2^{2L}) \quad (1.13)$$

oder auch

$$\frac{c}{2^{2L}} = \frac{d}{r} + O\left(\frac{1}{2^{2L}}\right) \quad (1.14)$$

gelten. Dabei ist d eine natürliche Zahl.

Es muß dann noch ein Bruch $\frac{d}{r}$ gefunden werden, der nahe bei $\frac{c}{2^{2L}}$ liegt.

Um eine Quanten-Fourier-Transformation zu implementieren geht man ganz analog zum Cooley-Tukey-Algorithmus [13] der schnellen Fourier-Transformation vor. Dieser nutzt die Symmetrien der Einheitswurzeln aus. Um die Quanten-Fourier-Transformation für $(k+1)$ Qubits durchzuführen, muß man $k+1$ weitere Gatter auf die Fourier-Transformation von k Qubits anwenden, dies geschieht in induktiver Form.

1.3.3 Aktuelle kryptographische Methode

Das aktuelle Verfahren zur Daten-Verschlüsselung beruht auf der Unmöglichkeit der schnellen Zerlegung großer Zahlen in ihre Primfaktoren. Unmöglichkeit ist in diesem Zusammenhang ein relativer Begriff. Der mathematisch stichhaltige Beweis, daß eine solche Zerlegung nicht doch schneller möglich ist, konnte bisher nicht erbracht werden. Es wird allerdings weitgehend vermutet, daß eine solche Zerlegung nicht schneller geht als durch sukzessives Ausprobieren. Man muß alle möglichen Teiler durchprobieren. Grundthese der aktuellen Methode ist also: Eine schnelle Zerlegung in Primfaktoren ist nicht möglich.

Diese Grundthese gilt aber nur für klassische Computer, nicht für Quantencomputer, wie in Abschnitt 1.3.1 und 1.3.2 aufgezeigt wurde.

Selbst klassische Algorithmen, die für den Zweck der Primfaktorzerlegung optimiert sind, sind vergleichsweise langsam [14]. Wenn es sich um eine Zahl der Größenordnung 10^{200} handelt, dann sind im Schnitt ca. 10^{50} Versuche nötig. Bei einem sehr guten Prozessor kann man von 10^{20} Berechnungen in der Sekunde ausgehen. Als Angreifer benötigt man also immer noch 10^{30} Sekunden, d.h. immer noch über 10^{20} Jahre. Selbst wenn man alle Rechner der Welt benutzen würde, könnte man es nicht schaffen. Auch wenn die Rechnerleistung in den nächsten Jahren weiter enorm zunehmen würde, etwa um einige Zehnerpotenzen, würde sich daran nichts ändern. Ein kryptographisches System, das den Angreifer zur Zerlegung der Information in ihre Primzahlen zwingt, ist also gut geeignet.

Programme wie zum Beispiel das Software-Paket Secure Shell (SSH) oder das Software-Paket PGP (pretty good privacy) erzeugen zwei große Primzahlen p und q . Außerdem erzeugen sie zwei Zahlen g und k , die der folgenden Bedingung gehorchen müssen: Die Zahl $(k * g - 1)$ muß durch die Zahl $(p - 1) * (q - 1)$ teilbar sein. Das gewährleistet später die mögliche Entschlüsselung.

Wenn man p und q hat, dann wird man relativ schnell zwei Zahlen g und k finden, die der obigen Bedingung gehorchen [15]. Jetzt wird die Zahl $n = p * q$, also das Produkt der beiden großen Primzahlen p und q , und die Zahl k bekanntgegeben (zum Beispiel auf einer Homepage). Diese beiden Zahlen n und k sind der öffentliche Schlüssel. Die Zahl g ist der private Schlüssel, dieser ist geheim und wird sicher verwahrt. Eine Nachricht wird nun folgendermaßen verschlüsselt: Man besorgt sich zur Verschlüsselung den öffentlichen Schlüssel des Empfängers. Die Elemente n und k dessen öffentlichen Schlüssels sind ja zugänglich. Die Software berechnet $C = T^k \pmod n$, das heißt: die verschlüsselte Nachricht ist der Rest der Division T^k/n . Dabei ist T der Original-Text und C der verschlüsselte Text. Das Ganze ist nun so konstruiert, daß der Rest der Division C^g/n wieder dem Originaltext T entspricht. Der Empfänger nimmt also seinen privaten Schlüssel g , um den verschlüsselten Text zu potenzieren, teilt das Ergebnis durch n und behält den Rest, der wiederum dem Original-Text entspricht.

1.4 Fehlerkorrektur

Dekohärenz ist eine entscheidende Fehlerquelle beim Quantencomputing. Mittlerweile sind einige Methoden zur Fehlerkorrektur vorgeschlagen worden, die solche Fehler in einem gewissen Maße korrigieren können [16, 17]. Dekohärenzeffekte in Abhängigkeit der verschiedenen Parameter werden in dieser Arbeit ausführlich untersucht.

1.5 Mögliche Realisierungen von Quantencomputing

In diesem Abschnitt werden mögliche Realisierungen von Quantencomputing vorgestellt.

1.5.1 Ionenfallen

Eine Kette einfach geladener Atome wird in einer linearen Ionenfalle gespeichert. Die Ionen sind dabei ungefähr $20 \mu\text{m}$ voneinander entfernt. Jedes Ion wird durch ein Paar von Laserstrahlen adressiert, die sowohl Raman-Übergänge induzieren als auch Veränderungen in der Bewegung der Ionen. Der Bewegungsfreiheitsgrad dient dabei als Bus, über den Quanten-Information zwischen den Ionen transportiert wird. Zustände werden durch optisches Pumpen und Laserkühlung hergestellt, das Auslesen geschieht durch Resonanz-Fluoreszenz.

1.5.2 NMR-Methoden

Man hat bei dieser Methode eine Flüssigkeit von ca. 10^{20} Molekülen (siehe z.B. Abbildung 1). Diese wird so platziert, daß das oszillierende magnetische Feld auf sie wirken kann. Man kann das mittlere magnetische Moment der Flüssigkeit detektieren. Die Quanten-Information wird von den Kernspins gespeichert und manipuliert. Die Energieniveaus der Spins werden durch die direkte Wechselwirkung mit benachbarten Kernen beeinflusst. Auf diese Weise können Gatter realisiert werden. Eine geringe Beeinflussung durch die Umgebung, also eine schwache Ankopplung an das Bad, ist hier gegeben. Bei IBM war man in der Lage, mit den Molekülen aus Abbildung 1 die Zahl 15 in ihre Faktoren 3 und 5 zu zerlegen. Dies läßt hoffen, daß man die NMR-Methode noch weiter vorantreiben kann.

1.5.3 Josephson-Kontakte

Eine weitere Methode zur Realisierung von gekoppelten Qubit-Systemen sind Josephson-Kontakte, die gemäß den Abbildungen 4 und 5 gekoppelt werden. In solchen Josephson-Qubits ist die Kohärenz des supraleitenden Zustands mit den

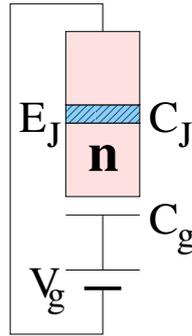


Abbildung 1.1: Josephson-Ladungs-Qubit

Kontrollmöglichkeiten von Einzel-Elektronen-Systemen kombiniert. Es kann eine große Zahl an Ein- und Zweibit-Operationen durchgeführt werden. Nach den Quantenmanipulationen wird der Endzustand durch Ankoppeln der Qubits an einen Einzel-Elektronen-Transistor ausgelesen.

Betrachtet man Josephson-Kontakte, bei denen die Ladungsenergie über die Kopplungsenergie dominiert, dann kann man Qubits präparieren, deren Zustände sich durch ein Cooper-Paar unterscheiden. Die gewünschten Gatter können dann durch kontrollierte Eingangsspannungen und Magnetfelder ausgeführt werden. Eine einfache Realisierung eines Josephson-Ladungs-Qubits ist in Abbildung 1.1 dargestellt. Es besteht aus einer kleinen supraleitenden Insel, mit n überschüssigen Cooper-Paar-Ladungen (im Vergleich zu einem neutralen Referenz-Zustand). Diese ist über einen Tunnelkontakt mit der Kapazität C_J und der Josephson-Kopplungsenergie E_J an eine supraleitende Elektrode gekoppelt. Die Eingangsspannung V_g ist über eine Eingangskapazität C_g an das System angekoppelt. Ist die supraleitende Energielücke Δ die größte Energie, also auch größer als die Ladungsenergie des einzelnen Elektrons, dann ist das Tunneln von Quasipartikeln bei niedrigen Temperaturen unterdrückt. Dann tunneln ausschließlich Cooper-Paare in kohärenter Weise durch den Josephson-Kontakt und das System kann durch den Hamiltonian

$$H = 4E_C(n - n_g)^2 - E_J \cos \Theta \quad (1.15)$$

beschrieben werden. Dabei ist n der Operator, der die Anzahl der überschüssigen Cooper-Paar-Ladungen auf der Insel bestimmt. Die Phase Θ des supraleitenden Ordnungsparameters auf der Insel ist die dazu konjugierte Größe.

Es gilt $n = -i\hbar \partial / \partial(\hbar\Theta)$. Die dimensionslose Eingangsladung $n_g = C_g V_g / 2e$ ist für den Effekt der Eingangsspannung verantwortlich. Unter der Bedingung $E_C \gg E_J$, also wenn die Ladungsenergie über die Kopplungsenergie dominiert, kann man als Basis die Ladungszustände wählen. Diese sind über die Zahl der Cooper-Paare n auf der Insel parametrisiert. Der Hamiltonian lautet dann

$$H = \sum_n \left\{ 4E_C(n - n_g)^2 |n\rangle\langle n| - \frac{1}{2}E_J \left(|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n| \right) \right\}. \quad (1.16)$$

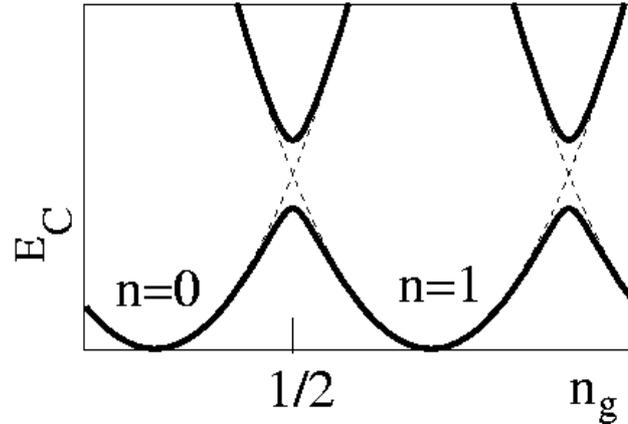


Abbildung 1.2: An den dargestellten Punkten mischt die kleinere Josephson-Kopplung die Ladungszustände und verändert die Energie der Eigenzustände. In der Nähe dieser Punkte reduziert sich das System zu einem Zwei-Zustands-System.

Für die meisten Werte von n_g werden die Energieniveaus vom Ladungsteil des Hamiltonians dominiert. Wenn jedoch n_g ungefähr halbzahlig wird und die Ladungsenergien von zwei Zuständen nahe beieinander liegen, dann werden sie vom Josephson-Tunneln gemischt. In einem solchen Fall reduziert sich das System zu einem Zwei-Zustands-System (Qubit). Dies ist in Abbildung 1.2 dargestellt. Der Hamiltonian lautet dann in der üblichen Notation

$$H = -\frac{1}{2}B_z\sigma_z - \frac{1}{2}B_x\sigma_x. \quad (1.17)$$

Die Ladungszustände $n = 0$ und $n = 1$ korrespondieren dann mit den Basiszuständen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$. Es wurden die Zuordnungen

$$B_z \equiv 4E_C(1 - 2n_g) \quad (1.18)$$

und

$$B_x \equiv E_J \quad (1.19)$$

getroffen. Eine ausführliche Darstellung dieser Realisierungsmöglichkeit gekoppelter Qubits findet sich in Ref. [18].

Kapitel 2

Influenzfunktionalmethode

Die dissipative Quantenmechanik erlaubt es, Dekohärenzeffekte quantitativ zu bestimmen. Man betrachtet ein System, das mit seiner Umgebung, also einem Wärmebad wechselwirkt. Diese Wechselwirkung ist entscheidend für die Dynamik des Systems. Das Wärmebad befindet sich im thermodynamischen Gleichgewicht. Wesentliche Parameter für eine Untersuchung der System-Dynamik sind die Temperatur der Umgebung und die spektrale Kopplungsfunktion, mit der das System an die Umgebung ankoppelt. In vielen Fällen ist es sehr gut, als Umgebung ein Bad aus harmonischen Oszillatoren, also ein Boson-Bad, zu betrachten. Ein Boson-Bad ist ein generisches Wärmebad. Ein Beispiel dafür ist ein Elektron, das sich in einer phononischen Umgebung befindet. Untersucht man magnetische Verunreinigungen, dann bietet sich ein Bad aus Spins an [19]. Die für ein Spin-Bad gewählte Vorgehensweise ist jedoch in weiten Teilen analog zu der beim Boson-Bad. Die Ankopplung des Systems an das Bad erfolgt linear in den Bad-Koordinaten. Beim Boson-Bad können klassische Lösungen angegeben werden. Man betrachtet dazu einen Oszillator, der mit anderen wechselwirkt. Die quantenmechanischen Lösungen ergeben sich im verwendeten Pfadintegralformalismus [20] als solche, die um den klassischen Pfad konstruiert werden können. Es sei hier auf den Zusammenhang zwischen quantenmechanischen Erwartungswerten und der klassischen Bewegungsgleichung hingewiesen (Ehrenfest-Theorem). Im folgenden Abschnitt wird die klassische Betrachtungsweise beschrieben, danach wird der quantenmechanische Zugang dargestellt.

2.1 Klassische Betrachtung

Die Hamilton-Funktion für ein Teilchen mit Masse M lautet

$$H_S(q, p) = \frac{p^2}{2M} + V(q) . \quad (2.1)$$

Das Bad wird ebenso durch harmonische Oszillatoren beschrieben. Diese haben die Masse m_α und die Frequenz ω_α . Die Bad-Hamilton-Funktion ist also

$$H_B(\{x_\alpha\}, \{p_\alpha\}) = \sum_\alpha \left(\frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{1}{2} m_\alpha \omega_\alpha^2 x_\alpha^2 \right). \quad (2.2)$$

Summiert wird über alle Bad-Oszillatoren. Die Kopplung zwischen System und Bad wird als linear angenommen. Der Wechselwirkungsterm lautet dann

$$H_I(q, \{x_\alpha\}) = - \sum_\alpha c_\alpha q x_\alpha + \sum_\alpha c_\alpha^2 q^2 / 2m_\alpha \omega_\alpha^2. \quad (2.3)$$

Der zweite Summand verhindert eine Renormierung des Potentials, das Bad soll ja nur Dissipation beschreiben. Die resultierende Hamiltonfunktion des Gesamtsystems ist dann

$$\begin{aligned} H &= H_S + H_B + H_I \\ &= \frac{p^2}{2M} + V(q) + \sum_\alpha \left\{ \frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{1}{2} m_\alpha \omega_\alpha^2 \left(x_\alpha - \frac{c_\alpha}{m_\alpha \omega_\alpha^2} q \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Hieraus lassen sich die klassischen Bewegungsgleichungen bestimmen, diejenige für das betrachtete System sieht dann folgendermaßen aus

$$M\ddot{q}(t) + M \int_{-\infty}^t dt' \gamma(t-t') \dot{q}(t') + \frac{\partial V}{\partial q} = 0. \quad (2.5)$$

Dies ist die Bewegungsgleichung eines Teilchens mit linearer, retardierter Dämpfung. Für $\gamma(t)$ gilt

$$\gamma(t) = \Theta(t) \frac{2}{\pi M} \int_0^\infty d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'} \cos(\omega' t). \quad (2.6)$$

Dieses Ergebnis kann man durch eine Fouriertransformation herleiten. Die spektrale Dichte wurde dabei wie folgt eingeführt:

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha} \delta(\omega - \omega_\alpha). \quad (2.7)$$

Die spektrale Dichte ist also für die Ankopplung des Bads an das System die entscheidende Größe. Hier müssen verschiedene Fälle unterschieden werden. Setzt man im Exponenten von

$$J(\omega) = \eta \omega \left(\frac{\omega}{\tilde{\omega}} \right)^{s-1} \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c} \right) \quad (2.8)$$

den Wert $s = 1$ ein, dann hat man den Ohmschen Fall, für $s < 1$ hat man den subohmschen und für $s > 1$ den superohmschen Fall. Hierbei ist η die Viskosität.

Der exponentielle Faktor gewährleistet ein Abschneiden der hohen Frequenzen, was physikalisch sinnvoll ist. Ohmsche oder Markovsche Dämpfung meint eine frequenzunabhängige Dämpfungskonstante. Dann lautet die spektrale Dichte

$$J(\omega) = \eta\omega \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c}\right). \quad (2.9)$$

2.2 Quantenmechanische Betrachtung

2.2.1 Pfadintegralmethodik

Der entscheidende Vorteil der Influenzfunktionalmethode nach Feynman-Vernon liegt darin, daß in ihr eine reduzierte Beschreibung der Dynamik resultiert, bei der die Freiheitsgrade des Bades nicht mehr enthalten sind. Man betrachtet also die reduzierte Dichtematrix. Bei dieser Methode werden alle möglichen Pfade des Systems im Phasenraum berücksichtigt und mit einer entsprechenden Wahrscheinlichkeit gewichtet aufsummiert. Im Rahmen der Quantenmechanik ist dieser Zugang sehr intuitiv. Die Zeitentwicklung des Dichteoperators lautet

$$\hat{\rho}(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\} \hat{\rho}(0) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\}. \quad (2.10)$$

Wobei der obige Hamiltonian verwendet wurde. Die Feynman-Propagatoren lauten dabei

$$K(q_f, \mathbf{x}_f, t; q_i, \mathbf{x}_i, 0) = \int \mathcal{D}q \mathcal{D}\mathbf{x} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S[q, \mathbf{x}]\right\}. \quad (2.11)$$

Hierbei ist $S[q, \mathbf{x}]$ die Wirkung,

$$S[q, \mathbf{x}] = \int_0^t d\tau [L_S(q(\tau)) + L_B(\mathbf{x}(\tau)) + L_I(q(\tau), \mathbf{x}(\tau))]. \quad (2.12)$$

Die Randbedingungen der Funktionalintegration sind

$$q(0) = q_i, \quad q(t) = q_f, \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_i, \quad \text{und} \quad \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_f. \quad (2.13)$$

Geht man in den Ortsraum, dann läßt sich die Von-Neumann-Gleichung für die Dichte-Matrix mit Hilfe der Feynman-Propagatoren schreiben als

$$\begin{aligned} \rho(q_f, \mathbf{x}_f, q'_f, \mathbf{x}'_f; t) &= \langle q_f, \mathbf{x}_f | \hat{\rho}(t) | q'_f, \mathbf{x}'_f \rangle \\ &= \int dq_i dq'_i d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}'_i K(q_f, \mathbf{x}_f, t; q_i, \mathbf{x}_i, 0) \\ &\quad \times \rho(q_i, \mathbf{x}_i, q'_i, \mathbf{x}'_i; 0) K^*(q'_f, \mathbf{x}'_f, t; q'_i, \mathbf{x}'_i; 0). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Nun werden die Badfreiheitsgrade eliminiert. Man geht zur reduzierten Dichtematrix

$$\begin{aligned}\rho(q_f, q'_f, t) &= \int d\mathbf{x}_f \rho(q_f, \mathbf{x}_f, q'_f, \mathbf{x}_f; t) \\ &= \int dq_i dq'_i d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}'_i d\mathbf{x}_f K(q_f, \mathbf{x}_f, t; q_i, \mathbf{x}_i, 0) \\ &\quad \times \rho(q_i, \mathbf{x}_i, q'_i, \mathbf{x}'_i; 0) K^*(q'_f, \mathbf{x}_f, t; q'_i, \mathbf{x}'_i, 0)\end{aligned}\quad (2.15)$$

über. Der Ausdruck (2.15) hängt davon ab, wie die Dichtematrix zur Anfangszeit aussieht. Zur Auswertung der Pfadintegrale sei auf die Bücher von Feynman verwiesen [21, 22]. Um die Wahrscheinlichkeit zu erhalten, daß sich das System zu einer Zeit t im Zustand q_f befindet, werden die Diagonalelemente betrachtet:

$$p(q_f; t) = \int \mathcal{D}q(\tau) \int \mathcal{D}q'(\tau') A[q(\tau)] A^*[q'(\tau')] F[q(\tau), q'(\tau')]. \quad (2.16)$$

Wobei das doppelte Pfadintegral alle Wege mit $q(t_0) = q'(t_0) = q_i$ und $q(t) = q'(t) = q_f$ berücksichtigt. Wenn kein Bad vorhanden ist, dann folgt das System einem Pfad $q(\tau)$ und $A[q(\tau)]$ ist die zugehörige Amplitude. Der Einfluß des Bades wird durch das Influenzfunktional $F[q(\tau), q'(\tau')]$ wiedergegeben.

2.2.2 Konkrete Ausführung der Methodik für ein Boson-Bad

Für ein Boson-Bad kann das Influenzfunktional exakt berechnet werden, wie dies z.B. in Ref. [20] ausgeführt ist,

$$\begin{aligned}F[q(\tau), q'(\tau')] &= \\ \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^{\tau} ds [q(\tau) - q'(\tau)] [\gamma(\tau - s)q(s) - \gamma^*(\tau - s)q'(s)]\right].\end{aligned}\quad (2.17)$$

Hierbei ist

$$\gamma(\tau - s) = \sum_{\alpha} \left(\frac{c_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \right) \left(\exp[-i\omega_{\alpha}(\tau - s)] + \frac{2 \cos[\omega_{\alpha}(\tau - s)]}{\exp(\beta\hbar\omega_{\alpha}) - 1} \right). \quad (2.18)$$

Mit der spektralen Dichte (2.9) kann man Gleichung (2.17) als

$$\begin{aligned}F[q(\tau), q'(\tau')] &= \\ \exp\left[-\frac{1}{\pi\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^{\tau} ds \left(L_2(\tau - s)[q(\tau) - q'(\tau)][q(s) - q'(s)] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - iL_1(\tau - s)[q(\tau) - q'(\tau)][q(s) + q'(s)] \right)\right]\end{aligned}\quad (2.19)$$

schreiben. Die Funktionen $L_1(\tau - s)$ und $L_2(\tau - s)$ sind dabei

$$L_1(\tau - s) = \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin[\omega(\tau - s)], \quad (2.20)$$

$$L_2(\tau - s) = \int_0^\infty d\omega J(\omega) \cos[\omega(\tau - s)] \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right). \quad (2.21)$$

Betrachtet man ein Zwei-Niveau-System mit der Tunnelaufspaltung Δ , dann ist es hilfreich, das Pfadintegral als Weg zwischen vier möglichen Zuständen zu betrachten. Diese sind A, B, C und D mit $+, +, -, -$ und $-, +, -, -$. Dabei bezieht sich das erste Zeichen auf den q -Pfad und das zweite auf den q' -Pfad. Die Minima eines Doppelmuldenpotentials sind an den Positionen $\pm\frac{1}{2}q_0$. Man kann eine symmetrische und eine antisymmetrische Koordinate $\zeta(\tau)$ und $\chi(\tau)$ einführen,

$$\zeta(\tau) = q_0^{-1}[q(\tau) - q'(\tau)], \quad (2.22)$$

$$\chi(\tau) = q_0^{-1}[q(\tau) + q'(\tau)]. \quad (2.23)$$

Die Darstellung (2.22) und (2.23) für die antisymmetrische und symmetrische Variable liefert eine gute Kompaktheit. Ist $\chi(\tau) = \pm 1$, so spricht man von einem Sojourn. Das Zwei-Zustands-System ist dabei in einem Diagonal-Zustand. Dies entspricht dem Zustand A und D . In dieser Zeit ist $\zeta(\tau) = 0$. Ist $\zeta(\tau) = \pm 1$, so spricht man von einem Blip. Das Zwei-Zustands-System ist dann in einem Nicht-Diagonal-Zustand. Dies entspricht dem Zustand B und C . In dieser Zeit ist $\chi(\tau) = 0$. Mit den Darstellungen (2.22) und (2.23) wird Gleichung (2.19) zu

$$F[\zeta(\tau), \chi(\tau')] = \exp\left[-\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^\tau ds \left(L_2(\tau - s)\zeta(\tau)\zeta(s) - iL_1(\tau - s)\zeta(\tau)\chi(s) \right)\right]. \quad (2.24)$$

Der erste Summand in Gl. (2.24) ist die Blip-Blip-Wechselwirkung, der zweite Summand ist die Sojourn-Blip-Wechselwirkung. Man sieht hier gut, daß Nicht-Diagonal-Elemente das Gewicht des entsprechenden Pfades unterdrücken. Jetzt werden noch die Amplituden $A[q(\tau)]$ berücksichtigt. Hier wird ein System ohne Bias betrachtet. Die Amplitude, in einem Zustand zu bleiben, ist 1. Die Amplitude, den Zustand zu wechseln, ist $i\frac{1}{2}\Delta dt$. Finden also $2n$ Übergänge statt, dann ergibt sich für die entsprechende Amplitude: $(-1)^n(\frac{\Delta}{2})^{2n}$. Damit kann man eine Serien-Darstellung der Wahrscheinlichkeit

$$p(t) = 1 + \frac{1}{2}(-1)^n \Delta^{2n} K_n(t) \quad (2.25)$$

mit

$$K_n(t) = 2^{-(2n-1)} \sum_{(\zeta_j, \eta_j)} \int_0^t dt_{2n} \int_0^{t_{2n}} dt_{2n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 \tilde{F}_n(t_1, t_2, \dots, t_{2n} : \zeta_1, \zeta_2 \dots \zeta_n : \eta_1, \eta_2 \dots \eta_{n-1}) \quad (2.26)$$

angeben. Den Orts-Erwartungswert drückt man über die Wahrscheinlichkeit, das System am Ort $+\frac{1}{2}q_0$ zu finden, aus. Diese ist $p(t)$. Mit obiger Serien-Darstellung bekommt man dann

$$P(t) \equiv \langle \sigma_z(t) \rangle = 2p(t) - 1 \quad (2.27)$$

$$\implies P(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \Delta^{2n} K_n(t) . \quad (2.28)$$

Die antisymmetrische und symmetrische Variable $\zeta(\tau)$ und $\chi(\tau)$ lassen sich als

$$\zeta(\tau) = \sum_{j=1}^n \zeta_j [\theta(\tau - t_{2j-1}) - \theta(\tau - t_{2j})] , \quad (2.29)$$

$$\chi(\tau) = \sum_{j=0}^n \eta_j [\theta(\tau - t_{2j}) - \theta(\tau - t_{2j+1})] \quad (2.30)$$

darstellen. Für die Integration von Gl. (2.24) werden die Funktionen $\tilde{Q}_1(t)$ und $\tilde{Q}_2(t)$ mit

$$\tilde{Q}_1(t) = \int_0^{\infty} \frac{J(\omega)}{\omega^2} \sin(\omega t) d\omega , \quad (2.31)$$

$$\tilde{Q}_2(t) = \int_0^{\infty} \frac{J(\omega)}{\omega^2} (1 - \cos(\omega t)) \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) d\omega \quad (2.32)$$

eingeführt. Der erste Summand in Gl. (2.24), also die Blip-Blip-Wechselwirkung, produziert den Faktor

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \left[\sum_j \tilde{Q}_2(t_{2j} - t_{2j-1}) \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{j>k} \zeta_j \zeta_k [\tilde{Q}_2(t_{2j} - t_{2k-1}) + \tilde{Q}_2(t_{2j-1} - t_{2k}) \right. \right. \\ \left. \left. - \tilde{Q}_2(t_{2j} - t_{2k}) - \tilde{Q}_2(t_{2j-1} - t_{2k-1})] \right] \right) . \end{aligned} \quad (2.33)$$

Der zweite Summand in Gl. (2.24), also die Sojourn-Blip-Wechselwirkung, liefert den Faktor

$$\exp\left(i\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \left[\sum_{k=0}^{n-1} \sum_{j=k+1}^n \eta_k \zeta_j X_{jk} \right] \right) . \quad (2.34)$$

Dabei ist

$$X_{jk} = \tilde{Q}_1(t_{2j} - t_{2k+1}) + \tilde{Q}_1(t_{2j-1} - t_{2k}) - \tilde{Q}_1(t_{2j} - t_{2k}) - \tilde{Q}_1(t_{2j-1} - t_{2k+1}) . \quad (2.35)$$

Die η -Summe (d.h. die Summation über die möglichen Werte ± 1 der η_k [$k = 1, 2, \dots, n-1$] des Ausdrucks (2.34)) kann zu Produkten von Cosinus-Funktionen

$$2^{n-1} \prod_{k=1}^{n-1} \cos\left(\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \sum_{j=k+1}^n \zeta_j X_{jk}\right) \quad (2.36)$$

zusammengefaßt werden. Man erhält dann die Gleichungen

$$\begin{aligned} P(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \Delta^{2n} K_n(t), \\ K_n(t) &= 2^{-n} \sum_{(\zeta_j)} \int_0^t dt_{2n} \int_0^{t_{2n}} dt_{2n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 \tilde{F}_n(t_1, t_2, \dots, t_{2n} : \zeta_1, \zeta_2 \dots \zeta_n), \\ F_n(t_m, \zeta_i) &= F_1(t_m) F_2(t_m, \zeta_i) F_3(t_m, \zeta_i) F_4(t_m, \zeta_i). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Die Faktoren F_1 - F_4 sind durch die folgenden Ausdrücke definiert

$$F_1 = \exp\left(-\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \sum_{j=1}^n S_j\right), \quad (2.38)$$

$$F_2 = \exp\left(-\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \sum_{k=1}^n \sum_{j=k+1}^n \zeta_j \zeta_k \Lambda_{jk}\right), \quad (2.39)$$

$$F_3 = \prod_{k=1}^{n-1} \cos\left(\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \sum_{j=k+1}^n \zeta_j X_{jk}\right), \quad (2.40)$$

$$F_4 = \cos\left(\sum_{j=1}^n \frac{q_0^2}{\pi\hbar} \zeta_j X_{j0}\right). \quad (2.41)$$

Hierbei sind

$$S_j = \tilde{Q}_2(t_{2j} - t_{2j-1}), \quad (2.42)$$

$$\Lambda_{jk} = \tilde{Q}_2(t_{2j} - t_{2k-1}) + \tilde{Q}_2(t_{2j-1} - t_{2k}) - \tilde{Q}_2(t_{2j} - t_{2k}) - \tilde{Q}_2(t_{2j-1} - t_{2k-1}), \quad (2.43)$$

$$X_{jk} = \tilde{Q}_1(t_{2j} - t_{2k+1}) + \tilde{Q}_1(t_{2j-1} - t_{2k}) - \tilde{Q}_1(t_{2j} - t_{2k}) - \tilde{Q}_1(t_{2j-1} - t_{2k+1}). \quad (2.44)$$

2.2.3 Noninteracting-Blip Approximation (NIBA)

Da die Ausdrücke in dieser Form jedoch schwer zu behandeln sind, behilft man sich mit der Noninteracting-Blip Approximation (NIBA). In dieser Näherung wird jeweils nur die Wechselwirkung zwischen Sojourn und dem nächsten Blip in den Ausdrücken (2.40) und (2.41) und die Intrablip-Wechselwirkung (2.38) betrachtet. Die Wechselwirkung zwischen den Blips untereinander wird komplett vernachlässigt. Die Begründung dieser Einschränkung der allgemeinen Formel liegt nun in

der Annahme, daß die Sojourns sehr lang und die Blips extrem kurz sind. Lange Blips würden den entsprechenden Pfad zu stark unterdrücken. Diese Annahme wurde von Leggett et al. in Ref. [23] für das Boson-Bad in verschiedenen Grenzfällen gerechtfertigt. Die dortigen Argumente gelten ebenso und zum Teil noch stärker für das Spin-Bad. Die obige Annahme hat nun zur Konsequenz, daß in den Ausdrücken (2.40) und (2.41) alle Faktoren X_{jk} für $k \neq j-1$ gleich Null gesetzt werden und $X_{j,j-1}$ zu $Q_1(t_{2j} - t_{2j-1})$ wird. Außerdem werden alle Faktoren Λ_{jk} gleich Null gesetzt. Setzt man nun die Noninteracting-Blip Approximation konsequent um, so erhält man

$$F_n(t_1 \dots t_{2n}) = \prod_{j=1}^n \cos\left(\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \tilde{Q}_1(t_{2j} - t_{2j-1})\right) \exp\left(-\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \tilde{Q}_2(t_{2j} - t_{2j-1})\right). \quad (2.45)$$

Der Ausdruck für $P(t)$ wird dann zu

$$P(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^t dt_{2n} \int_0^{t_{2n}} dt_{2n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 \prod_{j=1}^n \Sigma(t_{2j} - t_{2j-1}) \quad (2.46)$$

mit der Selbstenergie

$$\Sigma(t) = \Delta^2 \cos\left(\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \tilde{Q}_1(t)\right) \exp\left(-\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \tilde{Q}_2(t)\right). \quad (2.47)$$

Geht man zur Laplace-Transformierten von Gleichung (2.46) über, so bekommt man einen kompakten Ausdruck, der z.B. in Kapitel 4 benutzt wird. Die Laplace-Transformierte ist

$$P(\lambda) = \int_0^{\infty} e^{-\lambda t} P(t) dt. \quad (2.48)$$

Dies führt auf

$$\begin{aligned} P(\lambda) &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\infty} dt \int_0^{\infty} dt_1 \dots \int_0^{\infty} dt_{2n} e^{-\lambda(t_1+t_2+\dots+t_{2n})} \prod_{j=1}^n \Sigma(t_{2j}) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{[\Sigma(\lambda)]^n}{\lambda^{n+1}} \\ &= \frac{1}{\lambda + \Sigma(\lambda)} \end{aligned} \quad (2.49)$$

mit

$$\Sigma(\lambda) = \Delta^2 \int_0^{\infty} d\tau e^{-\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \tilde{Q}_2(\tau)} e^{-\lambda\tau} \cos\left(\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \tilde{Q}_1(\tau)\right). \quad (2.50)$$

Mit den Bezeichnungen $Q_1(\tau)$ und $Q_2(\tau)$, die als

$$Q_1(\tau) = \frac{q_0^2}{\pi\hbar} \tilde{Q}_1(\tau), \quad (2.51)$$

$$Q_2(\tau) = \frac{q_0^2}{\pi\hbar} \tilde{Q}_2(\tau) \quad (2.52)$$

definiert sind, ergibt sich

$$\Sigma(\lambda) = \Delta^2 \int_0^\infty d\tau e^{-Q_2(\tau)} e^{-\lambda\tau} \cos(Q_1(\tau)) . \quad (2.53)$$

Bezüglich weitergehender Ausführungen sei auf Ref. [23] und [24] verwiesen.

Kapitel 3

Redfield-Methode

In diesem Kapitel wird die Redfield-Methode dargestellt. Die Redfield-Methode beruht auf einem störungstheoretischen Ansatz. Im Bereich der schwachen Bad-Ankopplung liefert diese Methode sehr gute Resultate für die Systemdynamik, während sie in anderen Parameter-Bereichen schlechter geeignet ist. Dies liegt daran, daß die Born-Serie in der zweiten Ordnung der Wechselwirkung abgeschnitten wird. Weitere Approximationen, die nicht so restriktiv sind, gehen in den hier gewählten methodischen Ansatz ein, z.B. die Markov-Annahme.

3.1 Zeit-Entwicklung der reduzierten Dichtematrix

Man hat den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{V}_{SB} , \quad (3.1)$$

der aus dem System-Anteil \hat{H}_S , dem Badanteil \hat{H}_B und dem Wechselwirkungsterm \hat{V}_{SB} besteht. Setzt man $\hat{H}_0 = \hat{H}_S + \hat{H}_B$, so lautet der Operator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{SB} . \quad (3.2)$$

Der Wechselwirkungs-Operator im Hamiltonian (3.1) bzw. (3.2) läßt sich darstellen als

$$\hat{V}_{SB} = \sum_k \hat{Q}_k(s_1, \dots, s_N) \hat{F}_k(b_1, \dots, b_M) . \quad (3.3)$$

Dabei sind \hat{Q}_k System- und \hat{F}_k Badoperatoren. Meistens ist der Operator (3.3) bilinear in System- und Badkoordinaten, also

$$\hat{Q}(s_i) \hat{F}(b_i) = \sum_{ij} \lambda_{ij} s_i b_j . \quad (3.4)$$

3.1.1 Zeit-Entwicklung im Wechselwirkungsbild

Das Wechselwirkungsbild wird hier durch den hochgestellten Index I dargestellt. Der Operator (3.2) lautet dann im Wechselwirkungsbild

$$\hat{H}^I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \left(\hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{SB}}(t) \right) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad (3.5)$$

bzw.

$$\hat{H}^I(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{SB}}^I(t) . \quad (3.6)$$

Mit

$$\begin{aligned} \hat{Q}_k^I(t) &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{Q}_k(\{s_i\}) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \\ &= e^{i\hat{H}_S t/\hbar} \hat{Q}_k e^{-i\hat{H}_S t/\hbar} \end{aligned} \quad (3.7)$$

und

$$\hat{F}_k^I(t) = e^{i\hat{H}_B t/\hbar} \hat{F}_k e^{-i\hat{H}_B t/\hbar} \quad (3.8)$$

erhält man

$$\hat{V}_{\text{SB}}^I(t) = \sum_k \hat{Q}_k^I(t) \hat{F}_k^I(t) . \quad (3.9)$$

Die Matrix-Elemente sind

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{F}_k^I(t) | \alpha' \rangle &= \langle \alpha | e^{i\hat{H}_B t/\hbar} \hat{F}_k e^{-i\hat{H}_B t/\hbar} | \alpha' \rangle \\ &= e^{i(\epsilon_\alpha - \epsilon_{\alpha'})t/\hbar} \langle \alpha | \hat{F}_k | \alpha' \rangle \end{aligned} \quad (3.10)$$

und

$$\langle m | \hat{Q}_k^I(t) | m' \rangle = e^{i(\epsilon_m - \epsilon_{m'})t/\hbar} \langle m | \hat{Q}_k | m' \rangle . \quad (3.11)$$

Dabei sind $|\alpha\rangle$ die Eigenzustände von \hat{H}_B und $|m\rangle$ die Eigenzustände von \hat{H}_S .

3.1.2 Liouville-von-Neumann-Gleichung im Wechselwirkungsbild

Im Schrödinger-Bild gilt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] . \quad (3.12)$$

Im Wechselwirkungsbild lautet dies

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}^I &= [\hat{H}^I, \hat{\rho}^I] \\ &= [\hat{H}_0, \hat{\rho}^I] + [\hat{V}_{\text{SB}}^I(t), \hat{\rho}^I(t)] . \end{aligned} \quad (3.13)$$

Weil

$$[\hat{H}_0, \hat{\rho}^I] = \hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{\rho} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} - e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{\rho} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{H}_0 = 0 \quad (3.14)$$

folgt für Gl. (3.13)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}^I = [\hat{V}_{\text{SB}}^I(t), \hat{\rho}^I(t)] . \quad (3.15)$$

Die integrale Form von Gl. (3.15) ist

$$\hat{\rho}^I(t) = \hat{\rho}^I(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t [\hat{V}_{\text{SB}}^I(\tau), \hat{\rho}^I(\tau)] d\tau . \quad (3.16)$$

Gleichung (3.16) in (3.15) eingesetzt ergibt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}^I(t) = & - \frac{i}{\hbar} [\hat{V}_{\text{SB}}^I(t), \hat{\rho}^I(0)] \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' [\hat{V}_{\text{SB}}^I(t), [\hat{V}_{\text{SB}}^I(t'), \hat{\rho}^I(t')]] . \end{aligned} \quad (3.17)$$

Die reduzierte Dichtematrix im Wechselwirkungsbild lautet

$$\hat{\rho}_{\text{S}}^I(t) = \text{Tr}_{\text{B}}[\hat{\rho}^I(t)] = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \hat{\rho}^I(t) | \alpha \rangle . \quad (3.18)$$

Dabei sind $|\alpha\rangle$ die Eigenzustände von \hat{H}_{B} .

Die Zeit-Entwicklung der reduzierten Dichtematrix lautet also mit Gl. (3.17)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_{\text{S}}^I(t) = & \text{Tr}_{\text{B}} \left\{ - \frac{i}{\hbar} [\hat{V}_{\text{SB}}^I(t), \hat{\rho}^I(0)] \right\} \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \text{Tr}_{\text{B}} \left\{ [\hat{V}_{\text{SB}}^I(t), [\hat{V}_{\text{SB}}^I(t'), \hat{\rho}^I(t')]] \right\} . \end{aligned} \quad (3.19)$$

Der zweite Summand von Gleichung (3.19) beinhaltet die Gedächtnis-Effekte. Gleichung (3.19) ist nicht geschlossen und nicht-lokal in der Zeit. Um geschlossene Gleichungen zu erhalten, die lokal in der Zeit sind, werden einige Approximationen notwendig.

3.2 Markov-Annahme

In der Bad-Approximation wird gefordert, daß zu keiner Zeit eine Korrelation zwischen System und Bad besteht,

$$\hat{\rho}^I(t) = \hat{\rho}_{\text{S}}^I(t) \hat{\rho}_{\text{B}}^I(t) . \quad (3.20)$$

Mit der Fano-Bedingung $M \gg N$ (siehe Gl. (3.3)) bleibt das Bad für alle Zeiten im thermischen Gleichgewicht

$$\hat{\rho}_{\text{B}}^I(t) = \hat{\rho}_{\text{B}}(0) = e^{-\frac{\hat{H}_{\text{B}}}{k_{\text{B}}T}} / \text{Tr} \left\{ e^{-\frac{\hat{H}_{\text{B}}}{k_{\text{B}}T}} \right\} . \quad (3.21)$$

Setzt man Gl. (3.20) in die Entwicklung (3.19) ein, dann erhält man mit dem Operator (3.9) für den ersten Term der Entwicklung (3.19)

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}_B \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{V}_{\mathrm{SB}}^I(t), \hat{\rho}^I(0) \right] \right\} &= -\frac{i}{\hbar} \mathrm{Tr}_B \left\{ \left[\sum_k \hat{Q}_k^I(t) \hat{F}_k^I(t), \hat{\rho}_S^I(0) \hat{\rho}_B(0) \right] \right\} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_k \left(\left[\hat{Q}_k^I(t), \hat{\rho}_S^I(0) \right] \mathrm{Tr}_B \left\{ \hat{F}_k^I(t) \hat{\rho}_B(0) \right\} \right) \end{aligned} \quad (3.22)$$

und für den zweiten Term der Entwicklung (3.19)

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \mathrm{Tr}_B \left\{ \left[\hat{V}_{\mathrm{SB}}^I(t), \left[V_{\mathrm{SB}}^I(t'), \hat{\rho}^I(t') \right] \right] \right\} \\ = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{k,l} \int_0^t dt' \left(\left[\hat{Q}_k^I(t), \hat{Q}_l^I(t') \hat{\rho}_S^I(t') \right] G_{kl}(t, t') \right. \\ \left. - \left[\hat{Q}_k^I(t), \hat{\rho}_S^I(t') \hat{Q}_l^I(t') \right] G_{lk}(t', t) \right). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Dabei ist die Zwei-Zeiten-Korrelationsfunktion gegeben als

$$\begin{aligned} G_{kl}(t, t') &:= \mathrm{Tr}_B \left\{ \hat{F}_k^I(t) \hat{F}_l^I(t') \hat{\rho}_B(0) \right\}, \\ G_{lk}(t', t) &:= \mathrm{Tr}_B \left\{ \hat{F}_l^I(t') \hat{F}_k^I(t) \hat{\rho}_B(0) \right\}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Gleichung (3.22) ist dabei identisch Null. Führt man die Variable $\tau = t - t'$ ein, so lautet Gleichung (3.19)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S^I(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{k,l} \int_0^t d\tau \left(\left[\hat{Q}_k^I(t), \hat{Q}_l^I(t - \tau) \hat{\rho}_S^I(t - \tau) \right] G_{kl}(\tau) \right. \\ &\quad \left. - \left[\hat{Q}_k^I(t), \hat{\rho}_S^I(t - \tau) \hat{Q}_l^I(t - \tau) \right] G_{lk}(-\tau) \right). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Dabei gilt

$$\begin{aligned} G_{kl}(\tau) &:= \mathrm{Tr}_B \left\{ \hat{F}_k^I(\tau) \hat{F}_l^I(0) \hat{\rho}_B(0) \right\}, \\ G_{lk}(-\tau) &:= \mathrm{Tr}_B \left\{ \hat{F}_l^I(0) \hat{F}_k^I(\tau) \hat{\rho}_B(0) \right\}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Außerdem ist

$$\hat{F}_l^I(0) = \hat{F}_l(0) = \hat{F}_l. \quad (3.27)$$

Die Markov-Bedingung und die Markov-Approximation sind

$$\hat{\rho}_S^I(t - \tau) \approx \hat{\rho}_S^I(t) \quad (\text{für } \tau \ll \tau_c) \quad (3.28)$$

und

$$G_{kl}(\tau), G_{lk}(-\tau) \approx 0 \quad (\text{für } \tau \gg \tau_c) . \quad (3.29)$$

Dabei ist τ_c die Korrelationszeit. Die reduzierte Dichtematrix lautet in der System-Eigenbasis

$$\begin{aligned} \langle m | \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_S^I | n \rangle = & -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{k,l} \int_0^t d\tau \left(M_{mn}^{(1)}(k, l, t, \tau) G_{kl}(\tau) \right. \\ & \left. - M_{mn}^{(2)}(k, l, t, \tau) G_{lk}(-\tau) \right) , \end{aligned} \quad (3.30)$$

wobei

$$\begin{aligned} M_{mn}^{(1)}(k, l, t, \tau) &= \langle m | [\hat{Q}_k^I(t), \hat{Q}_l^I(t-\tau) \hat{\rho}_S^I(t-\tau)] | n \rangle , \\ M_{mn}^{(2)}(k, l, t, \tau) &= \langle m | [\hat{Q}_k^I(t), \hat{\rho}_S^I(t-\tau) \hat{Q}_l^I(t-\tau)] | n \rangle . \end{aligned} \quad (3.31)$$

Mit Gleichung (3.28) und (3.11) folgt

$$\begin{aligned} M_{mn}^{(1)}(k, l, t, \tau) &= \langle m | \hat{Q}_k^I(t) \hat{Q}_l^I(t-\tau) \hat{\rho}_S^I(t) | n \rangle \\ &\quad - \langle m | \hat{Q}_l^I(t-\tau) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{Q}_k^I(t) | n \rangle \\ &= \sum_{o,p} \langle m | \hat{Q}_k^I(t) | o \rangle \langle o | \hat{Q}_l^I(t-\tau) | p \rangle \langle p | \hat{\rho}_S^I(t) | n \rangle \\ &\quad - \sum_{o,p} \langle m | \hat{Q}_l^I(t-\tau) | o \rangle \langle o | \hat{\rho}_S^I(t) | p \rangle \langle p | \hat{Q}_k^I(t) | n \rangle \\ &= \sum_{o,p} e^{i(\epsilon_m - \epsilon_o)t/\hbar} e^{i(\epsilon_o - \epsilon_p)(t-\tau)/\hbar} \\ &\quad \langle m | \hat{Q}_k^I | o \rangle \langle o | \hat{Q}_l^I | p \rangle \langle p | \hat{\rho}_S^I(t) | n \rangle \\ &\quad - \sum_{o,p} e^{i(\epsilon_p - \epsilon_n)t/\hbar} e^{i(\epsilon_m - \epsilon_o)(t-\tau)/\hbar} \\ &\quad \langle p | \hat{Q}_k^I | n \rangle \langle m | \hat{Q}_l^I | o \rangle \langle o | \hat{\rho}_S^I(t) | p \rangle . \end{aligned} \quad (3.32)$$

Mit den Bezeichnungen

$$\omega_{ij} := \frac{\epsilon_i - \epsilon_j}{\hbar} , \quad (3.33)$$

$$\rho_{s,ij}^I := \langle i | \hat{\rho}_S^I(t) | j \rangle \quad (3.34)$$

und

$$Q_{k,ij} := \langle i | \hat{Q}_k | j \rangle \quad (3.35)$$

erhält man

$$\begin{aligned} M_{mn}^{(1)}(k, l, t, \tau) &= \sum_{o,p} \left\{ e^{i(\omega_{mo} + \omega_{op})t} e^{-i\omega_{op}\tau} Q_{k,mn} Q_{l,op} \rho_{s,pn}^I \right. \\ &\quad \left. - e^{i(\omega_{mo} + \omega_{pn})t} e^{-i\omega_{mo}\tau} Q_{l,mo} Q_{k,pn} \rho_{s,op}^I \right\} \end{aligned} \quad (3.36)$$

und

$$M_{mn}^{(2)}(k, l, t, \tau) = \sum_{o,p} \left\{ e^{i(\omega_{mo} + \omega_{pn})t} e^{-i\omega_{pn}\tau} Q_{k,mo} Q_{l,pn} \rho_{s,op}^I - e^{i(\omega_{op} + \omega_{pn})t} e^{-i\omega_{op}\tau} Q_{l,op} Q_{k,pn} \rho_{s,mo}^I \right\}. \quad (3.37)$$

Die zeitabhängigen Matrizen

$$\begin{aligned} \Gamma_{mnop}^+ &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{k,l} Q_{k,mn} Q_{l,op} \int_0^t e^{-i\omega_{op}\tau} G_{kl}(\tau) d\tau, \\ \Gamma_{mnop}^- &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{k,l} Q_{k,op} Q_{l,mn} \int_0^t e^{-i\omega_{mn}\tau} G_{kl}(-\tau) d\tau \end{aligned} \quad (3.38)$$

können mit der Bedingung (3.29) in der Form

$$\begin{aligned} \Gamma_{mnop}^+ &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{k,l} Q_{k,mn} Q_{l,op} \int_0^\infty e^{-i\omega_{op}\tau} G_{kl}(\tau) d\tau, \\ \Gamma_{mnop}^- &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{k,l} Q_{k,op} Q_{l,mn} \int_0^\infty e^{-i\omega_{mn}\tau} G_{kl}(-\tau) d\tau \end{aligned} \quad (3.39)$$

dargestellt werden.

3.3 Die Redfield-Gleichungen

Gleichung (3.25) kann mit (3.39) in die Form

$$\dot{\rho}_{s,mn}^I(t) = \sum_{o,p} R_{mnop}(t) \rho_{s,op}^I(t) \quad (3.40)$$

gebracht werden. Hierbei ist $R(t)$ die Relaxations-Matrix,

$$R_{mnop}(t) := \left(- \sum_q \delta_{nq} \Gamma_{mqo}^+ + \Gamma_{pnm}^+ + \Gamma_{pno}^- - \sum_q \delta_{mo} \Gamma_{pqn}^- \right) e^{i(\omega_{nm} - \omega_{op})t}. \quad (3.41)$$

Die Gleichungen (3.40) werden als Redfield-Gleichungen und der Ausdruck (3.41) als Redfield-Tensor bezeichnet.

In der Gleichung (3.40) handelt es sich für $m = n$ um die Populationen und für $m \neq n$ um die Kohärenzen. Die zeitliche Änderung der Populationen ist

$$\dot{\rho}_{s,mm}^I(t) = \sum_{o,p} R_{mmop}(t) \rho_{s,op}^I(t), \quad (3.42)$$

das kann man auch als

$$\dot{\rho}_{s,mm}^I(t) = \sum_o R_{mmoo}(t) \rho_{s,oo}^I(t) + \sum_o \sum_{p \neq o} R_{mmop}(t) \rho_{s,op}^I(t) \quad (3.43)$$

darstellen. Die Populationen werden im ersten Summanden von Gl. (3.43) durch die Population-Population-Terme R_{mmoo} und im zweiten Summand von Gl. (3.43) durch die Kohärenz-Population-Terme R_{mmop} verändert. Die zeitliche Änderung der Kohärenzen ist

$$\dot{\rho}_{s,mn}^I(t) = \sum_o R_{mnoo}(t) \rho_{s,oo}^I(t) + \sum_o \sum_{p \neq o} R_{mnop}(t) \rho_{s,op}^I(t). \quad (3.44)$$

Sie werden im ersten Summanden von Gl. (3.44) durch die Population-Kohärenz-Terme R_{mnoo} und im zweiten Summand von Gl. (3.44) durch die Kohärenz-Kohärenz-Terme R_{mnop} verändert.

3.3.1 Die Säkular-Approximation

Wenn man in Gl. (3.40) nur die Terme behält, für die

$$\omega_{mn} - \omega_{op} = \frac{\epsilon_m - \epsilon_n - \epsilon_o + \epsilon_p}{\hbar} = 0 \quad (3.45)$$

gilt, dann wird der Redfield-Tensor zeitunabhängig

$$R_{mnop} = - \sum_q \left(\delta_{np} \Gamma_{mqo}^+ + \delta_{mo} \Gamma_{pqn}^- \right) + \Gamma_{pnmo}^+ + \Gamma_{pnmo}^- . \quad (3.46)$$

Die Forderung (3.45) kann in folgenden Fällen erfüllt werden:

1. $m = n = o = p$:

$$R_{mmmm} = - \sum_q \left(\Gamma_{mqm}^+ + \Gamma_{mqm}^- \right) + \Gamma_{mmmm}^+ + \Gamma_{mmmm}^- =: -\gamma_{mm} \quad (3.47)$$

2. $m = n$; $o = p$; $m \neq p$:

$$R_{mmpm} = \Gamma_{pmmp}^+ + \Gamma_{pmmp}^- =: \omega_{mp} \quad (3.48)$$

3. $m = o$; $n = p$; $m \neq n$:

$$R_{mpmp} = - \sum_q \left(\Gamma_{mqm}^+ + \Gamma_{pqq}^- \right) + \Gamma_{ppmm}^+ + \Gamma_{ppmm}^- =: -\gamma_{mp} \quad (3.49)$$

Mit den Bedingungen (3.47)-(3.49) wird Gleichung (3.40) damit in der Säkular-Approximation zu

$$\dot{\rho}_{s,mn}^I(t) = \delta_{mn} \sum_{p \neq n} \omega_{np} \rho_{s,pp}^I - \gamma_{mn} \rho_{s,mn}^I . \quad (3.50)$$

Kapitel 4

Einzelnes Qubit: Dekohärenz

In diesem Kapitel wird die Dynamik bzw. das Dekohärenzverhalten eines Ein-Qubit-Systems für diejenigen Parameterbereiche angegeben, in denen analytische Ergebnisse erzielt werden können. Die Herleitung erfolgt hier exemplarisch für ein System, das an ein Spin-Bad koppelt. Die Charakteristika, die sich hier für Frequenz und Dämpfung ergeben, sind gleichzeitig ein Teil der Vergleichskriterien, denen die numerischen Ergebnisse für gekoppelte Qubit-Systeme zur Konsistenzprüfung unterworfen werden.

4.1 Influenzkern: Analytische Grenzfälle

Im Folgenden wird die Spin-Dynamik untersucht, die sich ergibt, wenn der Spin bzw. das Qubit mit einem Spin-Bad wechselwirkt. Es wird die NIBA-Methode (siehe Abschnitt 2.2.3) angewandt. Das Influenzfunktional für ein Spin-Bad lautet

$$F[q, \zeta] \approx \exp \left[-\frac{q_0^2}{\pi \hbar} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\sigma \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left(\zeta(\tau)\zeta(\sigma) \cos[\omega(\tau - \sigma)] - i\chi(\sigma)\zeta(\tau) \tanh \frac{\beta \hbar \omega}{2} \sin[\omega(\tau - \sigma)] \right) \right]. \quad (4.1)$$

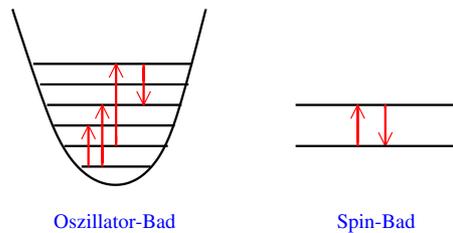


Abbildung 4.1: Oszillator-Bad und Spin-Bad

Die spektrale Dichte wurde hierbei definiert als $J(\omega) = \pi \sum_{\alpha} \frac{J_{\alpha}^2}{\hbar} \delta(\omega - \omega_c)$. Der Influenzkern hängt von den Funktionen $Q_{1s}(t)$ und $Q_{2s}(t)$ ab, die im Falle des Spin-Bads folgende Form besitzen,

$$Q_{1s}(t) = \frac{q_0^2}{\pi \hbar} \int_0^{\infty} \frac{J(\omega)}{\omega^2} \tanh \frac{\beta \hbar \omega}{2} \sin \omega t \, d\omega, \quad (4.2)$$

$$Q_{2s}(t) = \frac{q_0^2}{\pi \hbar} \int_0^{\infty} \frac{J(\omega)}{\omega^2} (1 - \cos \omega t) \, d\omega. \quad (4.3)$$

In der NIBA ergibt sich für die Laplace-Transformierte der Population $P_s(t) = p_{\uparrow}(t) - p_{\downarrow}(t)$ der Ausdruck

$$P_s(\lambda) = \frac{1}{\lambda + \Sigma(\lambda)}. \quad (4.4)$$

Der Index s deutet auf das Spin-Bad hin. Die Selbstenergie ist

$$\Sigma(\lambda) = \Delta^2 \int_0^{\infty} d\tau e^{-Q_{2s}(\tau)} e^{-\lambda \tau} \cos(Q_{1s}(\tau)). \quad (4.5)$$

Nimmt man Ohmsche Reibung an, dann setzt man für die spektrale Dichte

$$J(\omega) = \eta \omega \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c}\right). \quad (4.6)$$

Mit der Definition

$$K = \frac{\eta q_0^2}{2\pi \hbar} \quad (4.7)$$

folgt

$$\Rightarrow Q_{1s}(t) = 2K \int_0^{\infty} \frac{1}{\omega} \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c}\right) \tanh \frac{\beta \hbar \omega}{2} \sin \omega t \, d\omega, \quad (4.8)$$

$$\Rightarrow Q_{2s}(t) = 2K \int_0^{\infty} \frac{1}{\omega} \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c}\right) (1 - \cos \omega t) \, d\omega. \quad (4.9)$$

Die Integration (Integraltablelle [25] 3.551.9) ergibt

$$Q_{1s}(t) = (-i) \left[K \ln \left(\frac{1 - it\omega_c}{1 + it\omega_c} \right) + 2K \ln \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} - \frac{it}{2\beta\hbar}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{1}{2} - \frac{it}{2\beta\hbar}\right)} - 2K \ln \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{it}{2\beta\hbar}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{1}{2} + \frac{it}{2\beta\hbar}\right)} \right], \quad (4.10)$$

$$Q_{2s}(t) = K \ln(1 + \omega_c^2 t^2) \quad (4.11)$$

$$\Rightarrow Q_{1s}(t) = 2K \left[-\arctan(\omega_c t) + i \ln \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{1}{2} - \frac{it}{2\beta\hbar}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{it}{2\beta\hbar}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{1}{2} + \frac{it}{2\beta\hbar}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} - \frac{it}{2\beta\hbar}\right)} \right], \quad (4.12)$$

$$Q_{2s}(t) = K \ln(1 + \omega_c^2 t^2). \quad (4.13)$$

In der Umformung (4.12) wurde die Relation $(-i) \ln\left(\frac{1+i\omega_c t}{1-i\omega_c t}\right) = 2 \arctan(\omega_c t)$ benutzt. Beim Spin-Bad ist Q_{2s} temperaturunabhängig. Es gibt nun Bereiche, in denen die Dynamik analytisch zugänglich ist. In den folgenden Abschnitten soll diese für $T = 0$, für $T \rightarrow 0$ und für $T \rightarrow \infty$ untersucht werden. Gleichzeitig wird $\kappa = \frac{k_B T}{\hbar \omega_c}$ eingeführt.

4.1.1 $T = 0$

Für $T = 0$ folgt aus den Gleichungen (4.2) und (4.3)

$$Q_{1s}(t) = 2K \arctan(\omega_c t), \quad (4.14)$$

$$Q_{2s}(t) = K \ln(1 + \omega_c^2 t^2). \quad (4.15)$$

Für $T = 0$ ergibt sich beim Spin-Bad das gleiche Ergebnis für $Q_1(t)$ und $Q_2(t)$ wie beim Boson-Bad.

4.1.2 $T \rightarrow 0$

Für $T = 0$ folgt mit $\tanh(T = 0) = 1$ das obige Ergebnis

$$\begin{aligned} Q_{1s}(t) &= 2K \int_0^\infty \frac{1}{\omega} \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c}\right) \sin \omega t d\omega \\ &= 2K \arctan(\omega_c t). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Für $T \rightarrow 0$ können wir die Tieftemperaturnäherung

$$\begin{aligned} \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) &= 1 - 2 \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) + 2 \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{k_B T}\right) \\ &\quad - 2 \exp\left(-\frac{3\hbar\omega}{k_B T}\right) + \dots \end{aligned} \quad (4.17)$$

in den Ausdruck (4.8) einsetzen, wir erhalten dann

$$\begin{aligned}
Q_{1s}(t) &= 2K \int_0^\infty \frac{1}{\omega} \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c}\right) \sin \omega t \, d\omega \\
&\quad - 4K \int_0^\infty \frac{1}{\omega} \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c}\right) \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \sin \omega t \, d\omega \\
&\quad + 4K \int_0^\infty \frac{1}{\omega} \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c}\right) \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{k_B T}\right) \sin \omega t \, d\omega - \dots \\
&= 2K \arctan(\omega_c t) - 4K \int_0^\infty \frac{1}{\omega} \exp\left(-\omega\left(\frac{1}{\omega_c} + \frac{\hbar}{k_B T}\right)\right) \sin \omega t \, d\omega \\
&\quad + 4K \int_0^\infty \frac{1}{\omega} \exp\left(-\omega\left(\frac{1}{\omega_c} + \frac{2\hbar}{k_B T}\right)\right) \sin \omega t \, d\omega - \dots \\
&= 2K \arctan(\omega_c t) - 4K \arctan\left(\frac{1}{\frac{1}{\omega_c} + \frac{\hbar}{k_B T}} t\right) + 4K \arctan\left(\frac{1}{\frac{1}{\omega_c} + \frac{2\hbar}{k_B T}} t\right) - \dots
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Im Limes $\hbar\omega_c \gg k_B T$ folgt hieraus

$$\begin{aligned}
\implies Q_{1s}(t) &= 2K \arctan(\omega_c t) - 4K \arctan\left(\frac{k_B T}{\hbar} t\right) + 4K \arctan\left(\frac{k_B T}{2\hbar} t\right) - \dots \\
&= 2K \arctan(\omega_c t) - 4K \frac{k_B T}{\hbar} t + 4K \frac{k_B T}{2\hbar} t - \dots
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Unter Berücksichtigung der Reihenentwicklung von $\ln 2$ erhält man

$$Q_{1s}(t) = 2K \arctan(\omega_c t) - 4(\ln 2)K \frac{k_B T}{\hbar} t. \tag{4.20}$$

Im skaleninvarianten Limes oder Scaling-Limes, d.h. wenn $\omega_c t \gg 1$ ist, reduziert sich dies auf die Form

$$Q_{1s}(t) = K\pi - 4(\ln 2)K \frac{k_B T}{\hbar} t. \tag{4.21}$$

Setzt man schließlich noch $\hbar = k_B = 1$, dann lauten die Funktionen $Q_{1s}(t)$ und $Q_{2s}(t)$:

$$Q_{1s}(t) = K\pi - 4(\ln 2)K T t, \tag{4.22}$$

$$Q_{2s}(t) = K \ln(1 + \omega_c^2 t^2). \tag{4.23}$$

4.1.3 $T \rightarrow \infty$

In diesem Abschnitt wird der Hochtemperatur-Limes $T \rightarrow \infty$ bzw. $\kappa \rightarrow \infty$ untersucht. Für die Gamma-Funktion kann die Stirling-Näherung

$$\Gamma(x) \approx \sqrt{2\pi} e^{-x} x^{x-\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{1}{12x}\right) \quad (4.24)$$

bzw.

$$\begin{aligned} \Gamma\left(x + \frac{1}{2}\right) &\approx \sqrt{2\pi} e^{-(x+\frac{1}{2})} \left(x + \frac{1}{2}\right)^x \left(1 + \frac{1}{12\left(x + \frac{1}{2}\right)}\right) \\ &= \sqrt{2\pi} e^{-(x+\frac{1}{2})} e^{(x \ln[x(1+\frac{1}{2x})])} \left(1 + \frac{1}{12x} - \frac{1}{24x^2} + \dots\right) \\ &= \sqrt{2\pi} e^{-(x+\frac{1}{2})} e^{x \ln x} e^{x \frac{1}{2x}} e^{-x \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2x}\right)^2} \left(1 + \frac{1}{12x} + O\left(\frac{1}{x^2}\right)\right) \\ &= \Gamma(x) \sqrt{x} e^{-\frac{1}{8x}} \left(1 + O\left(\frac{1}{x^2}\right)\right) \end{aligned} \quad (4.25)$$

angewandt werden. Dabei wurde im zweiten Schritt folgende Umformung gemacht

$$\begin{aligned} \frac{1}{12\left(x + \frac{1}{2}\right)} &= \frac{1}{12x} \left(\frac{1}{1 + \frac{1}{2x}}\right) = \frac{1}{12x} \left(1 - \frac{1}{2x} + O\left(\frac{1}{x^2}\right)\right) \\ &= \frac{1}{12x} - \frac{1}{24x^2} + O\left(\frac{1}{x^3}\right). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Im dritten Schritt wurde der \ln linearisiert. Setzt man nun Gl. (4.24) und Gl. (4.25) in Gl. (4.10), so erhält man

$$\begin{aligned} Q_{1s}(t) &= iK \left[\ln\left(\frac{\kappa}{2}(1 + i\omega_c t)\right) - \ln\left(\frac{\kappa}{2}(1 - i\omega_c t)\right) \right. \\ &\quad \left. + 2 \ln \frac{\sqrt{\frac{\kappa}{2}(1 - i\omega_c t)} e^{-\frac{1}{8\frac{\kappa}{2}(1 - i\omega_c t)}}}{\sqrt{\frac{\kappa}{2}(1 + i\omega_c t)} e^{-\frac{1}{8\frac{\kappa}{2}(1 + i\omega_c t)}}} \right] \\ &= 2iK \ln e^{-\frac{1}{4\kappa} \left(\frac{1}{1 - i\omega_c t} - \frac{1}{1 + i\omega_c t}\right)} \\ &= 2iK \ln e^{-\frac{1}{4\kappa} \frac{2i\omega_c t}{1 + \omega_c^2 t^2}} \\ &= K \frac{\omega_c t}{1 + \omega_c^2 t^2} \hbar \omega_c \beta. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Auch hier gilt

$$Q_{2s}(t) = K \ln(1 + \omega_c^2 t^2). \quad (4.28)$$

4.1.4 Überblick

Die Ergebnisse dieses Abschnitts lauten im Überblick:

$\mathbf{T} = \mathbf{0}$:

$$\begin{aligned} Q_{1s}(t) &= 2K \arctan(\omega_c t), \\ Q_{2s}(t) &= K \ln(1 + \omega_c^2 t^2). \end{aligned} \quad (4.29)$$

$\mathbf{T} \rightarrow \mathbf{0}$:

$$\begin{aligned} Q_{1s}(t) &= 2K \arctan(\omega_c t) - 4(\ln 2)K \frac{k_B T}{\hbar} t, \\ Q_{2s}(t) &= K \ln(1 + \omega_c^2 t^2). \end{aligned} \quad (4.30)$$

$\mathbf{T} \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} Q_{1s}(t) &= K \frac{\omega_c t}{1 + \omega_c^2 t^2} \hbar \omega_c \beta, \\ Q_{2s}(t) &= K \ln(1 + \omega_c^2 t^2). \end{aligned} \quad (4.31)$$

4.2 Resultierende Dynamik

Mit den oben abgeleiteten analytischen Ergebnissen für den Influenzkern (in der Hoch- und Tieftemperaturnäherung) kann innerhalb der NIBA die resultierende Dynamik abgeleitet werden. Es sei hier auch auf Ref. [26] verwiesen, dort werden die gleichen Ergebnisse angegeben, die Herleitung ist dort jedoch eine andere. Jetzt wird die inverse Laplace-Transformation

$$P_s(\lambda) = \frac{1}{\lambda + \Sigma(\lambda)} \quad (4.32)$$

berechnet. Diese liefert dann den zeitlichen Verlauf der Wahrscheinlichkeit für den zentralen Spin. Ohne Bias gilt

$$\Sigma(\lambda) = \Delta^2 \int_0^\infty d\tau e^{-Q_{2s}(\tau)} e^{-\lambda\tau} \cos(Q_{1s}(\tau)). \quad (4.33)$$

4.2.1 $T = 0$

Die beiden Funktionen $Q_{1s}(\tau)$ und $Q_{2s}(\tau)$ ergeben sich im Scaling-Limes von Gl. (4.14) und Gl. (4.15) zu

$$Q_{1s}(\tau) = \pi K \operatorname{sgn} \tau, \quad (4.34)$$

$$Q_{2s}(\tau) = 2K \ln(\omega_c \tau). \quad (4.35)$$

Damit lautet die Selbstenergie

$$\Sigma(\lambda) = \frac{\Delta^2}{\omega_c^{2K}} \int d\tau e^{-\lambda\tau} \tau^{-2K} \cos(\pi K) \quad (4.36)$$

$$\Sigma(\lambda) = \Delta_{\text{eff}}^{2-2K} \lambda^{2K-1}. \quad (4.37)$$

Dabei ist

$$\Delta_{\text{eff}} = \Delta_r (\Gamma(1 - 2K) \cos \pi K)^{\frac{1}{2-2K}}. \quad (4.38)$$

Die adiabatisch renormalisierte Tunnelaufspaltung ist

$$\Delta_r = \Delta \left(\frac{\Delta}{\omega_c} \right)^{\frac{K}{1-K}}. \quad (4.39)$$

Es folgt für die Laplace-Transformierte

$$P_s(\lambda) = \frac{1}{\lambda + \Delta_{\text{eff}}^{2-2K} \lambda^{2K-1}}. \quad (4.40)$$

Es gibt letztlich zwei Beiträge zu $P_s(t)$, einen kohärenten Anteil von den Polen, der im Folgenden betrachtet wird, und einen inkohärenten Anteil, der von dem Schnitt entlang der negativen reellen Achse kommt. Der inkohärente Anteil ist für $T = 0$

$$P_{\text{inc}}(t) = -\frac{\sin 2\pi K}{\pi} \int_0^\infty dz \frac{z^{2K-1} e^{-z\Delta_{\text{eff}}t}}{z^2 + 2z^{2K} \cos 2\pi K + z^{4K-2}}. \quad (4.41)$$

Um den kohärenten Beitrag zu berechnen sucht man die Pole auf, also

$$\lambda = -\lambda^{2K-1} \Delta_{\text{eff}}^{2-2K} \quad (4.42)$$

$$\implies \lambda^{2-2K} = -\Delta_{\text{eff}}^{2-2K} \quad (4.43)$$

$$\lambda = e^{\pm \frac{i\pi}{2-2K}} \Delta_{\text{eff}}. \quad (4.44)$$

Indem man die Residuen explizit berechnet, erhält man

$$P(t) = \frac{1}{1-K} \cos(\Omega t) e^{-\gamma t}. \quad (4.45)$$

Dabei ist

$$\Omega = \left(\cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \Delta_{\text{eff}} \quad (4.46)$$

und

$$\gamma = \left(\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \Delta_{\text{eff}}. \quad (4.47)$$

Hier ist einmal exemplarisch die explizite Herleitung von $P(t)$ angegeben. Dabei sind λ_p die Pole.

$$\begin{aligned} P(t) &= \frac{1}{1 + \Delta_{\text{eff}}^{2-2K} (2K-1) \lambda_p^{2K-2}} (e^{\lambda_{p_1} t} + e^{\lambda_{p_2} t}) \\ &= \frac{1}{2-2K} (e^{(e^{\frac{i\pi}{2-2K}}) \Delta_{\text{eff}} t} + e^{(e^{-\frac{i\pi}{2-2K}}) \Delta_{\text{eff}} t}) \\ &= \frac{1}{2-2K} (e^{(\cos(\frac{\pi}{2-2K})) \Delta_{\text{eff}} t + i(\sin(\frac{\pi}{2-2K})) \Delta_{\text{eff}} t} \\ &\quad + e^{(\cos(\frac{\pi}{2-2K})) \Delta_{\text{eff}} t - i(\sin(\frac{\pi}{2-2K})) \Delta_{\text{eff}} t}) \\ &= \frac{2}{2-2K} e^{(\cos(\frac{\pi}{2-2K})) \Delta_{\text{eff}} t} \cos\left(\left(\sin\left(\frac{\pi}{2-2K}\right)\right) \Delta_{\text{eff}} t\right) \\ &= \frac{1}{1-K} e^{-(\sin(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K})) \Delta_{\text{eff}} t} \cos\left(\left(\cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right)\right) \Delta_{\text{eff}} t\right). \end{aligned} \quad (4.48)$$

Hierbei kann nun das Argument der Exponentialfunktion mit der Dämpfung γ (siehe Gl. (4.47)) identifiziert werden. Das Argument der Cosinus-Funktion wird mit der Frequenz identifiziert (siehe Gl. (4.46)).

4.2.2 $T \rightarrow \infty$

In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß beim Spin-Bad für $K < \frac{1}{2}$ kohärente Dynamik auch bei großen Temperaturen zu beobachten ist. Das ist ein deutliches Unterscheidungsmerkmal zum Boson-Bad. Um die Dynamik zu erhalten, setzt man wieder die Funktionen $Q_{1s}(\tau)$ und $Q_{2s}(\tau)$ in die Integraldarstellung (4.33) der Selbstenergie ein. Die beiden Funktionen lauten mit Gl. (4.27) und Gl. (4.28) im Scaling-Limes

$$Q_{1s}(\tau) = K\hbar\beta\frac{1}{\tau} \rightarrow 0 \quad (4.49)$$

und

$$Q_{2s}(\tau) = 2K \ln(\omega_c\tau) . \quad (4.50)$$

Es folgt also

$$\Sigma(\lambda) = \frac{\Delta^2}{\omega_c^{2K}} \int d\tau e^{-\lambda\tau} \tau^{-2K} \quad (4.51)$$

$$= \frac{\Delta^2}{\omega_c^{2K}} \Gamma(1 - 2K) \lambda^{2K-1} \quad (4.52)$$

$$\implies \Sigma(\lambda) = \tilde{\Delta}_{\text{eff}}^{2-2K} \lambda^{2K-1} . \quad (4.53)$$

Dabei ist

$$\tilde{\Delta}_{\text{eff}} = \Delta_r (\Gamma(1 - 2K))^{\frac{1}{2-2K}} . \quad (4.54)$$

Die renormalisierte Tunnelaufspaltung ist hierbei

$$\Delta_r = \Delta \left(\frac{\Delta}{\omega_c} \right)^{\frac{K}{1-K}} . \quad (4.55)$$

Somit erhält man für die Dynamik ein analoges Ergebnis wie im Fall $T = 0$. Es sind jedoch jeweils die effektiven Tunnelaufspaltungen größer, der Faktor $(\cos \pi K)^{\frac{1}{2-2K}}$ fehlt hier. Der Zerfall ist also etwas schneller als bei $T = 0$ und die Oszillationsfrequenz ist etwas erhöht (siehe Abbildung 4.2),

$$P(t) = \frac{1}{1-K} \cos(\tilde{\Omega}t) e^{-\tilde{\gamma}t} . \quad (4.56)$$

Hierbei ergibt sich als Ausdruck für die Frequenz

$$\tilde{\Omega} = \left(\cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \tilde{\Delta}_{\text{eff}} \quad (4.57)$$

und für die Dämpfung

$$\tilde{\gamma} = \left(\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \tilde{\Delta}_{\text{eff}} . \quad (4.58)$$

Dabei ist darauf zu achten, daß sich Δ_{eff} ($T = 0$) und $\tilde{\Delta}_{\text{eff}}$ ($T \rightarrow \infty$) um einen Faktor $(\cos \pi K)^{\frac{1}{2-2K}}$ unterscheiden,

$$\Delta_{\text{eff}} = \tilde{\Delta}_{\text{eff}} (\cos \pi K)^{\frac{1}{2-2K}} . \quad (4.59)$$

Die restlichen analytischen Grenzfälle werden hier nicht abgeleitet, sie werden jedoch im nächsten Abschnitt der Vollständigkeit halber angegeben.

4.2.3 Überblick

In diesem Abschnitt folgt noch ein zusammenfassender Überblick über die Dynamik bzw. das Dekohärenzverhalten eines Spins, der mit einem Spin-Bad wechselwirkt.

T = 0, K < 1/2 :

$$\begin{aligned} P(t) &= \frac{1}{1-K} \cos(\Omega t) e^{-\gamma t} , \\ \Omega &= \left(\cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \Delta_{\text{eff}} , \\ \gamma &= \left(\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \Delta_{\text{eff}} , \\ \Delta_{\text{eff}} &= \Delta_r (\Gamma(1-2K) \cos \pi K)^{\frac{1}{2-2K}} , \\ \Delta_r &= \Delta \left(\frac{\Delta}{\omega_c} \right)^{\frac{K}{1-K}} . \end{aligned}$$

T → 0, K < 1/2 :

$$\begin{aligned} P(t) &= \frac{1}{1-K} \cos(\Omega t) e^{-\gamma t} , \\ \Omega &= \left(\cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \Delta_{\text{eff}} , \\ \gamma &= \left(\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \Delta_{\text{eff}} - 4(\ln 2) \frac{1-2K}{2-2K} \tan(\pi K) K T , \\ \Delta_{\text{eff}} &= \Delta_r (\Gamma(1-2K) \cos \pi K)^{\frac{1}{2-2K}} , \\ \Delta_r &= \Delta \left(\frac{\Delta}{\omega_c} \right)^{\frac{K}{1-K}} . \end{aligned}$$

$\mathbf{T} \rightarrow \infty, \mathbf{K} < 1/2 :$

$$\begin{aligned} P(t) &= \frac{1}{1-K} \cos(\tilde{\Omega}t) e^{-\tilde{\gamma}t} , \\ \tilde{\Omega} &= \left(\cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \tilde{\Delta}_{\text{eff}} , \\ \tilde{\gamma} &= \left(\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \tilde{\Delta}_{\text{eff}} , \\ \tilde{\Delta}_{\text{eff}} &= \Delta_r (\Gamma(1-2K))^{\frac{1}{2-2K}} , \\ \Delta_r &= \Delta \left(\frac{\Delta}{\omega_c}\right)^{\frac{K}{1-K}} . \end{aligned}$$

$\mathbf{T} \rightarrow \infty, \mathbf{K} > 1/2 :$

$$\begin{aligned} P(t) &= \exp(-\gamma t) , \\ \gamma &= \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(K - \frac{1}{2}) \Delta^2}{2 \Gamma(K) \omega_c} . \end{aligned}$$

$\mathbf{T} = 0, \mathbf{K} = 1/2 :$

$$P(t) = \exp\left(-\frac{\pi \Delta^2}{2 \omega_c} t\right) .$$

Für $\mathbf{T} \rightarrow \infty$ und $\mathbf{K} = 1/2$ geht die Dämpfung gegen Unendlich.

4.3 Abbildungen zur Ein-Qubit-Dekohärenz

Die Abbildungen 4.2 bis 4.5 zeigen die Dynamik für ein Spin-Bad und ein Boson-Bad. Die Tunnelaufspaltung ist dabei jeweils zu $\Delta = 1.0$ gesetzt. Die Cutoff-Frequenz des Bades liegt bei $\omega_c = 20.0$. Es ist die Population $P(t) = p_{\uparrow}(t) - p_{\downarrow}(t)$ gegen die Zeit aufgetragen. In den Abbildungen wird das unterschiedliche Dekohärenzverhalten von Boson- und Spin-Bad deutlich. Außerdem ist die oben abgeleitete Frequenzverschiebung (Gleichungen (4.46) bzw. (4.57)) zu sehen. Die Abbildungen wurden mit NIBA- bzw. IBCA-Programmen gewonnen (siehe Ref. [27]), die dazu um Spin-Bäder erweitert wurden.

In den Abbildungen 4.6 und 4.7 erfolgt eine qualitative Abgrenzung zwischen dem kohärenten und dem inkohärenten Bereich der Dynamik.

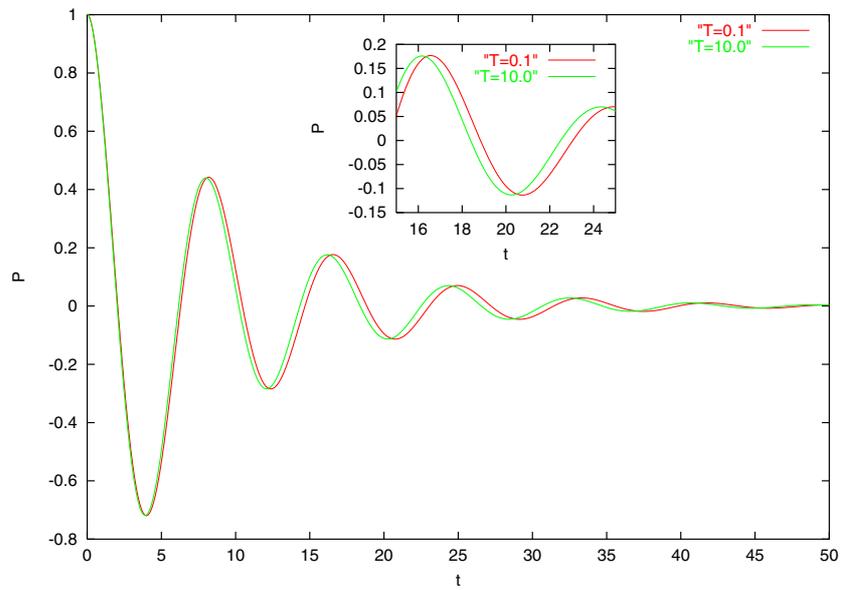


Abbildung 4.2: Dynamik eines Systems, das an ein Spin-Bad koppelt, für unterschiedliche Temperaturen T bei $K = 0.1$.

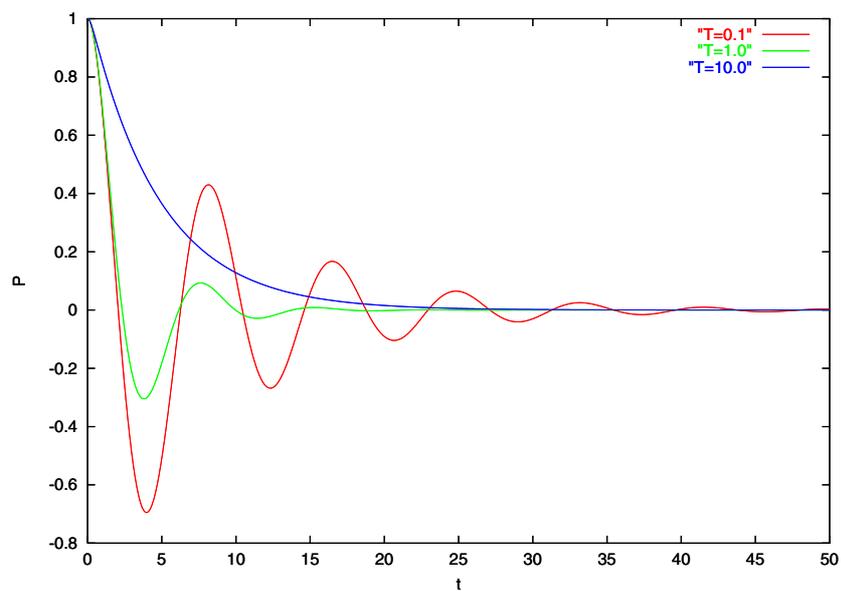


Abbildung 4.3: Dynamik eines Systems, das an ein Boson-Bad koppelt, für unterschiedliche Temperaturen T bei $K = 0.1$.

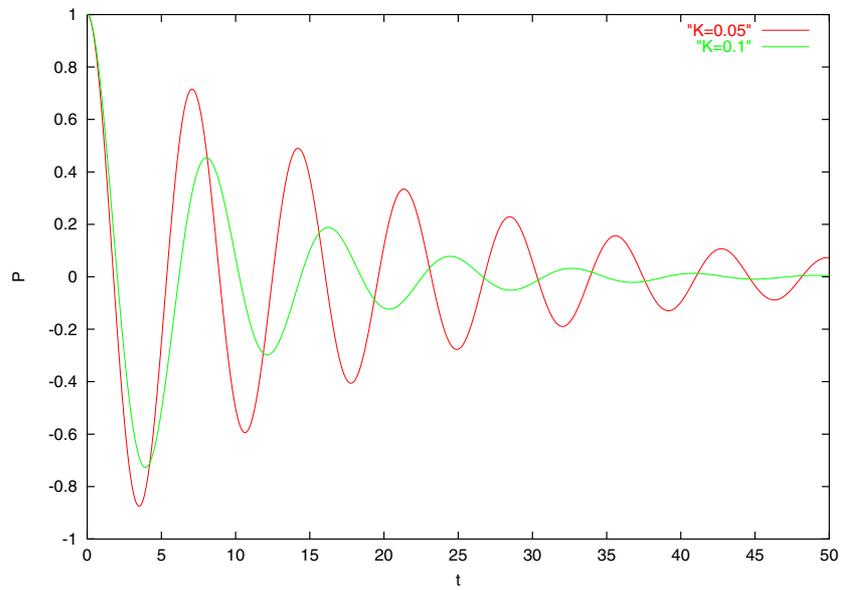


Abbildung 4.4: Dynamik eines Systems, das an ein Spin-Bad koppelt, für unterschiedliche Badankopplungen K bei $T = 1.0$.

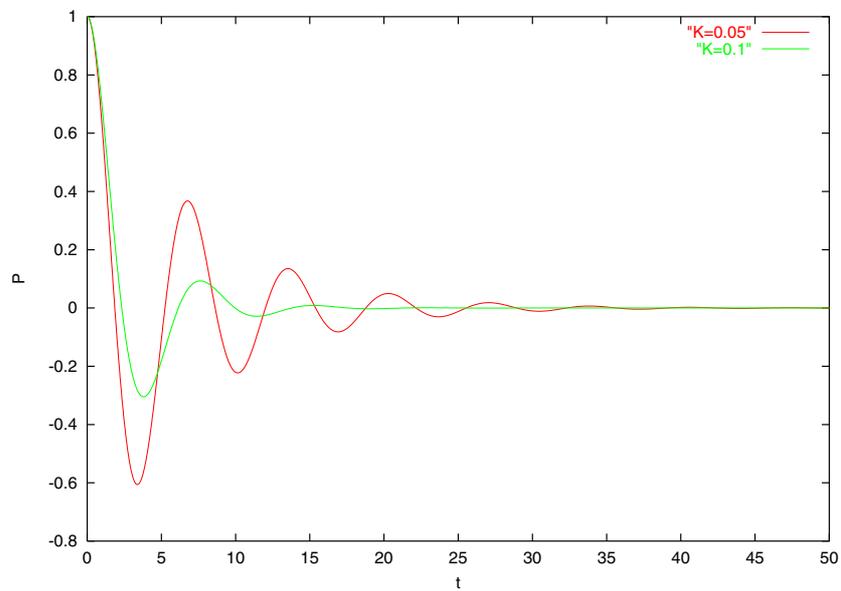


Abbildung 4.5: Dynamik eines Systems, das an ein Boson-Bad koppelt, für unterschiedliche Badankopplungen K bei $T = 1.0$.

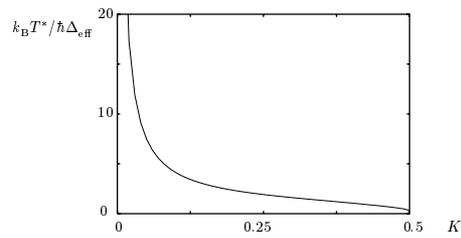


Abbildung 4.6: Kohärenter und inkohärenter Bereich eines Systems, das an ein Boson-Bad koppelt. Für den Ohmschen Fall sind die Bereiche in Abhängigkeit der Badankopplung K und der Temperatur T aufgetragen. Links unten ist der kohärente Bereich.

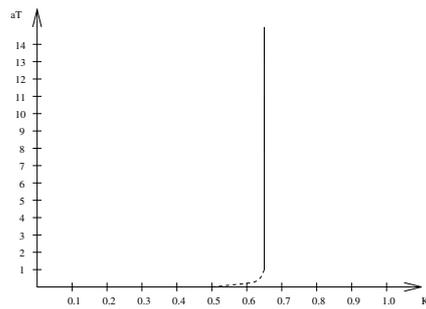


Abbildung 4.7: Kohärenter und inkohärenter Bereich eines Systems, das an ein Spin-Bad koppelt. Für den Ohmschen Fall sind die Bereiche in Abhängigkeit der Badankopplung K und der Temperatur T aufgetragen. Links ist der kohärente Bereich. Dabei ist $a = k_B / \hbar \Delta$.

Kapitel 5

Zwei-Spin-System: Influenzfunktionalmethode

Zunächst wird das an ein Wärmebad gekoppelte Zwei-Qubit-System mit Hilfe der Influenzfunktionalmethode untersucht. Das Wärmebad sorgt für eine Dephasierung des Systems. Diese Situation findet man zum Beispiel vor, wenn man sich mit der experimentellen Realisierung von Gattern (siehe Kapitel 1) beschäftigt. Das System besteht aus zwei Spins bzw. Qubits, die untereinander über den Wechselwirkungs-Parameter J gekoppelt sind (siehe Abbildung 5.1 und 5.2). Die Wechselwirkungsparameter, die die Kopplung an das Bad beschreiben, sind K_1 bzw. K_2 (siehe Abbildungen). In einem Teil des Parameterbereichs konnten von Dube und Stamp analytische Ergebnisse für die System-Dynamik eines Boson-Bads, das wie in Abbildung 5.1 koppelt, gefunden werden [28]. Dies gelang für vergleichsweise starke Wechselwirkung J der Systemspins untereinander. Mit dem im Folgenden beschriebenen Algorithmus, der auf dem Ansatz von Ref. [28] fußt, können Ergebnisse für ein Boson-Bad oder ein Spin-Bad auch für kleine Wechselwirkungsstärken J erzielt werden. Für große Wechselwirkungsstärken J konnte auch beim Spin-Bad ein analytisches Ergebnis gewonnen werden, das im

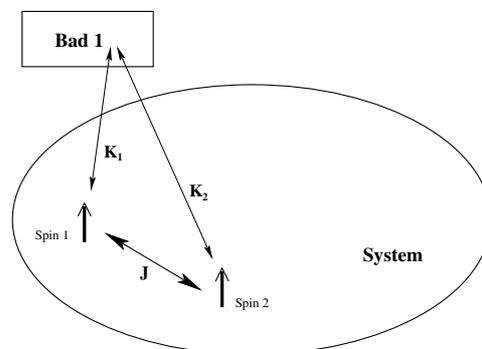


Abbildung 5.1: Zwei Spins wechselwirken untereinander und mit einem Bad

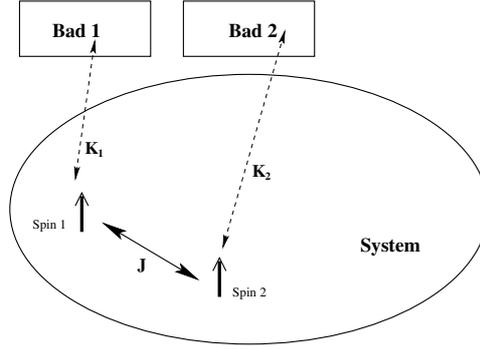


Abbildung 5.2: Zwei Spins wechselwirken untereinander mit jeweils einem Bad

Abschnitt 5.8 angegeben wird. Die beiden System-Spins haben im Folgenden keinen Bias und sie haben beide die gleiche Tunnelaufspaltung. Zuerst wird der Fall betrachtet, in dem die beiden Spins an das gleiche Bad koppeln (Abbildung 5.1).

5.1 Verhalten des Zwei-Spin-Systems ohne Bad

Für einen einzelnen Spin bzw. ein Doppelmuldenpotential mit der Tunnelaufspaltung Δ und dem Bias ϵ lautet der Hamiltonian

$$H = -\frac{1}{2}\Delta\sigma_x + \frac{1}{2}\epsilon\sigma_z . \quad (5.1)$$

Die Eigenwerte und Eigenfunktionen sind dann

$$\begin{aligned} E_1 &= E , \\ \Psi_1 &= \frac{1}{N_1}[(\epsilon + E)|\uparrow\rangle - \Delta|\downarrow\rangle] , \\ E_2 &= -E , \\ \Psi_2 &= \frac{1}{N_2}[(\epsilon - E)|\uparrow\rangle - \Delta|\downarrow\rangle] . \end{aligned} \quad (5.2)$$

Hier ist $E = \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2 + \epsilon^2}$ und die Normierungen sind $N_{1,2} = \sqrt{\Delta^2 + (\epsilon \pm E)^2}$. Beim Zwei-Spin-System, das über eine diagonale Wechselwirkung gekoppelt ist, hat man als Hamiltonian

$$H = -\frac{1}{2}(\Delta_1\sigma_{1x} + \Delta_2\sigma_{2x}) + J_0\sigma_{1z}\sigma_{2z} . \quad (5.3)$$

Dies läßt sich darstellen als

$$H = \begin{pmatrix} J_0 & -\frac{\Delta_2}{2} & -\frac{\Delta_1}{2} & 0 \\ -\frac{\Delta_2}{2} & -J_0 & 0 & -\frac{\Delta_1}{2} \\ -\frac{\Delta_1}{2} & 0 & -J_0 & -\frac{\Delta_2}{2} \\ 0 & -\frac{\Delta_1}{2} & -\frac{\Delta_2}{2} & J_0 \end{pmatrix} . \quad (5.4)$$

Für die Energien bzw. Eigenwerte ergibt sich

$$E^2 = J_0^2 + \frac{1}{4}(\Delta_1 \pm \Delta_2)^2. \quad (5.5)$$

Im Falle gleicher Tunnelaufspaltungen hat man also

$$E_{1,4}^2 = J_0^2 + \Delta^2 \quad (5.6)$$

und

$$E_{2,3}^2 = J_0^2. \quad (5.7)$$

Für die Eigenvektoren gilt dann (energetisch geordnet)

$$\begin{aligned} E_1 &= -\sqrt{J_0^2 + \Delta^2}, \\ \Psi_1 &= N_1 \left(\frac{\Delta}{J_0 + E} |\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + \frac{\Delta}{J_0 + E} |\downarrow\downarrow\rangle \right), \\ E_2 &= -J_0, \\ \Psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \right), \\ E_3 &= J_0, \\ \Psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle \right), \\ E_4 &= \sqrt{J_0^2 + \Delta^2}, \\ \Psi_4 &= N_2 \left(\frac{\Delta}{J_0 - E} |\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + \frac{\Delta}{J_0 - E} |\downarrow\downarrow\rangle \right). \end{aligned} \quad (5.8)$$

Dabei ist $E = \sqrt{J_0^2 + \Delta^2}$ und die Normierungsfaktoren lauten

$$N_1 = \frac{J_0 + E}{\sqrt{2}\sqrt{(J_0 + E)^2 + \Delta^2}} \quad (5.9)$$

und

$$N_2 = \frac{J_0 - E}{\sqrt{2}\sqrt{(J_0 - E)^2 + \Delta^2}}. \quad (5.10)$$

Zum Vergleich sind hier die Eigenwerte und Eigenvektoren für ein Zwei-Spin-System ohne Kopplung angegeben (energetisch geordnet)

$$\begin{aligned}
E_1 &= -\Delta , \\
\Psi_1 &= \frac{1}{2} \left(|\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle \right) , \\
E_2 &= 0 , \\
\Psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \right) , \\
E_3 &= 0 , \\
\Psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle \right) , \\
E_4 &= \Delta , \\
\Psi_4 &= \frac{1}{2} \left(|\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle \right) .
\end{aligned} \tag{5.11}$$

Hat man zwei verschieden große Tunnelaufspaltungen, so ergibt sich für die Eigenwerte und Eigenvektoren

$$\begin{aligned}
E_1 &= -\sqrt{J_0^2 + \frac{1}{4}(\Delta_1 + \Delta_2)^2} , \\
\Psi_1 &= \left(\frac{-E_1 + J_0}{-2E_1} \right)^{1/2} \left(\frac{\Delta_1 + \Delta_2}{2(J_0 - E_1)} |\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + \frac{\Delta_1 + \Delta_2}{2(J_0 - E_1)} |\downarrow\downarrow\rangle \right) , \\
E_2 &= -\sqrt{J_0^2 + \frac{1}{4}(\Delta_1 - \Delta_2)^2} , \\
\Psi_2 &= \left(\frac{-E_2 + J_0}{-2E_2} \right)^{1/2} \left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2(J_0 - E_2)} |\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2(J_0 - E_2)} |\downarrow\downarrow\rangle \right) ,
\end{aligned} \tag{5.12}$$

$$\begin{aligned}
E_3 &= \sqrt{J_0^2 + \frac{1}{4}(\Delta_1 - \Delta_2)^2}, \\
\Psi_3 &= \left(\frac{E_3 - J_0}{2E_3} \right)^{1/2} \left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2(-J_0 + E_3)} |\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2(-J_0 + E_3)} |\downarrow\downarrow\rangle \right), \\
E_4 &= \sqrt{J_0^2 + \frac{1}{4}(\Delta_1 + \Delta_2)^2}, \\
\Psi_4 &= \left(\frac{E_4 - J_0}{2E_4} \right)^{1/2} \left(\frac{\Delta_1 + \Delta_2}{2(-J_0 + E_4)} |\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + \frac{\Delta_1 + \Delta_2}{2(-J_0 + E_4)} |\downarrow\downarrow\rangle \right).
\end{aligned} \tag{5.13}$$

Im Folgenden ist die Dichtematrixdarstellung der freien Propagation sowohl für Kopplungen über σ_x , σ_y als auch über σ_z angegeben.

5.2 Dichtematrixdarstellung der freien Propagation

Die Hamiltonians H_x , H_y und H_z eines ungestörten, gekoppelten Zwei-Qubit-Systems lassen sich in Abhängigkeit der direkten Kopplungen J_x , J_y und J_z darstellen als

$$H_x = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta & -\Delta & J_x \\ -\Delta & 0 & J_x & -\Delta \\ -\Delta & J_x & 0 & -\Delta \\ J_x & -\Delta & -\Delta & 0 \end{pmatrix}, \tag{5.14}$$

$$H_y = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta & -\Delta & -J_y \\ -\Delta & 0 & J_y & -\Delta \\ -\Delta & J_y & 0 & -\Delta \\ -J_y & -\Delta & -\Delta & 0 \end{pmatrix} \tag{5.15}$$

und

$$H_z = \begin{pmatrix} J_z & -\Delta & -\Delta & 0 \\ -\Delta & -J_z & 0 & -\Delta \\ -\Delta & 0 & -J_z & -\Delta \\ 0 & -\Delta & -\Delta & J_z \end{pmatrix}. \tag{5.16}$$

Dabei gilt $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$. Präpariert man das System im Zustand $\uparrow\uparrow$, dann lautet die Dynamik für die σ_x -Kopplung (in diesem Abschnitt entspricht ρ_{11} der Wahrscheinlichkeit $P_{\uparrow\uparrow}$, ρ_{12} entspricht $P_{\uparrow\downarrow}$, ρ_{21} entspricht $P_{\downarrow\uparrow}$ und ρ_{22} entspricht $P_{\downarrow\downarrow}$)

$$\rho_{11} = \frac{3}{8} + \frac{1}{4} \cos(2J_x t - 2\Delta t) + \frac{1}{4} \cos(2J_x t + 2\Delta t) + \frac{1}{8} \cos(4\Delta t), \tag{5.17}$$

$$\rho_{22} = \rho_{33} = \frac{1}{8} - \frac{1}{8} \cos(4\Delta t), \quad (5.18)$$

$$\rho_{44} = \frac{3}{8} - \frac{1}{4} \cos(2J_x t - 2\Delta t) - \frac{1}{4} \cos(2J_x t + 2\Delta t) + \frac{1}{8} \cos(4\Delta t). \quad (5.19)$$

In den Abbildungen 5.5 und 5.6 ist der zeitliche Verlauf von $P_{\uparrow\uparrow}$ bzw. ρ_{11} für $J_x = 1.0$ und $J_x = 2.0$ dargestellt. Im Folgenden seien

$$a_i = \sqrt{J_i^2 + 4\Delta^2}, \quad (5.20)$$

$$p_i^2 = 2 + 2 \left(\frac{J_i - a}{2\Delta} \right)^2 \quad (5.21)$$

und

$$q_i^2 = 2 + 2 \left(\frac{J_i + a}{2\Delta} \right)^2. \quad (5.22)$$

Dabei steht J_i für J_y oder J_z . Präpariert man das System im Zustand $\uparrow\uparrow$, so lautet die Dynamik zum Hamiltonian H_y

$$\rho_{11} = \frac{1}{4} + \frac{1}{p_y^4} + \frac{1}{q_y^4} + \frac{1}{p_y^2} \cos(J_y + a_y)t + \frac{1}{q_y^2} \cos(J_y - a_y)t + \frac{2}{p_y^2 q_y^2} \cos(2a_y t), \quad (5.23)$$

$$\rho_{22} = \rho_{33} = \frac{2J_y^2 + 4\Delta^2 - 2J_y a_y}{4\Delta^2 p_y^4} + \frac{2J_y^2 + 4\Delta^2 + 2J_y a_y}{4\Delta^2 q_y^4} - \frac{2}{p_y^2 q_y^2} \cos(2a_y t), \quad (5.24)$$

$$\rho_{44} = \frac{1}{4} + \frac{1}{p_y^4} + \frac{1}{q_y^4} - \frac{1}{p_y^2} \cos(J_y + a_y)t - \frac{1}{q_y^2} \cos(J_y - a_y)t + \frac{2}{p_y^2 q_y^2} \cos(2a_y t). \quad (5.25)$$

In den Abbildungen 5.7 und 5.8 ist der zeitliche Verlauf von $P_{\uparrow\uparrow}$ bzw. ρ_{11} für $J_y = 1.0$ und $J_y = 2.0$ dargestellt. Präpariert man das System im Zustand $\uparrow\uparrow$, so lautet die Dynamik zum Hamiltonian H_z

$$\rho_{11} = \frac{1}{4} + \frac{1}{p_z^4} + \frac{1}{q_z^4} + \frac{1}{q_z^2} \cos(J_z + a_z)t + \frac{1}{p_z^2} \cos(J_z - a_z)t + \frac{2}{p_z^2 q_z^2} \cos(2a_z t), \quad (5.26)$$

$$\rho_{22} = \rho_{33} = \frac{2J_z^2 + 4\Delta^2 - 2J_z a_z}{4\Delta^2 p_z^4} + \frac{2J_z^2 + 4\Delta^2 + 2J_z a_z}{4\Delta^2 q_z^4} - \frac{2}{p_z^2 q_z^2} \cos(2a_z t), \quad (5.27)$$

$$\rho_{44} = \frac{1}{4} + \frac{1}{p_z^4} + \frac{1}{q_z^4} - \frac{1}{q_z^2} \cos(J_z + a_z)t - \frac{1}{p_z^2} \cos(J_z - a_z)t + \frac{2}{p_z^2 q_z^2} \cos(2a_z t). \quad (5.28)$$

In den Abbildungen 5.3 und 5.4 ist der zeitliche Verlauf von $P_{\uparrow\uparrow}$ bzw. ρ_{11} für $J_z = 1.0$ und $J_z = 2.0$ dargestellt.

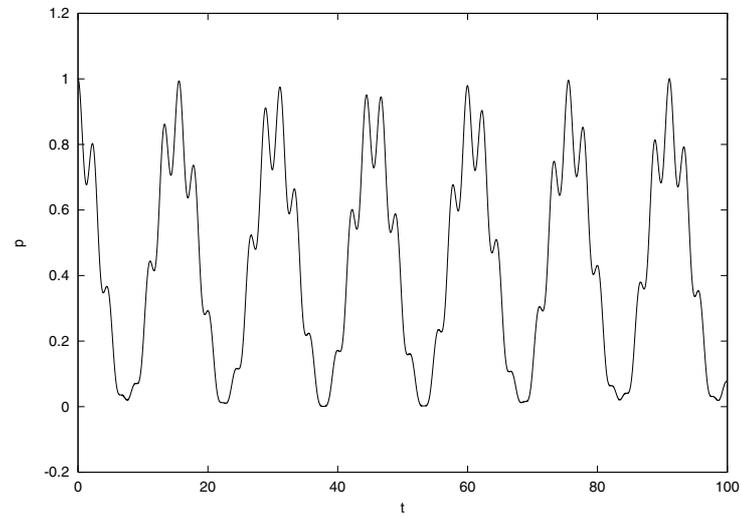


Abbildung 5.3: freie Propagation, Kopplung über σ_z , $J_z = 1.0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

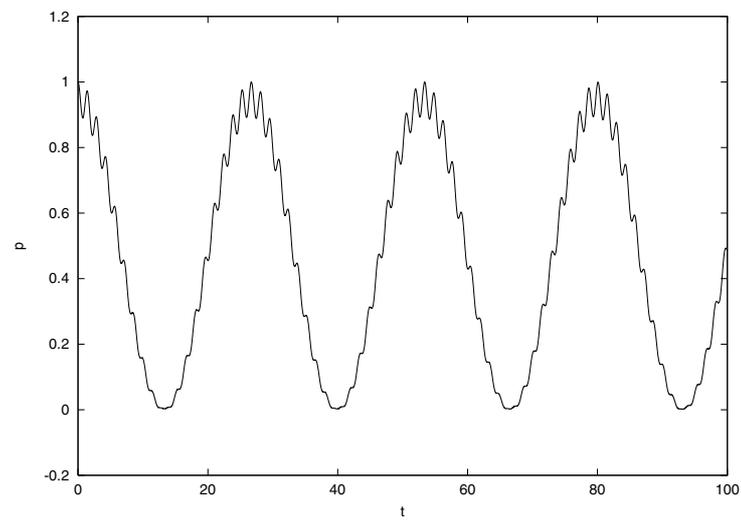


Abbildung 5.4: freie Propagation, Kopplung über σ_z , $J_z = 2.0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

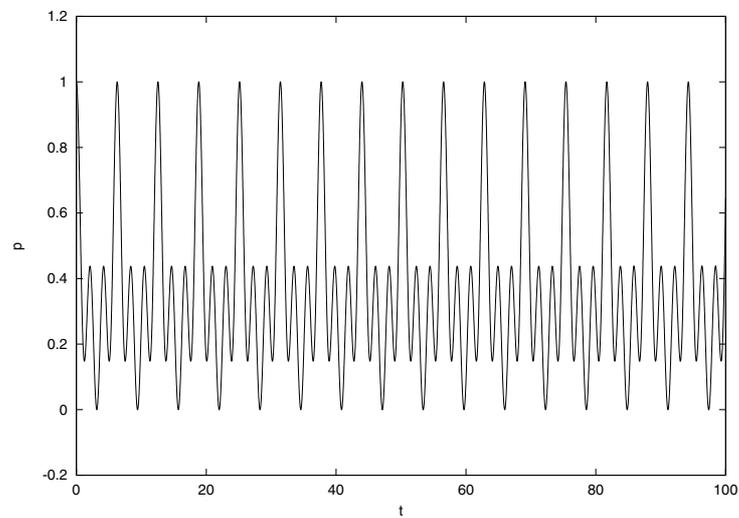


Abbildung 5.5: freie Propagation, Kopplung über σ_x , $J_x = 1.0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

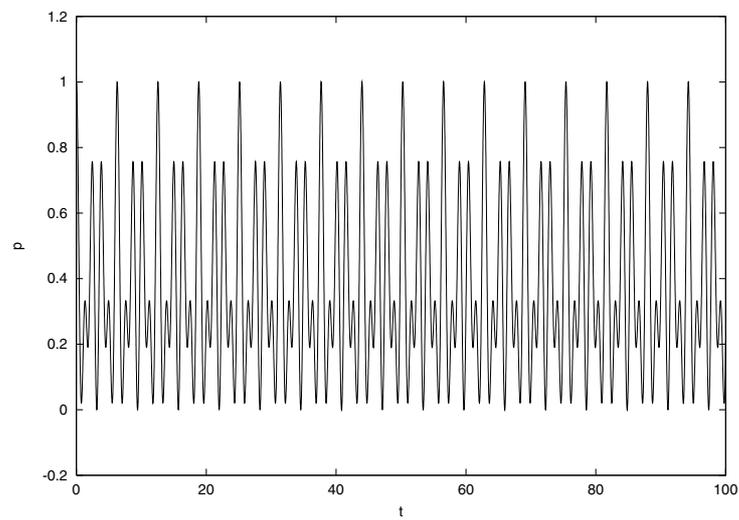


Abbildung 5.6: freie Propagation, Kopplung über σ_x , $J_x = 2.0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

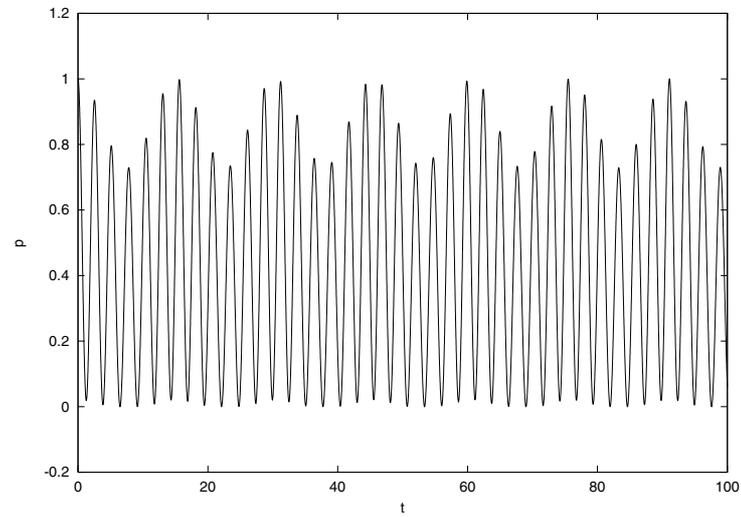


Abbildung 5.7: freie Propagation, Kopplung über σ_y , $J_y = 1.0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

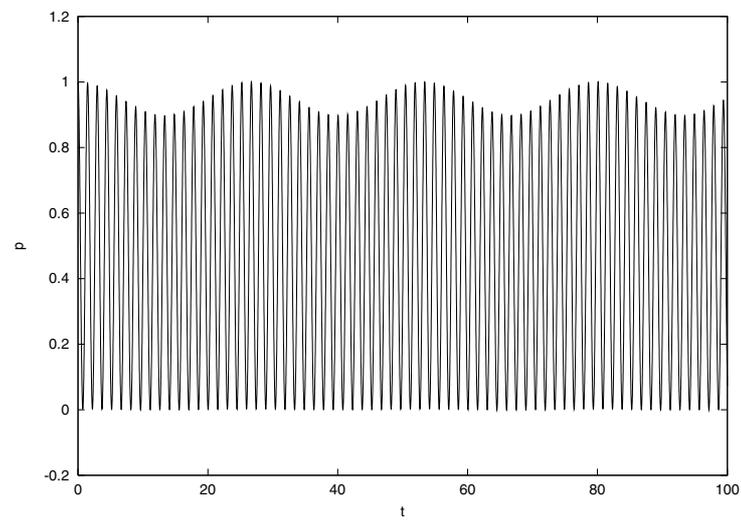


Abbildung 5.8: freie Propagation, Kopplung über σ_y , $J_y = 2.0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

5.3 Ankopplung an das Bad

Für das Gesamtsystem läßt sich der Hamiltonian in der allgemeinen Form

$$H = H_0(\sigma_1, \sigma_2) + H_B(\sigma_k) + H_I(\sigma_1, \sigma_2; \sigma_k) \quad (5.29)$$

angeben. Dabei lautet der Systemanteil

$$H_0 = -\frac{1}{2}\hbar\Delta\sigma_{x1} - \frac{1}{2}\hbar\Delta\sigma_{x2} + \frac{1}{2}K_{zz}\sigma_{z1}\sigma_{z2} . \quad (5.30)$$

Der Bad-Hamiltonian eines Spin-Bads ist

$$H_B = \frac{1}{2} \sum_k \hbar\omega_k \sigma_{xk} . \quad (5.31)$$

Der Wechselwirkungs-Hamiltonian lautet

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_k J_{k1} X_1 \sigma_{zk} + \frac{1}{2} \sum_k J_{k2} X_2 \sigma_{zk} . \quad (5.32)$$

Dabei sind die σ -Matrizen die Pauli-Matrizen der Einzelspins. Die relevante System-Koordinate von Spin 1 bzw. Spin 2 ist hierbei X_1 bzw. X_2 . Die Stärke der Wechselwirkung der beiden Spins mit dem Bad sei im Folgenden für beide System-Spins gleich groß.

Im Falle des Boson-Bads lautet der Systemanteil des Hamiltonians

$$H_0 = -\frac{1}{2}\hbar\Delta\sigma_{x1} - \frac{1}{2}\hbar\Delta\sigma_{x2} + \frac{1}{2}K_{zz}\sigma_{z1}\sigma_{z2} . \quad (5.33)$$

Der Badanteil ist in diesem Fall

$$H_B = \frac{1}{2} \sum_k m_k (\dot{x}_k^2 + \omega_k^2 x_k^2) \quad (5.34)$$

und der Wechselwirkungs-Hamiltonian lautet

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_k J_{k1} X_1 x_k + \frac{1}{2} \sum_k J_{k2} X_2 x_k . \quad (5.35)$$

Die allgemeine Form der direkten Wechselwirkung ist

$$H_I^{\text{dir}} = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} K_{\mu\nu} \sigma_{\mu 1} \sigma_{\nu 2} . \quad (5.36)$$

Im Folgenden beschränken wir uns auf die direkte σ_z -Kopplung

$$H_I^{\text{dir}} = \frac{1}{2} K_{zz} \sigma_{z 1} \sigma_{z 2} . \quad (5.37)$$

Diese Kopplung ist dominant, da sich die Spin-Systeme zumeist in Diagonalzuständen befinden.

5.4 Influenzfunktional

Der Propagator, der die Entwicklung des Systems beschreibt, lautet

$$J_\rho = \int \mathcal{D}[q_1] \int \mathcal{D}[q_2] \int \mathcal{D}[q'_1] \int \mathcal{D}[q'_2] A_1[q_1] A_2[q_2] A_1^*[q'_1] A_2^*[q'_2] F[q_1, q'_1, q_2, q'_2] . \quad (5.38)$$

Dabei ist $\mathcal{D}[q_i]$ das jeweilige Pfadintegralmaß, $F[q_1, q'_1, q_2, q'_2]$ das Influenzfunktional, das durch Ausintegrieren der Umgebung zustande kommt, und $A_1[q_1] = i \frac{\Delta_1}{2}$ bzw. $A_2[q_2] = i \frac{\Delta_2}{2}$ sind die mit einem Instanton verknüpften Übergangsamplituden von Spin 1 und 2. Die Randbedingungen

$$\int \mathcal{D}[q_\alpha] \dots = \int_{q_\alpha(0)=Q_{\alpha,i}}^{q_\alpha(t)=Q_{\alpha,f}} \mathcal{D}[q_\alpha] \dots \quad (5.39)$$

müssen erfüllt werden. Die Korrelationsfunktion kann man in der Form

$$J_{\alpha\beta}(\omega) = \begin{pmatrix} J_1(\omega) & J_{12}(\omega) \\ J_{12}^*(\omega) & J_2(\omega) \end{pmatrix} \quad (5.40)$$

angeben. Die spektralen Dichten sind

$$J_\alpha(\omega) = \pi \sum_k \frac{|J_{k\alpha}|^2}{\hbar} \delta(\omega - \omega_k) \quad (5.41)$$

und

$$J_{12}(\omega) = \pi \sum_k \frac{J_{k1} J_{k2}^*}{\hbar} \delta(\omega - \omega_k) . \quad (5.42)$$

Hier soll im Folgenden der Ohmsche Fall betrachtet werden, für welchen gilt

$$J_{\alpha\beta}(\omega) = \omega \eta_{\alpha\beta} e^{-\omega/\omega_c} . \quad (5.43)$$

Zunächst werden die Badkorrelationsfunktionen

$$L_{1\alpha}(\tau - s) = \int_0^\infty d\omega J_\alpha(\omega) \tanh \frac{\beta \hbar \omega}{2} \sin \omega(\tau - s) \quad (5.44)$$

und

$$L_{2\alpha}(\tau - s) = \int_0^\infty d\omega J_\alpha(\omega) \cos \omega(\tau - s) \quad (5.45)$$

für die Diagonalanteile und

$$L_{1w}(\tau - s) = \int_0^\infty d\omega J_{12}(\omega) \tanh \frac{\beta \hbar \omega}{2} \sin \omega(\tau - s) \quad (5.46)$$

bzw.

$$L_{2w}(\tau - s) = \int_0^\infty d\omega J_{12}(\omega) \cos \omega(\tau - s) \quad (5.47)$$

für die Nichtdiagonalanteile eingeführt. Die beiden Ausdrücke L_{1w} und L_{2w} drücken die badinduzierte Wechselwirkung zwischen den Spins aus. Das Influenzfunktional hat die Struktur

$$F[q_1, q_2, q'_1, q'_2] = F_1[q_1, q'_1] F_2[q_2, q'_2] F_{12}[q_1, q_2, q'_1, q'_2]. \quad (5.48)$$

Nach Einführung der symmetrischen und der antisymmetrischen Koordinate

$$\chi(\tau) = \frac{1}{q_0} [x(\tau) + y(\tau)], \quad (5.49)$$

$$\zeta(\tau) = \frac{1}{q_0} [x(\tau) - y(\tau)] \quad (5.50)$$

erhält man schließlich für die Influenzfunktionalfaktoren die Ausdrücke

$$F_\alpha = \exp \left[-\frac{q_{0\alpha}^2}{\pi \hbar} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^t ds \left(L_{2\alpha}(\tau - s) \zeta_\alpha(\tau) \zeta_\alpha(s) - i L_{1\alpha}(\tau - s) \zeta_\alpha(\tau) \chi_\alpha(s) \right) \right],$$

$$F_{12} = \exp \left[-\frac{q_{01} q_{02}}{\pi \hbar} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^t ds \left(L_{2w}(\tau - s) [\zeta_1(\tau) \zeta_2(s) + \zeta_2(\tau) \zeta_1(s)] \right. \right. \\ \left. \left. - i L_{1w}(\tau - s) [\zeta_1(\tau) \chi_2(s) + \zeta_2(\tau) \chi_1(s)] \right) \right]. \quad (5.51)$$

Dabei sind die Ausdrücke für $L_{1\alpha}$, $L_{2\alpha}$, L_{1w} und L_{2w} die in Gl. (5.44) bis (5.47) angegebenen Badkorrelationsfunktionen. Die Wahrscheinlichkeit $P_{\uparrow\uparrow}$ lautet dann

$$P_{\uparrow\uparrow} = \sum_{n_1 n_2} (-1)^{n_1 + n_2} \left(\frac{\Delta_1}{2}\right)^{2n_1} \left(\frac{\Delta_2}{2}\right)^{2n_2} \int_0^t D(t_{2n_1}) \int_0^t D(u_{2n_2}) \sum_{(\zeta_{1j}, \eta_{1j})} \sum_{(\zeta_{2j}, \eta_{2j})} \\ \tilde{F}_{n_1}^{(1)}([t_{1j}], [\zeta_{1j}], [\eta_{1j}]) \tilde{F}_{n_2}^{(2)}([u_{2k}], [\zeta_{2k}], [\eta_{2k}]) \\ \times \tilde{G}_{n_1 n_2}([t_{1j}], [u_{2k}], [\zeta_{1j}], [\eta_{1j}], [\zeta_{2k}], [\eta_{2k}]). \quad (5.52)$$

Dabei sind die Faktoren $\tilde{F}_{n_\alpha}^{(\alpha)}([t_{\alpha j}], [\zeta_{\alpha j}], [\eta_{\alpha j}])$ die Funktionale der Einzelspins. Diese können wie gewohnt in der Form

$$\tilde{F}_{n_\alpha}^{(\alpha)}([t_{\alpha j}], [\zeta_{\alpha j}], [\eta_{\alpha j}]) = \tilde{F}_{n_\alpha}^{(\alpha; se)} \tilde{F}_{n_\alpha}^{(\alpha; b-b)} \tilde{F}_{n_\alpha}^{(\alpha; b-s)} \quad (5.53)$$

dargestellt werden. Die Selbstenergie ist dabei mit se , die Blip-Blip-Wechselwirkung mit $b-b$ und die Blip-Sojourn-Wechselwirkung mit $b-s$ gekennzeichnet. Im Einzelnen ergeben sich die Ausdrücke

$$\tilde{F}_{n_\alpha}^{(\alpha; se)} = \exp\left(-\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \sum_{j=1}^{n_\alpha} S_j^{(\alpha)}\right), \quad (5.54)$$

$$\tilde{F}_{n_\alpha}^{(\alpha; b-b)} = \exp\left(-\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \sum_{k=1}^{n_\alpha} \sum_{j=k+1}^{n_\alpha} \zeta_{\alpha j} \zeta_{\alpha k} \Lambda_{jk}^{(\alpha)}\right), \quad (5.55)$$

$$\tilde{F}_{n_\alpha}^{(\alpha; b-s)} = \prod_{k=1}^{n_\alpha-1} \cos\left(\frac{q_0^2}{\pi\hbar} \sum_{j=k+1}^{n_\alpha} \zeta_{\alpha j} X_{jk}^{(\alpha)}\right), \quad (5.56)$$

$$\tilde{F}_{1_\alpha}^{(\alpha; b-s)} = \cos\left(\sum_{j=1}^{n_\alpha} \frac{q_0^2}{\pi\hbar} \zeta_{\alpha j} X_{j0}^{(\alpha)}\right). \quad (5.57)$$

Hierbei ist

$$S_j^{(\alpha)} = Q_2^{(\alpha)}(t_{2j} - t_{2j-1}), \quad (5.58)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{jk}^{(\alpha)} = & Q_2^{(\alpha)}(t_{2j} - t_{2k-1}) + Q_2^{(\alpha)}(t_{2j-1} - t_{2k}) \\ & - Q_2^{(\alpha)}(t_{2j} - t_{2k}) - Q_2^{(\alpha)}(t_{2j-1} - t_{2k-1}) \end{aligned} \quad (5.59)$$

und

$$\begin{aligned} X_{jk}^{(\alpha)} = & Q_1^{(\alpha)}(t_{2j} - t_{2k+1}) + Q_1^{(\alpha)}(t_{2j-1} - t_{2k}) \\ & - Q_1^{(\alpha)}(t_{2j} - t_{2k}) - Q_1^{(\alpha)}(t_{2j-1} - t_{2k+1}). \end{aligned} \quad (5.60)$$

Im Falle des Boson-Bads gilt

$$Q_1^{(\alpha)}(t) = \int_0^\infty \frac{J_{\alpha\alpha}(\omega)}{\omega^2} \sin(\omega t) d\omega, \quad (5.61)$$

$$Q_2^{(\alpha)}(t) = \int_0^\infty \frac{J_{\alpha\alpha}(\omega)}{\omega^2} \left(1 - \cos(\omega t)\right) \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) d\omega \quad (5.62)$$

während die entsprechenden Ausdrücke für das Spin-Bad wie folgt lauten

$$Q_{1s}^{(\alpha)}(t) = \int_0^\infty \frac{J_{\alpha\alpha}(\omega)}{\omega^2} \sin(\omega t) \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) d\omega, \quad (5.63)$$

$$Q_{2s}^{(\alpha)}(t) = \int_0^\infty \frac{J_{\alpha\alpha}(\omega)}{\omega^2} \left(1 - \cos(\omega t)\right) d\omega. \quad (5.64)$$

Hinzu kommt nun noch das Wechselwirkungsfunktional

$$\tilde{G}_{n_1 n_2}([t_{1j}], [u_{2k}], [\zeta_{1j}], [\eta_{1j}], [\zeta_{2k}], [\eta_{2k}]) . \quad (5.65)$$

Dieses kann wiederum in der Form

$$\tilde{G}_{n_1 n_2} = G_{n_1 n_2}^{b-b} G_{n_1 n_2}^{b-s} \quad (5.66)$$

dargestellt werden. Der Blip-Blip-Term lautet

$$G_{n_1 n_2}^{b-b} = \exp\left(-\frac{q_{01}q_{02}}{\pi\hbar} \sum_{j,k}^{n_1, n_2} \zeta_{1j}\zeta_{2k}\Lambda_{jk}^{(12)}\right) \quad (5.67)$$

wobei

$$\begin{aligned} \Lambda_{jk}^{(12)} = & Q_2^{(12)}(t_{2j} - u_{2k-1}) + Q_2^{(12)}(t_{2j-1} - u_{2k}) \\ & - Q_2^{(12)}(t_{2j} - u_{2k}) - Q_2^{(12)}(t_{2j-1} - u_{2k-1}) . \end{aligned} \quad (5.68)$$

Der Blip-Sojourn-Term besitzt die Form

$$\begin{aligned} G_{n_1 n_2}^{b-s} = & \exp\left(i\frac{q_{01}q_{02}}{\pi\hbar} \sum_j^{n_1} \sum_k^{n_2} X_{jk}^{(12)}(\zeta_{1j}\eta_{2k} + \eta_{1j}\zeta_{2k})\right) \\ & \times \exp\left(-iK_{zz} \left(\sum_{j=1}^{n_1} \zeta_{1j}\eta_{2P}(t_{2j} - t_{2j-1}) + \sum_{k=1}^{n_2} \zeta_{2k}\eta_{1P}(u_{2k} - u_{2k-1})\right)\right) \end{aligned} \quad (5.69)$$

mit

$$\begin{aligned} X_{jk}^{(12)} = & Q_1^{(12)}(t_{2j} - u_{2k-1}) + Q_1^{(12)}(t_{2j-1} - u_{2k}) \\ & - Q_1^{(12)}(t_{2j} - u_{2k}) - Q_1^{(12)}(t_{2j-1} - u_{2k-1}) . \end{aligned} \quad (5.70)$$

Die direkte Kopplung K_{zz} koppelt Blips und Sojourns von verschiedenen Spins, wenn sie zeitlich überlappen. Retardierungseffekte werden vernachlässigt.

Beim Boson-Bad ist wiederum

$$Q_1^{(12)}(t) = \int_0^\infty \frac{J_{12}(\omega)}{\omega^2} \sin(\omega t) d\omega , \quad (5.71)$$

$$Q_2^{(12)}(t) = \int_0^\infty \frac{J_{12}(\omega)}{\omega^2} \left(1 - \cos(\omega t)\right) \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) d\omega \quad (5.72)$$

und beim Spin-Bad ist

$$Q_{1s}^{(12)}(t) = \int_0^\infty \frac{J_{12}(\omega)}{\omega^2} \sin(\omega t) \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) d\omega , \quad (5.73)$$

$$Q_{2s}^{(12)}(t) = \int_0^\infty \frac{J_{12}(\omega)}{\omega^2} \left(1 - \cos(\omega t)\right) d\omega . \quad (5.74)$$

Man sieht an der zeitlichen Integration

$$\int_{t_1}^{t_2} d\tau \int_{t_0}^{\tau} ds \sin \omega(\tau - s) = \frac{1}{\omega}(t_2 - t_1) - \frac{1}{\omega^2}[\sin \omega(t_2 - t_0) - \sin \omega(t_1 - t_0)], \quad (5.75)$$

daß man für einen Blip, der einen Sojourn überlappt, folgenden Ausdruck für Gl. (5.69) schreiben kann

$$\exp\left(i\zeta_{11}\eta_{20}\left[(-Q_1^{(12)}(t_1 - t_0) + Q_1^{(12)}(t_2 - t_0)) - (K_{zz} + \epsilon)(t_2 - t_1)\right]\right). \quad (5.76)$$

Dabei ist ϵ gegeben als

$$\epsilon = \frac{q_{01}q_{02}}{\pi\hbar} \int_0^\infty d\omega \frac{J_{12}(\omega)}{\omega}. \quad (5.77)$$

Wie in Gl. (5.42) angegeben, handelt es sich bei J_{12} um Faktoren von J_{k1} und J_{k2} . Dies ist die badinduzierte (indirekte) Kopplung der beiden System-Spins.

Man hat also

$$J = K_{zz} + \epsilon = K_{zz} + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J_{12}(\omega)}{\omega}. \quad (5.78)$$

Der Kopplungsparameter J setzt sich aus der direkten Kopplung K_{zz} (siehe Hamiltonian (5.30)) und der badinduzierten Kopplung zusammen. Je nach Cutoff-Frequenz kann die badinduzierte Kopplung klein oder groß sein. Die Cutoff-Frequenz hängt dabei vom konkret betrachteten Problem ab.

Ist die Temperatur T und die Wechselwirkung J sehr groß, dann können für das Boson-Bad analytische Ergebnisse für die System-Dynamik gewonnen werden. Diese wurden von Dube und Stamp in Ref. [28] angegeben. Ein analytisches Ergebnis für das Spin-Bad wird in Abschnitt 5.8 abgeleitet.

5.5 Influenzkern

Ohne interne Wechselwirkung J lautet der Influenzkern

$$\exp[-Q_2(t)] \cos[Q_1(t)]. \quad (5.79)$$

Für das Boson-Bad gilt

$$Q_1(t) = 2K \arctan(\omega_c t) \quad (5.80)$$

und

$$Q_2(t) = K \ln(1 + \omega_c^2 t^2) + 2K \ln \left[\frac{\beta\hbar}{\pi t} \sinh \frac{\pi t}{\beta\hbar} \right]. \quad (5.81)$$

Für das Spin-Bad sind die Ausdrücke $Q_1(t)$ und $Q_2(t)$, von denen der Kern abhängt, nicht mehr so kompakt. Sie lauten

$$Q_1(t) = 2K \left[-\arctan(\omega_c t) + i \ln \frac{\Gamma(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{1}{2} - \frac{it}{2\beta\hbar})\Gamma(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{it}{2\beta\hbar})}{\Gamma(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{1}{2} + \frac{it}{2\beta\hbar})\Gamma(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} - \frac{it}{2\beta\hbar})} \right], \quad (5.82)$$

$$Q_2(t) = K \ln(1 + \omega_c^2 t^2). \quad (5.83)$$

Wenn man die Wechselwirkung J hinzunimmt, dann verändert diese den Kern. Der resultierende Kern ist in Abschnitt 5.7 angegeben.

Für hohe Temperaturen kann Gl. (5.82) durch eine kompaktere Form approximiert werden. Für $T \rightarrow \infty$ gilt

$$Q_1(t) = K \frac{\omega_c t}{1 + \omega_c^2 t^2} \hbar\omega_c\beta, \quad (5.84)$$

$$Q_2(t) = K \ln(1 + \omega_c^2 t^2). \quad (5.85)$$

5.6 Dynamik

Beim gekoppelten Zwei-Spin-System mit Ankopplung an ein Spin-Bad konnte für den Parameterbereich $T \gg J \gg \Delta_\beta$ mit Gl. (5.84) und (5.85) die folgende Dynamik für $P_{\uparrow\uparrow}(t)$ gefunden werden (siehe Abschnitt 5.8)

$$P_{\uparrow\uparrow}(t) = \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \exp(-gt) + \frac{1}{4} \exp(-2gt) \quad (5.86)$$

mit

$$g = \sin(\pi K) \frac{1}{J^{1-2K}} \frac{\Delta^2}{\omega_c^{2K}} \Gamma(1 - 2K). \quad (5.87)$$

Dabei wurde $P_{\uparrow\uparrow}(t)$ zu $P_{\uparrow\uparrow}(t=0) = 1$ präpariert.

Die Herleitung von Gl. (5.86) und (5.87) ist im Abschnitt 5.8 dargestellt.

Ohne Kopplung ergibt die analytische Betrachtung für hohe Temperaturen

$$P_{\uparrow\uparrow}(t) = \frac{1}{4} + \frac{1}{2} P(t) + \frac{1}{4} P^2(t). \quad (5.88)$$

Dabei ist $P(t)$ die Population eines Einzelspins. Diese wurde bereits in Kapitel 4 analytisch abgeleitet und ist für $T \rightarrow \infty$ und $K < 1/2$ wie folgt gegeben,

$$\begin{aligned} P(t) &= \frac{1}{1-K} \cos(\tilde{\Omega}t) e^{-\tilde{\gamma}t}, \\ \tilde{\Omega} &= \left(\cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \tilde{\Delta}_{\text{eff}}, \\ \tilde{\gamma} &= \left(\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{K}{1-K}\right) \right) \tilde{\Delta}_{\text{eff}}, \\ \tilde{\Delta}_{\text{eff}} &= \Delta_r (\Gamma(1-2K))^{\frac{1}{2-2K}}, \\ \Delta_r &= \Delta \left(\frac{\Delta}{\omega_c} \right)^{\frac{K}{1-K}}. \end{aligned} \quad (5.89)$$

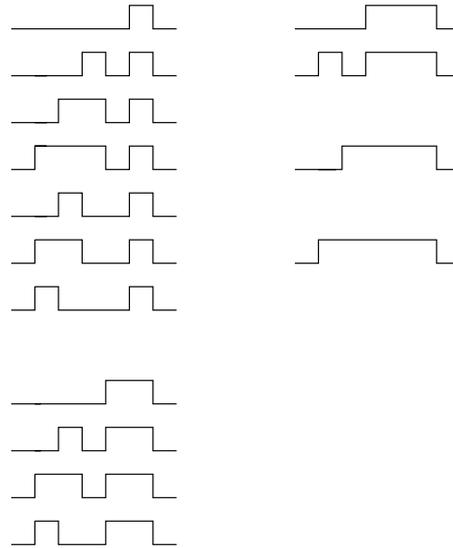


Abbildung 5.9: Blip-Rekursion für die ersten sieben Zeitschritte

$$\begin{aligned}
 P_{\uparrow\uparrow} = & \text{_____} + \text{_____} + \text{_____} + \text{_____} + \text{_____} + \\
 & \text{_____} + \text{_____} + \text{_____} + \\
 & \text{_____} + \text{_____} + \dots
 \end{aligned}$$

Abbildung 5.10: Summierung der Blip-Gruppen. Dabei repräsentiert eine Hebung eine ganze Blip-Gruppe. Dies ist in der nächsten Abbildung (5.11) dargestellt.

5.7 Algorithmus

Im restlichen Parameterbereich konnten bisher keine analytischen Ergebnisse gewonnen werden. Eine numerische Betrachtung ist hier notwendig. Dazu wurde ein Algorithmus implementiert, der in der Lage ist, auch für tiefe Temperaturen und kleine Kopplungsstärken J Ergebnisse für die Wahrscheinlichkeiten $P_{\uparrow\uparrow}$, $P_{\uparrow\downarrow}$, $P_{\downarrow\uparrow}$ und $P_{\downarrow\downarrow}$ zu liefern. So kann anhand dieses Programms der Übergang von keiner Kopplung ($J = 0$) zu starken Kopplungen nachvollzogen werden. Der Fall $J = 0$ repräsentiert die Kopplung der beiden System-Spins an zwei unabhängige Bäder. Dieser Fall kann gut mit bekannten Algorithmen, wie dem NIBA-Algorithmus, bzw. mit analytischen Ergebnissen verglichen werden. Er wurde daher zur Kontrolle des hier betrachteten Algorithmusses verwendet. Ist die Kopplung J hinreichend stark, kann man die Ergebnisse mit den analytisch gewonnenen (Gl. (5.86) und (5.87)) vergleichen und stellt dabei Übereinstimmung fest.

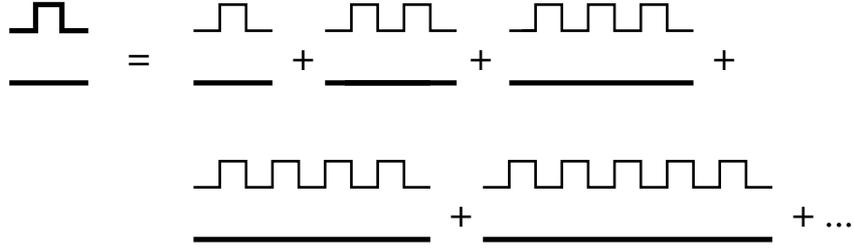


Abbildung 5.11: Zusammensetzung einer Blip-Gruppe.

Der Algorithmus, der hier implementiert wurde, beruht prinzipiell auf zwei Haupt-Rekursionen. Zuerst werden rekursiv alle denkbaren Blipketten berechnet (siehe Abbildung 5.9). Dann werden die Blipketten rekursiv aneinandergesetzt und es entsteht das Pfadintegral für die Zwei-Spin-Dynamik (siehe Abbildungen 5.10 und 5.11). Der Rekursionskern, der hier verwendet wird, lautet für den ersten Spin

$$g^{(1)}(\sigma, \lambda) = \frac{\Delta^2}{2} \exp[-Q_2^{(1)}(t)] \cos[\sigma Jt - \lambda Q_1^{(1)}(t)]. \quad (5.90)$$

Dabei ist λ die Sojourn-Ladung, die dem Blip von Spin 1 direkt vorangeht und σ ist die Ladung des direkt überlappenden Sojourns von Spin 2. Analog lautet der Rekursionskern des zweiten Spins

$$g^{(2)}(\sigma, \lambda) = \frac{\Delta^2}{2} \exp[-Q_2^{(2)}(t)] \cos[\sigma Jt - \lambda Q_1^{(2)}(t)]. \quad (5.91)$$

Dabei ist λ die Sojourn-Ladung, die dem Blip von Spin 2 direkt vorangeht, und σ ist die Ladung des direkt überlappenden Sojourns von Spin 1.

Für diese Kerne wurden beim Spin-Bad die in Gl. (5.82) und (5.83) angegebenen Ausdrücke verwendet. Beim Boson-Bad wurden die in Gl. (5.80) und (5.81) angegebenen Ausdrücke verwendet. Es werden Ergebnisse für $P_{\uparrow\uparrow}$, $P_{\uparrow\downarrow}$, $P_{\downarrow\uparrow}$ und $P_{\downarrow\downarrow}$ gewonnen. Das ist zum Beispiel in Abbildung 5.12 dargestellt. Dort ist $\Delta = 1.0$, $\beta = 0.0001$, $\omega_c = 20$ und $K = 0.1$, die interne Wechselwirkung ist $J = 1.0$.

Weitere Abbildungen finden sich in Kapitel 7. Die Abbildungen 7.1 bis 7.10 zeigen ein System, das an ein Spin-Bad koppelt. Die Abbildungen 7.11 bis 7.13 stellen ein System dar, das an ein Boson-Bad koppelt. In den Abbildungen 7.1 und 7.2 sind die Parameter $\Delta = 1.0$, $\beta = 0.0001$, $\omega_c = 20$ und $J = 1.0$. In Abbildung 7.1 ist $K = 0.1$ und in Abbildung 7.2 ist $K = 0.3$. Es folgen einige Diagramme, die die Entwicklung der Dynamik für $P_{\uparrow\uparrow}$ in Abhängigkeit von J aufzeigen sollen. Dabei sind die Parameter wie in den Abbildungen 7.1 und 7.2. In der ersten Serie ist $K = 0.1$ und in der zweiten Serie ist $K = 0.3$. Der Parameter J wird jeweils schrittweise erhöht. Dann folgt noch eine Abbildung (7.10), die die Dynamik für verschieden starke Ankopplung der Spins an das Spin-Bad zeigt. Dabei ist die Kopplung des ersten Spins an das Bad $K_1 = 0.05$ und die Kopplung des zweiten Spins an das Bad $K_2 = 0.4$.

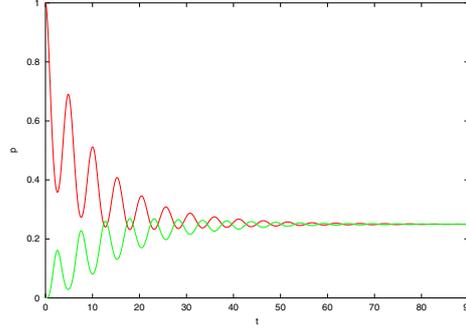


Abbildung 5.12: $J = 1.0$, $K = 0.1$, $\beta = 0.0001$, rot: $p_{\uparrow\uparrow}$, grün: $p_{\downarrow\downarrow}$

Der numerische Aufwand für ein System, das an ein Spin-Bad koppelt, ist deutlich größer als der für ein System, das ein Boson-Bad koppelt. Die Berechnung des Influenzkerns ist im ersten Fall aufwendiger (siehe Abschnitt 5.5). In beiden Fällen sind die verschachtelten Rekursionen zur Berechnung des Influenzfunktionalns eine anspruchsvolle numerische Herausforderung.

Wenn die interne Kopplung J sehr groß wird, dann finden immer längere Überlappungen der Blips statt. Um diese berücksichtigen zu können, wird in einem nächsten Schritt der Algorithmus um diese Überlappungen erweitert. Im Faktor

$$\exp\left(i\zeta_{11}\eta_{20}\left[(-Q_1^{(12)}(t_{2j+1} - t_{2j}) + Q_1^{(12)}(t_{2j+2} - t_{2j})) - (K_{zz} + \epsilon)(t_{2j+2} - t_{2j+1})\right]\right) \quad (5.92)$$

wurde zuerst nur der letzte Summand berücksichtigt. Dies führt zum Kern

$$g^{(1)}(\sigma, \lambda) = \frac{\Delta^2}{2} \exp[-Q_2^{(1)}(t)] \cos[\sigma Jt - \lambda Q_1^{(1)}(t)]. \quad (5.93)$$

Bezieht man nun auch die ersten beiden Summanden mit ein (vgl. Abbildung 5.13), dann lautet der Kern für Spin 1

$$g^{(1)}(\sigma, \lambda) = \frac{\Delta^2}{2} \exp\left(-Q_2^{(1)}(t)\right) \times \cos\left(\sigma \left[Jt + Q_1^{(12)}(t_{2j+2} - t_{2j}) - Q_1^{(12)}(t_{2j+1} - t_{2j}) \right] - \lambda Q_1^{(1)}(t)\right). \quad (5.94)$$

Analog lautet dann der Kern für Spin 2

$$g^{(2)}(\sigma, \lambda) = \frac{\Delta^2}{2} \exp\left(-Q_2^{(2)}(t)\right) \times \cos\left(\sigma \left[Jt + Q_1^{(12)}(t_{2j+2} - t_{2j}) - Q_1^{(12)}(t_{2j+1} - t_{2j}) \right] - \lambda Q_1^{(2)}(t)\right). \quad (5.95)$$

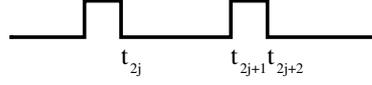


Abbildung 5.13: Zeit: Indizierung

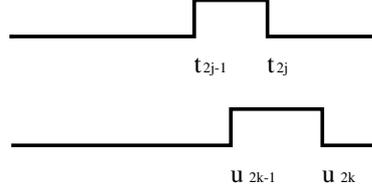


Abbildung 5.14: Zeit: Indizierung

Auch hier ist λ wieder die Sojourn-Ladung, die dem jeweiligen Blip direkt vorangeht und σ ist die Ladung des direkt überlappenden Sojourns des anderen Spins. Es wird nun auch der Faktor der Blip-Blip-Wechselwirkung berücksichtigt. Dieser lautet

$$G_{n_1 n_2}^{b-b} = \exp\left(-\frac{q_{01} q_{02}}{\pi \hbar} \sum_{j,k}^{n_1, n_2} \zeta_{1j} \zeta_{2k} \Lambda_{jk}^{(12)}\right) \quad (5.96)$$

mit

$$\begin{aligned} \Lambda_{jk}^{(12)} = & Q_2^{(12)}(t_{2j} - u_{2k-1}) + Q_2^{(12)}(t_{2j-1} - u_{2k}) \\ & - Q_2^{(12)}(t_{2j} - u_{2k}) - Q_2^{(12)}(t_{2j-1} - u_{2k-1}) \end{aligned} \quad (5.97)$$

(vgl. Abbildung 5.14).

Hat man überlappende Blips wie in Abbildung 5.15 oder 5.16, dann müssen die Kerne (5.94) und (5.95) modifiziert werden. Wenn die Überlappung wie in Abbildung 5.15 stattfindet, dann lautet der zum Kern gehörige Faktor

$$\begin{aligned} & \exp\left(i\zeta_{11}\eta_{20}[Q_1^{(12)}(t_{2j+2} - u_{2k+1}) + Q_1^{(12)}(t_{2j+1} - t_{2j}) - Q_1^{(12)}(t_{2j+2} - t_{2j})]\right) \\ & \times \exp\left(i\zeta_{21}\eta_{11}Q_1^{(12)}(u_{2k+2} - t_{2j+2})\right) \\ & \times \exp\left(iJ[\zeta_{11}\eta_{20}(u_{2k+1} - t_{2j+1}) + \zeta_{21}\eta_{11}(u_{2k+2} - t_{2j+2})]\right). \end{aligned} \quad (5.98)$$

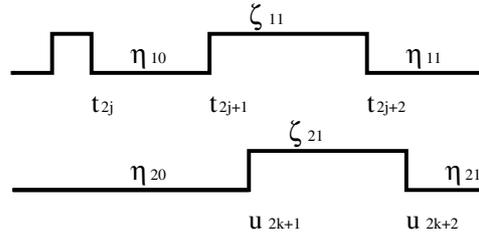


Abbildung 5.15: versetzte Blips

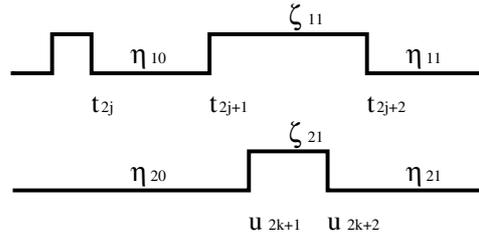


Abbildung 5.16: geschachtelte Blips

Findet die Überlappung wie in Abbildung 5.16 statt, dann lautet der Faktor

$$\begin{aligned}
& \exp\left(i\zeta_{11}\eta_{20}\left[Q_1^{(12)}(t_{2j+1} - t_{2j}) + Q_1^{(12)}(t_{2j+2} - u_{2k+1}) - Q_1^{(12)}(t_{2j+2} - t_{2j})\right]\right) \\
& \times \exp\left(-i\zeta_{11}\eta_{21}Q_1^{(12)}(t_{2j+2} - u_{2k+2})\right) \\
& \times \exp\left(iJ\left[\zeta_{11}\eta_{20}(u_{2j+1} - t_{2k+1}) + \zeta_{21}\eta_{21}(t_{2k+2} - u_{2j+2})\right]\right).
\end{aligned} \tag{5.99}$$

Der gesamte Beitrag zum Kern ist nun

$$\begin{aligned}
& \exp\left[-\zeta_1\zeta_2\left(Q_2^{(12)}(t_e - u_a) + Q_2^{(12)}(t_a - u_e) - Q_2^{(12)}(t_e - u_e) - Q_2^{(12)}(t_a - u_a)\right)\right] \\
& \times \exp\left[-Q_2^{(1)}(t) - Q_2^{(2)}(u)\right] \\
& \times \exp\left[iJ\left(\zeta_1\eta_2(u_a - t_a) + \zeta_2\eta_3(u_e - t_e)\right) + i\zeta_1\eta_1Q_1^{(1)}(t) + i\zeta_2\eta_2Q_1^{(2)}(u)\right].
\end{aligned} \tag{5.100}$$

Dabei bedeutet der Index a und e Anfang und Ende des entsprechenden Blips von Spin 1 oder Spin 2. Sojourns von Spin 1 sind η_1 und η_3 . Sojourns von Spin 2 sind η_2 und η_4 . Der Blip von Spin 1 ist ζ_1 , der Blip von Spin 2 ist ζ_2 . Diese Blips dauern die Zeit t bzw. u .

Da ζ_1 und ζ_2 die Werte ± 1 annehmen, kann man den Ausdruck (5.100) als

$$\begin{aligned}
& \exp \left[- \left(Q_2^{(12)}(t_e - u_a) + Q_2^{(12)}(t_a - u_e) - Q_2^{(12)}(t_e - u_e) - Q_2^{(12)}(t_a - u_a) \right) \right] \\
& \times \exp \left[-Q_2^{(1)}(t) - Q_2^{(2)}(u) \right] \\
& \times \cos \left[J \left(\eta_2(u_a - t_a) + \eta_3(u_e - t_e) \right) + \eta_1 Q_1^{(1)}(t) + \eta_2 Q_1^{(2)}(u) \right] \\
& + \exp \left[\left(Q_2^{(12)}(t_e - u_a) + Q_2^{(12)}(t_a - u_e) - Q_2^{(12)}(t_e - u_e) - Q_2^{(12)}(t_a - u_a) \right) \right] \\
& \times \exp \left[-Q_2^{(1)}(t) - Q_2^{(2)}(u) \right] \\
& \times \cos \left[J \left(\eta_2(u_a - t_a) - \eta_3(u_e - t_e) \right) + \eta_1 Q_1^{(1)}(t) - \eta_2 Q_1^{(2)}(u) \right]
\end{aligned} \tag{5.101}$$

schreiben. Dieser Ausdruck für den Kern gilt für versetzte Blips. Für verschachtelte Blips lautet der Kern

$$\begin{aligned}
& \exp \left[- \left(Q_2^{(12)}(t_e - u_a) + Q_2^{(12)}(t_a - u_e) - Q_2^{(12)}(t_e - u_e) - Q_2^{(12)}(t_a - u_a) \right) \right] \\
& \times \exp \left[-Q_2^{(1)}(t) - Q_2^{(2)}(u) \right] \\
& \times \cos \left[J \left(\eta_2(u_a - t_a) + \eta_4(t_e - u_e) \right) + \eta_1 Q_1^{(1)}(t) + \eta_2 Q_1^{(2)}(u) \right] \\
& + \exp \left[\left(Q_2^{(12)}(t_e - u_a) + Q_2^{(12)}(t_a - u_e) - Q_2^{(12)}(t_e - u_e) - Q_2^{(12)}(t_a - u_a) \right) \right] \\
& \times \exp \left[-Q_2^{(1)}(t) - Q_2^{(2)}(u) \right] \\
& \times \cos \left[J \left(\eta_2(u_a - t_a) - \eta_4(t_e - u_e) \right) + \eta_1 Q_1^{(1)}(t) - \eta_2 Q_1^{(2)}(u) \right].
\end{aligned} \tag{5.102}$$

Durch die Berücksichtigung von überlappenden Blips können auch sehr große Wechselwirkungsstärken J quantitativ erfaßt werden.

5.8 Analyse der Dynamik beim Zwei-Spin-System

Unter Benutzung der Relationen, die in Ref. [28] für diese Problematik angegeben werden (siehe Abschnitt 5.9), wird hier die Dynamik für ein Spin-Bad im Fall

$T \gg J \gg \Delta_\beta$ analytisch abgeleitet. In diesem Fall gilt

$$\begin{aligned}
P_{\uparrow\uparrow}(\lambda) &= \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{4} \left[g_1 \left(1 + \frac{h_1}{g_1} \right) + g_2 \left(1 + \frac{h_2}{g_2} \right) \right] \frac{1}{\lambda} \frac{1}{\lambda + g_1 + g_2} \\
&\quad - \frac{1}{4} \left[g_1 \left(1 + \frac{h_1}{g_1} \right) + g_2 \left(1 + \frac{h_2}{g_2} \right) \right] \frac{1}{\lambda^2 + \lambda(g_1 + g_2) + g_1 g_2 \left(1 - \frac{h_1 h_2}{g_1 g_2} \right)} \quad (5.103) \\
&\quad - \frac{1}{2} g_1 g_2 \left[1 - \frac{h_1 h_2}{g_1 g_2} \right] \frac{1}{\lambda} \frac{1}{\lambda^2 + \lambda(g_1 + g_2) + g_1 g_2 \left(1 - \frac{h_1 h_2}{g_1 g_2} \right)}.
\end{aligned}$$

Wobei g und h definiert sind als

$$g_\beta(\lambda) = \Delta_\beta^2 \int_0^\infty dt \exp(-\lambda t - Q_2^{(\beta)}(t)) \cos Q_1^{(\beta)}(t) \cos(Jt), \quad (5.104)$$

$$h_\beta(\lambda) = \Delta_\beta^2 \int_0^\infty dt \exp(-\lambda t - Q_2^{(\beta)}(t)) \sin Q_1^{(\beta)}(t) \sin(Jt). \quad (5.105)$$

Jetzt wird die Dynamik für $T \rightarrow \infty$ abgeleitet.

In diesem Fall gilt $Q_{1s}^{(\beta)}(t) = 0 \implies h_\beta(\lambda) = 0$. Außerdem ist im Scaling-Limes $Q_{2s}^{(\beta)}(t) = 2K \ln \omega_c t$, und zwar für $K < \frac{1}{2}$. Für $g_\beta(\lambda)$ folgt

$$\begin{aligned}
g_\beta(\lambda) &= \Delta_\beta^2 \int_0^\infty dt \exp(-\lambda t - 2K \ln(\omega_c t)) \cos(Jt) \\
&= \Delta_\beta^2 \int_0^\infty dt \exp(-\lambda t) (\omega_c t)^{-2K} \cos(Jt) \\
&= \frac{\Delta_\beta^2}{\omega_c^{2K}} \int_0^\infty dt \exp(-\lambda t) t^{-2K} \cos(Jt) \quad (5.106) \\
&= \frac{\Delta_\beta^2}{\omega_c^{2K}} \int_0^\infty dt \left[\frac{1}{2} \exp(-\lambda t + iJt) t^{-2K} + \frac{1}{2} \exp(-\lambda t - iJt) t^{-2K} \right] \\
&= \frac{\Delta_\beta^2}{\omega_c^{2K}} \frac{1}{2} [\Gamma(1 - 2K)(\lambda - iJ)^{2K-1} + \Gamma(1 - 2K)(\lambda + iJ)^{2K-1}].
\end{aligned}$$

Die letzte Umformung folgt aus

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty dt \exp(-t) t^{x-1} \quad (5.107)$$

$$\implies \Gamma(1 - 2K) = \int_0^\infty dt \exp(-t) t^{-2K}. \quad (5.108)$$

Mit der Substitution $\lambda t \pm iJt = \tau$ und damit $\frac{d\tau}{dt} = \lambda \pm iJ$, ergibt sich

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty dt \exp(-\lambda t \pm iJt) t^{-2K} &= \int_0^\infty \frac{d\tau}{\lambda \mp iJ} \exp(-\tau) (\lambda \mp iJ)^{2K} \tau^{-2K} \\
&= \int_0^\infty d\tau \exp(-\tau) \tau^{-2K} (\lambda \mp iJ)^{2K-1} \quad (5.109) \\
&= \Gamma(1 - 2K) (\lambda \mp iJ)^{2K-1}.
\end{aligned}$$

Es gilt also, die Gleichung (5.106) geeignet umzuformen.

$$g_\beta(\lambda) = \frac{\Delta_\beta^2}{\omega_c^{2K}} \Gamma(1 - 2K) \frac{1}{2} \left[\frac{1}{(\lambda - iJ)^{1-2K}} + \frac{1}{(\lambda + iJ)^{1-2K}} \right]. \quad (5.110)$$

Jetzt sollen zwei identische Spins betrachtet werden, also $\Delta_\alpha = \Delta_\beta = \Delta$. Man führt die effektive Aufspaltung

$$\tilde{\Delta}_{\text{eff}} = \left[\frac{\Delta^2}{\omega_c^{2K}} \Gamma(1 - 2K) \right]^{\frac{1}{2-2K}} \quad (5.111)$$

ein. Damit wird

$$g(\lambda) = \tilde{\Delta}_{\text{eff}}^{2-2K} \frac{1}{2} \left[\frac{1}{(\lambda - iJ)^{1-2K}} + \frac{1}{(\lambda + iJ)^{1-2K}} \right]. \quad (5.112)$$

Es wird angenommen, daß an den Polen $|\lambda| < |\tilde{\Delta}_{\text{eff}}|$ gilt und somit $J \gg \lambda$. Diese Annahme wird sich im Folgenden rechtfertigen. Dann ist

$$(\lambda \pm iJ)^{1-2K} \approx J^{1-2K} \exp(\pm i \frac{\pi}{2} (1 - 2K)). \quad (5.113)$$

$$\implies g(\lambda) = \tilde{\Delta}_{\text{eff}}^{2-2K} \frac{1}{J^{1-2K}} \frac{1}{2} [\exp(i \frac{\pi}{2} (1 - 2K)) + \exp(-i \frac{\pi}{2} (1 - 2K))] \quad (5.114)$$

$$g(\lambda) = \tilde{\Delta}_{\text{eff}}^{2-2K} \frac{1}{J^{1-2K}} \cos(\frac{\pi}{2} (1 - 2K)). \quad (5.115)$$

Transformiert man den Ausdruck für die Dynamik

$$P_{\uparrow\uparrow}(\lambda) = \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{2} g \frac{1}{\lambda(\lambda + 2g)} - \frac{1}{2} g \frac{1}{\lambda^2 + \lambda(2g) + g^2} - \frac{1}{2} g^2 \frac{1}{\lambda \lambda^2 + \lambda(2g) + g^2} \quad (5.116)$$

zurück, so erhält man

$$\begin{aligned} P_{\uparrow\uparrow}(t) &= 1 - \frac{1}{4} (1 - \exp(-2gt)) - \frac{1}{2} gt \exp(-gt) \\ &\quad - \frac{1}{2} g^2 \frac{1}{g^2} (1 - \exp(-gt) - gt \exp(-gt)) \\ &= \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \exp(-2gt) + \frac{1}{2} \exp(-gt). \end{aligned} \quad (5.117)$$

Die Dämpfung ist

$$g = \sin(\pi K) \frac{1}{J^{1-2K}} \frac{\Delta^2}{\omega_c^{2K}} \Gamma(1 - 2K). \quad (5.118)$$

Im Parameterbereich $K < \frac{1}{2}$ ergibt sich also, daß der Zerfall langsamer wird, wenn die Kopplungsstärke J zunimmt. Dabei ist

$$J = K_{zz} + \epsilon = K_{zz} + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J_{12}(\omega)}{\omega} . \quad (5.119)$$

Die Kopplungsstärke J setzt sich aus der direkten Wechselwirkung zwischen den Spins und der Kopplung, die durch das Bad induziert wird, zusammen. Die Hochtemperaturnäherung ist nicht zwangsläufig im Scaling-Limes, daher kann ω_c hier auch klein sein. In diesem Fall liefert die direkte Wechselwirkung K_{zz} den entscheidenden Beitrag zur Kopplungsstärke J .

5.9 Matrixmethode

In Ref. [28] wird ein Weg zur Behandlung der Dynamik beim Zwei-Spin-System aufgezeigt. Dieser soll hier kurz skizziert werden. Die konkrete Bestimmung der Dynamik ist dann beim Boson-Bad numerisch möglich (siehe [28]). Beim Spin-Bad ist teilweise auch eine analytische Bestimmung der Dynamik möglich. Der Hamiltonian des gekoppelten Qubit-Systems, bzw. des gekoppelten Spin-Systems (Index cqb für coupled qubits) lautet

$$H_{\text{cqb}} = H(\sigma_1, \sigma_2) + H_B(x_k) + H_1(\sigma_1, \sigma_2; x_k) . \quad (5.120)$$

Dabei sind die σ -Funktionen die Spin-Matrizen der Einzelspins. Mit diesem Hamiltonian ergibt sich für das Influenzfunktional

$$\begin{aligned} F[q_1, q_2, q'_1, q'_2] &= F_1[q_1, q'_1] F_2[q_2, q'_2] F_{12}[q_1, q_2, q'_1, q'_2] , \\ F_\alpha &= \exp \left[-\frac{q_{0\alpha}^2}{\pi \hbar} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^\tau ds \left(L_{2\alpha}(\tau - s) \zeta_\alpha(\tau) \zeta_\alpha(s) - i L_{1\alpha}(\tau - s) \zeta_\alpha(\tau) \chi_\alpha(s) \right) \right] , \\ F_{12} &= \exp \left[-\frac{q_{01} q_{02}}{\pi \hbar} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^\tau ds \left(L_{2w}(\tau - s) [\zeta_1(\tau) \zeta_2(s) + \zeta_2(\tau) \zeta_1(s)] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - i L_{1w}(\tau - s) [\zeta_1(\tau) \chi_2(s) + \zeta_2(\tau) \chi_1(s)] \right) \right] . \end{aligned} \quad (5.121)$$

Dabei entsprechen die Badkorrelationsfunktionen $L_{1\alpha}$ und $L_{2\alpha}$ genau den Badkorrelationsfunktionen L_1 und L_2 der Einzelspinpropagation. Die Funktionen L_{1w} und L_{2w} , die die Wechselwirkung widerspiegeln, sind durch eine spektrale Wechselwirkungsichte $J_{12}(\omega)$ modifiziert (siehe Gl. (5.42)). Pfade, für die $\zeta_1(\tau)$ und $\zeta_2(s)$ und umgekehrt ungleich Null sind, werden besonders stark gedämpft. Man hat $2n_1$ bzw. $2n_2$ Übergänge, die für den einen Spin bei t_j ($j = 1, 2, \dots, 2n_1$) stattfinden und für den anderen Spin bei u_k ($k = 1, 2, \dots, 2n_2$). Ist die Kopplung ausgeschaltet, dann erfolgen die Einzelspin-Propagationen wie in Gleichung

(5.89) beschrieben. Mit Kopplung ergeben sich dann die Wechselwirkungseffekte. Die Wahrscheinlichkeit, das System zur Zeit t wieder im Zustand $\uparrow\uparrow$ zu finden, ist dabei

$$\begin{aligned}
P_{\uparrow\uparrow}(t) = & \sum_{n_1 n_2} (-1)^{n_1+n_2} \left(\frac{\Delta_1}{2}\right)^{2n_1} \left(\frac{\Delta_2}{2}\right)^{2n_2} \int_0^t D(t_{2n_1}) \int_0^t D(u_{2n_2}) \sum_{(\zeta_{1j}, \eta_{1j})} \sum_{(\zeta_{2j}, \eta_{2j})} \\
& \tilde{F}_{n_1}^{(1)}([t_{1j}], [\zeta_{1j}], [\eta_{1j}]) \tilde{F}_{n_2}^{(2)}([u_{2k}], [\zeta_{2k}], [\eta_{2k}]) \\
& \times \tilde{G}_{n_1 n_2}([t_{1j}], [u_{2k}], [\zeta_{1j}], [\eta_{1j}], [\zeta_{2k}], [\eta_{2k}]) .
\end{aligned} \tag{5.122}$$

Die Faktoren, die sich auf den Einzelspin beziehen, sind in Kapitel 2 angegeben. Die anderen Faktoren verknüpfen Blips bzw. Blips und Sojourns von beiden Spins. Bei der Blip-Sojourn-Wechselwirkung ist es sinnvoll, gleich in zwei Faktoren aufzuspalten. Beim einen wird die Wechselwirkung von Blips mit einem gleichzeitig stattfindenden Sojourn vom anderen Spin betrachtet, beim anderen die Wechselwirkung zwischen Blips und Sojourns, die zu verschiedenen Zeiten stattfinden. Dann kann man als Analogon zur NIBA auch hier eine Näherung machen. Und zwar wird angenommen, daß die Blips von verschiedenen Pfaden nicht überlappen. Es ist also in einem NIBA-Analogon immer nur die Wechselwirkung von Blips mit dem gleichzeitig stattfindenden Sojourn des anderen Spins zu betrachten. Dieses NIBA-Analogon kann man unter der Voraussetzung $T \gg J \gg \Delta_\beta$ machen, denn dadurch wird gewährleistet, daß sich Blips der beiden Spins nicht überlappen, denn das Bad unterdrückt die Nicht-Diagonal-Zustände der einzelnen Spins. Die Wechselwirkung besteht aus der direkten Wechselwirkung und einer induzierten Wechselwirkung (siehe Gl. (5.119)). Geht man nun analog zur NIBA vor, dann erhält man aus Gl. (5.122) den Faktor

$$\begin{aligned}
& 2^{n_1} \prod_{j=1}^{n_1} \cos[\eta_{1,j-1} Q_1^{(1)}(t_{2j} - t_{2j-1}) - \eta_{2P} J(t_{2j} - t_{2j-1})] , \\
& 2^{n_2} \prod_{k=1}^{n_2} \cos[\eta_{2,k-1} Q_1^{(2)}(u_{2k} - u_{2k-1}) - \eta_{1P} J(u_{2k} - u_{2k-1})] .
\end{aligned} \tag{5.123}$$

In den Faktoren (5.123) sind η_{1P} und η_{2P} die Ladungen der Sojourns, die die Blips ζ_{2k} und die Blips ζ_{1j} überlappen. Jetzt wird eine 2×2 -Matrix $\mathbf{g}^{(\alpha)}(\lambda)$ mit den Komponenten $(g^{(\alpha)}(\lambda))_\tau^\sigma$

$$\mathbf{g}^{(\alpha)} = \begin{pmatrix} (g^{(\alpha)}(\lambda))_+^+ & (g^{(\alpha)}(\lambda))_+^- \\ (g^{(\alpha)}(\lambda))_-^+ & (g^{(\alpha)}(\lambda))_-^- \end{pmatrix} \tag{5.124}$$

eingeführt. Hier hat man, ganz analog zum Einzelspin, den Faktor

$$(g^{(\alpha)}(\lambda))_\tau^\sigma = -\frac{\Delta_\alpha^2}{2\lambda} \int_0^\infty dt e^{-\lambda t} e^{-Q_2^{(\alpha)}(t)} \cos[\tau J(t) - \sigma Q_1^{(\alpha)}(t)] . \tag{5.125}$$

Hier ist $C_n^{\alpha,\beta}$ eine Kette von Blip-Gruppen, die mit einer Blip-Gruppe vom Typ α beginnt und mit einer Blip-Gruppe vom Typ β endet. Dabei sollen n Blip-Gruppen vom Typ α sein. Dann gilt für die Laplace-Transformierte

$$P_{\uparrow\uparrow} = \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} C_n^{(1-1)} + \frac{1}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} C_n^{(2-2)} + \frac{1}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} C_n^{(1-2)} + \frac{1}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} C_n^{(2-1)}. \quad (5.127)$$

Betrachtet man nun einen bestimmten Beitrag, z.B. $P^{\alpha-\beta} = \sum C_n^{\alpha-\alpha}$. Dieser ist zusammengesetzt aus einem Produkt von $2n - 2$ aufeinanderfolgenden Blip-Gruppen. Es wechseln sich immer verschiedene Blip-Gruppen ab. Bevor man die Summation ausführt lautet das Produkt

$$(\tilde{g}^{(\alpha)})_{\tau_1}^{\sigma_1} (\tilde{g}^{(\beta)})_{\tau_2}^{\sigma_2} \dots (\tilde{g}^{(\alpha)})_{\tau_j}^{\sigma_j} (\tilde{g}^{(\beta)})_{\tau_{j+1}}^{\sigma_{j+1}} \dots (\tilde{g}^{(\alpha)})_{\tau_{2n-2}}^{\sigma_{2n-2}}. \quad (5.128)$$

Man hat jedoch die Einschränkung $\sigma_{j+1} = \tau_j$, denn der vorangehende Sojourn einer Blip-Gruppe ist gleich dem Sojourn, während dem die vorhergehende Blip-Gruppe des anderen Pfades stattfindet. Damit ergibt sich

$$P^{\alpha-\beta} = \sum_{n=0}^{\infty} (\tilde{g}^{(\alpha)})_+^{\sigma_1} (\tilde{g}^{(\beta)})_{\sigma_1}^+ \prod_{j=1}^n \sum_{\sigma_j} (\tilde{g}^{(\alpha)})_{\sigma_{2j-1}}^{\sigma_{2j-1}} (\tilde{g}^{(\beta)})_{\sigma_{2j}}^{\sigma_{2j}}. \quad (5.129)$$

Es gilt: $\sigma_{2n+1} = 1$. Man kann Gleichung (5.129) schreiben als

$$P^{\alpha-\beta} = (\tilde{g}^{(\alpha)})_+^+ \left[\tilde{\mathbf{g}}^{(\beta)} (1 - \tilde{\mathbf{g}}^{(\alpha)} \tilde{\mathbf{g}}^{(\beta)})^{-1} \right]_+^+. \quad (5.130)$$

Dies ist also ein bestimmtes Element aus der Multiplikation zweier Matrizen. Entsprechend ist

$$P^{\alpha-\alpha} = (\tilde{g}^{(\alpha)})_+^+ \left[(1 - \tilde{\mathbf{g}}^{(\beta)} \tilde{\mathbf{g}}^{(\alpha)})^{-1} \right]_+^+. \quad (5.131)$$

Der gesamte Ausdruck für $P_{\uparrow\uparrow}(\lambda)$ ist dann

$$\begin{aligned} P_{\uparrow\uparrow}(\lambda) &= \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} (\tilde{g}^{(1)})_+^+ \left[(1 - \tilde{\mathbf{g}}^{(2)} \tilde{\mathbf{g}}^{(1)})^{-1} \right]_+^+ + \frac{1}{\lambda} (\tilde{g}^{(2)})_+^+ \left[(1 - \tilde{\mathbf{g}}^{(1)} \tilde{\mathbf{g}}^{(2)})^{-1} \right]_+^+ \\ &\quad + (\tilde{g}^{(1)})_+^+ \left[\tilde{\mathbf{g}}^{(2)} (1 - \tilde{\mathbf{g}}^{(1)} \tilde{\mathbf{g}}^{(2)})^{-1} \right]_+^+ + (\tilde{g}^{(2)})_+^+ \left[\tilde{\mathbf{g}}^{(1)} (1 - \tilde{\mathbf{g}}^{(2)} \tilde{\mathbf{g}}^{(1)})^{-1} \right]_+^+. \end{aligned} \quad (5.132)$$

Der Nenner von $P_{\uparrow\uparrow}(\lambda)$, der die Dynamik bestimmt, ist gegeben durch: $1 - \text{Tr}(\tilde{\mathbf{g}}^{(1)} \tilde{\mathbf{g}}^{(2)}) + \text{Det}(\tilde{\mathbf{g}}^{(1)} \tilde{\mathbf{g}}^{(2)})$. Die Nullstellen werden durch ein Polynom 2. Grades in λ bestimmt. Man kann damit $P_{\uparrow\uparrow}(\lambda)$ weiter vereinfachen und erhält schließlich

als Ergebnis

$$\begin{aligned}
P_{\uparrow\uparrow}(\lambda) &= \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{4} \left[g_1 \left(1 + \frac{h_1}{g_1} \right) + g_2 \left(1 + \frac{h_2}{g_2} \right) \right] \frac{1}{\lambda} \frac{1}{\lambda + g_1 + g_2} \\
&\quad - \frac{1}{4} \left[g_1 \left(1 + \frac{h_1}{g_1} \right) + g_2 \left(1 + \frac{h_2}{g_2} \right) \right] \frac{1}{\lambda^2 + \lambda(g_1 + g_2) + g_1 g_2 \left(1 - \frac{h_1 h_2}{g_1 g_2} \right)} \quad (5.133) \\
&\quad - \frac{1}{2} g_1 g_2 \left[1 - \frac{h_1 h_2}{g_1 g_2} \right] \frac{1}{\lambda} \frac{1}{\lambda^2 + \lambda(g_1 + g_2) + g_1 g_2 \left(1 - \frac{h_1 h_2}{g_1 g_2} \right)} .
\end{aligned}$$

Die g - und h -Funktionen sind durch die folgenden Ausdrücke gegeben,

$$g_{\beta}(\lambda) = \Delta_{\beta}^2 \int_0^{\infty} dt \exp[-\lambda t - Q_2^{(\beta)}(t)] \cos Q_1^{(\beta)}(t) \cos(Jt) , \quad (5.134)$$

$$h_{\beta}(\lambda) = \Delta_{\beta}^2 \int_0^{\infty} dt \exp[-\lambda t - Q_2^{(\beta)}(t)] \sin Q_1^{(\beta)}(t) \sin(Jt) . \quad (5.135)$$

Für die Wahrscheinlichkeiten $P_{\uparrow\downarrow}$, $P_{\downarrow\uparrow}$ und $P_{\downarrow\downarrow}$ geht die Herleitung analog.

Kapitel 6

Zwei-Spin-System: Redfield-Methode

6.1 Hamiltonian

Betrachtet man gekoppelte Spins bzw. Qubits, dann liefert die Influenzfunktionalmethode aus Kapitel 5 gute Ergebnisse solange die Ankopplung an das Bad nicht zu schwach ist. Um den Parameterbereich zu vervollständigen wird die Dynamik zweier gekoppelter Spins bzw. Qubits im Grenzfall der schwachen Badankopplung mit einem Redfield-Algorithmus berechnet. Die Anregung dazu geht auf Ref. [29] zurück. Die Qubits können dabei entweder an das gleiche Bad oder an verschiedene Bäder koppeln (siehe Abbildungen 6.1 und 6.2). Der betrachtete Hamiltonian, der sich aus Systemanteil, Wechselwirkung und Badanteil zusammensetzt, lautet hier

$$H = H_{2\text{qb}} + \frac{1}{2}\sigma_z^{(1)}X_1 + \frac{1}{2}\sigma_z^{(2)}X_2 + H_B . \quad (6.1)$$

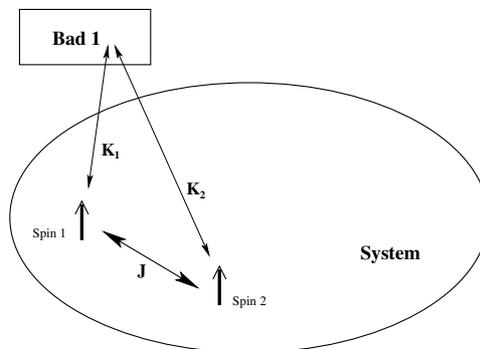


Abbildung 6.1: Zwei Spins wechselwirken untereinander und mit einem Bad

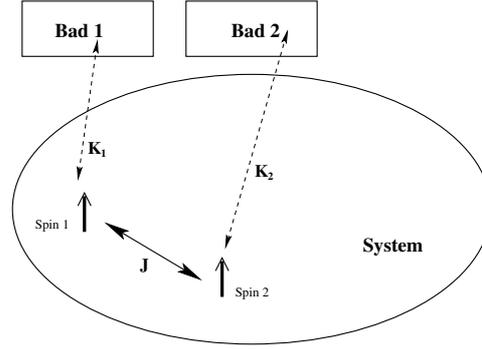


Abbildung 6.2: Zwei Spins wechselwirken untereinander mit jeweils einem Bad

Im Folgenden wird exemplarisch im System-Hamiltonian die σ_y -Kopplung der beiden Spins gewählt:

$$H_{2\text{qb}} = -\frac{\Delta^{(1)}}{2}\sigma_x^{(1)} - \frac{\Delta^{(2)}}{2}\sigma_x^{(2)} - \frac{E_z^{(1)}}{2}\sigma_z^{(1)} - \frac{E_z^{(2)}}{2}\sigma_z^{(2)} + \frac{J}{2}\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}. \quad (6.2)$$

Die Tunnelaufspaltungen der einzelnen Qubits sind $\Delta^{(1)}$ und $\Delta^{(2)}$, der Bias ist jeweils $E_z^{(1)}$ und $E_z^{(2)}$. Der Parameter J charakterisiert die Stärke der direkten Wechselwirkung zwischen den beiden Qubits. Die Ankopplung an die Badmoden wird im Hamiltonian (6.1) durch X_1 und X_2 ausgedrückt. Im Folgenden wird für das Wärmebad ein bosonisches Bad gewählt. Man kann den Hamiltonian dann insgesamt wie folgt darstellen

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} s - \epsilon & -\Delta^{(2)} & -\Delta^{(1)} & -J \\ -\Delta^{(2)} & \Delta s - \Delta\epsilon & J & -\Delta^{(1)} \\ -\Delta^{(1)} & J & -\Delta s + \Delta\epsilon & -\Delta^{(2)} \\ -J & -\Delta^{(1)} & -\Delta^{(2)} & -s + \epsilon \end{pmatrix} + H_B. \quad (6.3)$$

Dabei ist $X_1 + X_2 = s$, $X_1 - X_2 = \Delta s$, $E_z^{(1)} + E_z^{(2)} = \epsilon$ und $E_z^{(1)} - E_z^{(2)} = \Delta\epsilon$. In der Basis der Triplettsingulett-Zustände

$$\Psi_1 = |\uparrow\uparrow\rangle = (1, 0, 0, 0)^T, \quad (6.4)$$

$$\Psi_2 = (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2} = (0, 1, 0, 0)^T, \quad (6.5)$$

$$\Psi_3 = |\downarrow\downarrow\rangle = (0, 0, 1, 0)^T \quad (6.6)$$

und

$$\Psi_4 = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2} = (0, 0, 0, 1)^T \quad (6.7)$$

nimmt der Hamiltonian die folgende Form an

$$H'_{\text{SB}} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \epsilon - s & \eta & J & -\Delta\eta \\ \eta & -J & \eta & -\Delta\epsilon + \Delta s \\ J & \eta & -\epsilon + s & \Delta\eta \\ -\Delta\eta & -\Delta\epsilon + \Delta s & \Delta\eta & J \end{pmatrix} + H_B. \quad (6.8)$$

Dabei ist $(\Delta^{(1)} + \Delta^{(2)})/\sqrt{2} = \eta$ und $(\Delta^{(1)} - \Delta^{(2)})/\sqrt{2} = \Delta\eta$. Zur Berechnung der Dynamik ist es vorteilhaft, in die Eigenbasis zu wechseln. Ferner beschränken wir uns auf die Bedingungen $\Delta\eta = 0$, d.h. die beiden Tunnel-Aufspaltungen sind gleich groß und $\Delta\epsilon = 0$, d.h. gleiche Biasstärken. In der Eigenbasis hat man folgende Energien und normierte Eigenvektoren:

$$|1\rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{E(E+J)}} (E+J+\epsilon, \quad 2\eta, \quad E+J-\epsilon, \quad 0)^T \quad (6.9)$$

zur Energie $-\frac{1}{2}\sqrt{\epsilon^2 + J^2 + 2\eta^2} = -\frac{1}{2}E$,

$$|2\rangle = (0, \quad 0, \quad 0, \quad 1)^T \quad (6.10)$$

zur Energie $-\frac{1}{2}J$,

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\eta^2 + \epsilon^2}} (\eta, \quad -\epsilon, \quad -\eta, \quad 0)^T \quad (6.11)$$

zur Energie $\frac{1}{2}J$ und

$$|4\rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{E(E-J)}} (E-J-\epsilon, \quad -2\eta, \quad E-J+\epsilon, \quad 0)^T \quad (6.12)$$

zur Energie $\frac{1}{2}\sqrt{\epsilon^2 + J^2 + 2\eta^2} = \frac{1}{2}E$.

Die zeitliche Änderung der Dichtematrix wird durch die Redfield-Gleichungen

$$\dot{\rho}_{nm}(t) = -i\omega_{nm}\rho_{nm}(t) - \sum_{k,l} R_{nmkl}\rho_{kl}(t) \quad (6.13)$$

bestimmt. Dabei beschreibt der erste Term die reversible Dynamik in Abhängigkeit von den Übergangsfrequenzen ω_{nm} und der zweite Term beschreibt die Relaxation. Der Redfield-Tensor läßt sich schreiben als

$$R_{nmkl} = \delta_{lm} \sum_r \Gamma_{nrrk}^+ + \delta_{nk} \sum_r \Gamma_{lrrm}^- - \Gamma_{lmnk}^+ - \Gamma_{lmnk}^- \quad (6.14)$$

Die Raten sind durch die Ausdrücke

$$\Gamma_{lmnk}^+ = \hbar^{-2} \int_0^\infty dt e^{-i\omega_{nk}t} \langle \tilde{H}_{I,lm}(t) \tilde{H}_{I,nk}(0) \rangle \quad (6.15)$$

und

$$\Gamma_{lmnk}^- = \hbar^{-2} \int_0^\infty dt e^{-i\omega_{lm}t} \langle \tilde{H}_{I,lm}(0) \tilde{H}_{I,nk}(t) \rangle \quad (6.16)$$

gegeben. Dabei ist $\tilde{H}_I(t) = \exp(iH_B t/\hbar) H_I \exp(-iH_B t/\hbar)$ die Wechselwirkung im Wechselwirkungsbild und die Klammern $\langle \dots \rangle$ bedeuten thermische Mittelung über die Bad-Freiheitsgrade.

6.2 Algorithmus

Der verwendete Algorithmus berechnet zuerst die Eigenwerte und Eigenvektoren in Abhängigkeit von J , $E_z^{(1)}$, $E_z^{(2)}$, $\Delta^{(1)}$ und $\Delta^{(2)}$ (siehe Hamiltonian (6.2)) bzw. in Abhängigkeit von J , ϵ und η (siehe Eigenvektoren (6.9) bis (6.12)). Mit den entsprechenden Normierungen dieser Eigenvektoren können dann für die Raten-Berechnung (Gl. (6.15) und Gl. (6.16)) die Ankopplungen aus Gl. (6.3) bzw. Gl. (6.8) in die Eigenbasis transformiert werden. Die Abbildungen 7.14 bis 7.21 zeigen die Dynamik bevorzugt im Zustandssystem $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$. Die Dichtematrix, die sich aus dem Anfangszustand $p(\uparrow\uparrow) = 1.0$ entwickelt, muß also noch in der folgenden Art in die Eigenbasis (6.9) bis (6.12) transformiert werden. Die Transformation der Dichtematrix aus der alten Basis

$$\hat{\rho} = \sum_{\mu,\nu} \rho_{\mu\nu} |\mu\rangle\langle\nu| \quad (6.17)$$

erfolgt dabei durch Einschleiben einer Eins (der neuen Basis)

$$|\nu\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\nu\rangle \quad (6.18)$$

und läßt sich damit als

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \sum_{\mu,\nu} \rho_{\mu\nu} |\mu\rangle\langle\nu| \\ &= \sum_{\mu,\nu} \rho_{\mu\nu} \sum_{i,j} |i\rangle\langle i|\mu\rangle\langle\nu|j\rangle\langle j| \\ &= \sum_{i,j} \sum_{\mu,\nu} \rho_{\mu\nu} \chi_{i\mu} \chi_{j\nu}^* |i\rangle\langle j| \end{aligned} \quad (6.19)$$

darstellen. Dabei sind

$$\langle i|\nu\rangle = \chi_{i\nu} = \chi_{\nu i}^* . \quad (6.20)$$

Dann kann die Dynamik in dieser Basis berechnet werden und muß anschließend wieder ins gewünschte Basissystem $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$ zurücktransformiert werden. Der Algorithmus liefert dabei die Dynamik außerdem in der Eigenbasis und in der Singulett/Triplett-Basis (6.4) bis (6.7). Er liefert die Dynamik für die Kopplung an ein Bad (Abbildung 6.1) und an verschiedene Bäder (Abbildung 6.2). Um numerisch die Dynamik zu berechnen wird die Zeit in möglichst kleine Zeitschritte diskretisiert, die eine Berechnung in vernünftiger Computing-Zeit zulassen. Pro Zeiteinheit wird dann die Veränderung der Dichtematrix berechnet. Man muß zum Beispiel für sehr große interne Kopplungen der Qubits, also für großes J , mehr Zeitschritte verwenden, denn große interne Kopplungen bewirken eine hochfrequente Modulation der Dynamik. Der Redfield-Tensor hat als wesentliche Einträge die Kopplungen ans Bad (in die Eigenbasis transformiert), die

wiederum die spektrale Dichtefunktion enthalten. Diese wird vom Algorithmus integriert. Es gilt hierbei, ein bestimmtes Integral zu berechnen, wobei die Integration über eine Polstelle erfolgt.

Beim Boson-Bad gilt es, die Fourier-Transformierte des folgenden Ausdrucks zu bilden

$$\int_0^\infty dt e^{-i\Omega t} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left(\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \cos(\omega t) - i \sin(\omega t) \right). \quad (6.21)$$

Beim Spin-Bad benötigt man analog die Fourier-Transformierte des folgenden Ausdrucks

$$\int_0^\infty dt e^{-i\Omega t} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left(\cos(\omega t) - i \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \sin(\omega t) \right). \quad (6.22)$$

Das Integral (6.21) kann als

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dt e^{-i\Omega t} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) e^{i\omega t} \\ & + \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dt e^{-i\Omega t} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) e^{-i\omega t} \\ & + \frac{1}{2\pi} i \int_0^\infty dt e^{-i\Omega t} \int_0^\infty d\omega J(\omega) e^{-i\omega t} \\ & - \frac{1}{2\pi} i \int_0^\infty dt e^{-i\Omega t} \int_0^\infty d\omega J(\omega) e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (6.23)$$

geschrieben werden. Mit der Beziehung

$$F[f(x); \zeta] = \sqrt{2\pi} L[f(x); -i\zeta] + \sqrt{2\pi} L[f(-x); i\zeta] \quad (6.24)$$

zwischen Laplace-Transformationen und Fourier-Transformationen ergibt sich dann für den Imaginärteil des Ausdrucks (6.21)

$$\text{Im} \sim \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2 - \Omega^2} \left[\Omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) - \omega \right] \quad (6.25)$$

und für den Realteil des Ausdrucks (6.21)

$$\text{Re} \sim \frac{\hbar}{2} J(\Omega) \left[\coth\left(\frac{\hbar\Omega}{2k_B T}\right) - 1 \right]. \quad (6.26)$$

Mit einem entsprechenden numerischen Verfahren gehen diese Integrationen jedoch trotzdem relativ zügig. Einige Abbildungen (7.14 bis 7.21) folgen im Abschnitt 7.3.

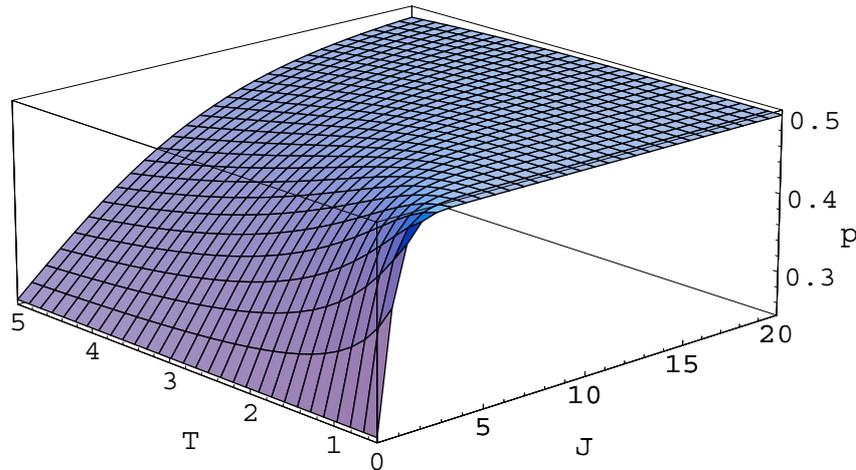


Abbildung 6.3: σ_z -Kopplung: $p_{\uparrow\uparrow}$ nach langer Zeit, im thermischen Gleichgewicht (Näherung (6.27))

6.3 Thermisches Gleichgewicht

Ist das System nach langen Zeiten im thermischen Gleichgewicht angekommen, so ergeben sich für die Wahrscheinlichkeiten (in den folgenden Abbildungen $p_{\uparrow\uparrow}$) die dargestellten Abhängigkeiten. In Abbildung 6.3 ist der angenäherte und in Abbildung 6.4 ist der genaue Verlauf dargestellt. Der angenäherte Verlauf in Abbildung 6.3 läßt sich durch folgende Beziehung beschreiben

$$p_{\uparrow\uparrow}(t \rightarrow \infty) = 1/4 + 1/4 \tanh(J/2T) . \quad (6.27)$$

In Abbildung 6.5 ist der Verlauf für die σ_y -Kopplung dargestellt. Dieser ist für kleine Temperaturen dem der σ_z -Kopplung ähnlich. Bei größeren Temperaturen wird die Abweichung größer. Für die σ_y -Kopplung ergeben sich bei sehr großen internen Kopplungen die Wahrscheinlichkeiten (z.B. $p_{\uparrow\uparrow}$) zu 0.25.

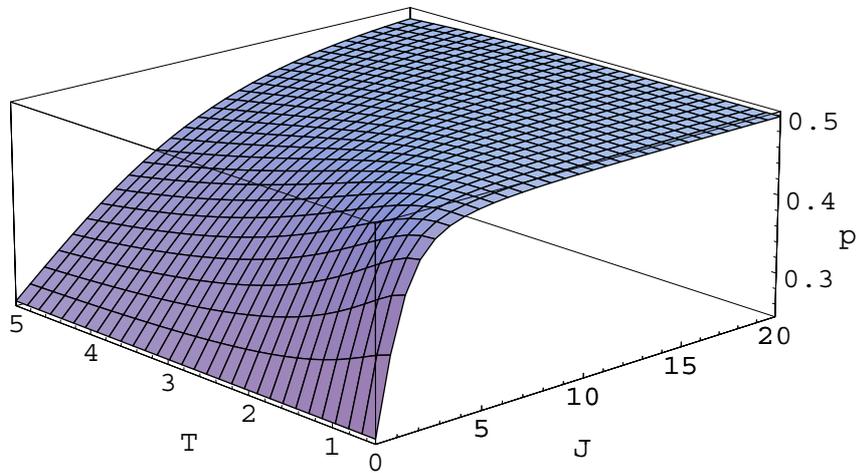


Abbildung 6.4: σ_z -Kopplung: $p_{\uparrow\uparrow}$ nach langer Zeit, im thermischen Gleichgewicht (genaue Rechnung)

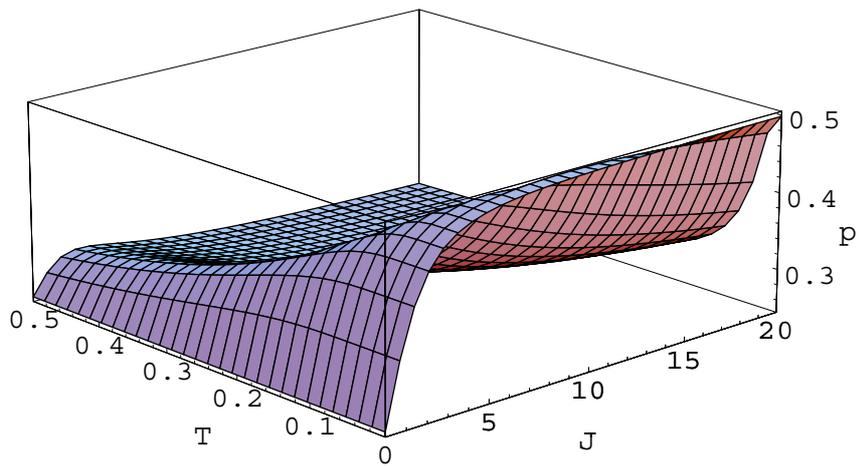


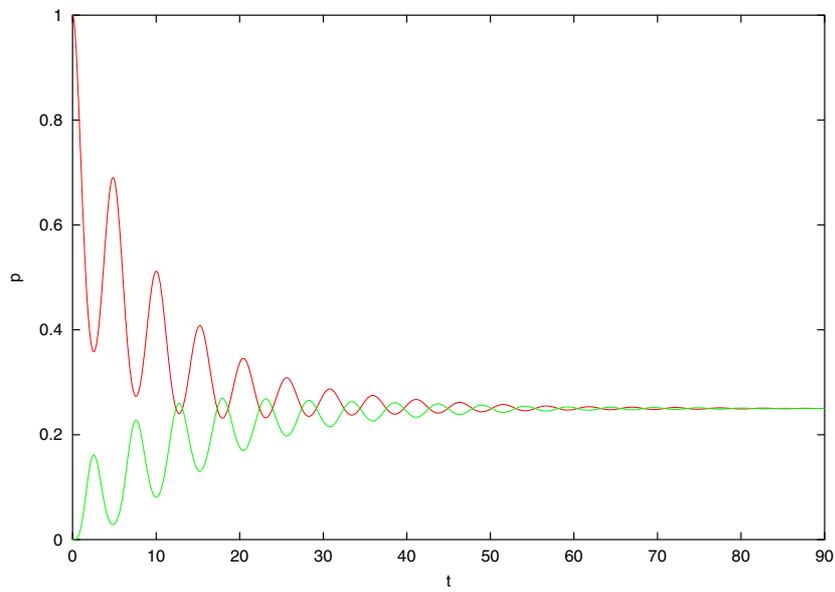
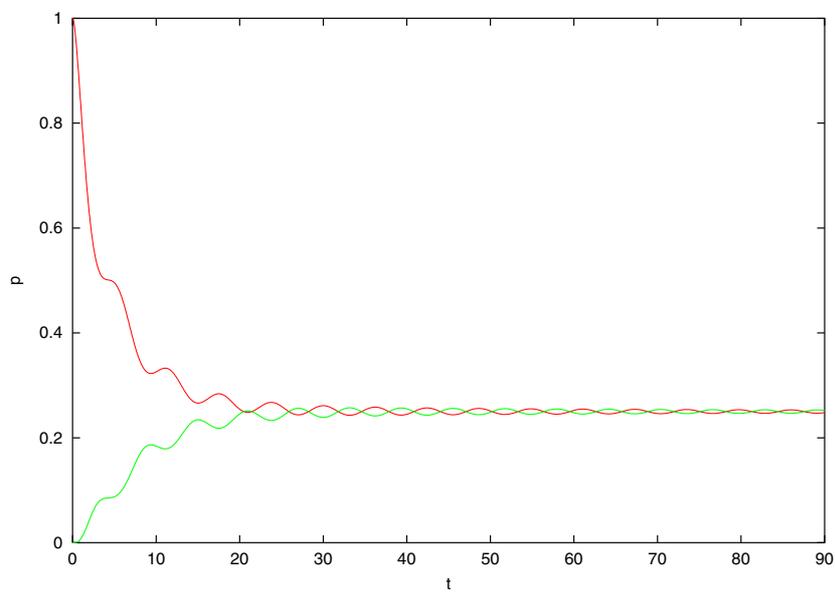
Abbildung 6.5: σ_y -Kopplung: $p_{\uparrow\uparrow}$ nach langer Zeit (im thermischen Gleichgewicht)

Kapitel 7

Zwei-Spin-System: Resultate

7.1 Spin-Bad mit Influenzfunktionalmethode

Die Abbildungen 7.1 bis 7.10 zeigen die Dynamik für ein Zwei-Spin-System, das an ein Spin-Bad koppelt. Die beiden System-Spins koppeln über eine σ_z -Kopplung. Sie koppeln beide an dasselbe Wärmebad. Die Tunnelaufspaltung ist dabei für beide System-Spins $\Delta = 1.0$ und der Cutoff liegt bei $\omega_c = 20.0$. Es liegt kein Bias an. Die interne Wechselwirkung J , die Ankopplung an das Bad K und die Temperatur T sind in den Abbildungen angegeben. Das System wird immer im Zustand $|\uparrow\uparrow\rangle$ präpariert. Die Stärke der Ankopplung der System-Spins an das Bad hat einen großen Einfluß auf die Dynamik. Dieser wird im Vergleich der Abbildungen 7.1 und 7.2 deutlich. Die Kopplung der System-Spins untereinander ist in diesen beiden Abbildungen jeweils zu $J = 1.0$ gesetzt. Die charakteristische Abhängigkeit der Dynamik von der internen Kopplung J wird anhand der Abbildungen 7.3 bis 7.9 verdeutlicht. Diese Kopplung wird dabei schrittweise erhöht. Der Zerfall wird langsamer, wenn die Kopplungsstärke J zunimmt. Für eine große interne Kopplung J können die Ergebnisse mit Gleichung (5.117) und (5.118) verglichen werden. Die Ankopplung an das Wärmebad ist in den Abbildungen 7.3 bis 7.8 jeweils zu $K = 0.1$ und in der Abbildung 7.9 zu $K = 0.3$ gesetzt.

Abbildung 7.1: $J_z = 1.0$, $K = 0.1$ und $T = 10000.0$; p_{\uparrow} und p_{\downarrow} Abbildung 7.2: $J_z = 1.0$, $K = 0.3$ und $T = 10000.0$; p_{\uparrow} und p_{\downarrow}

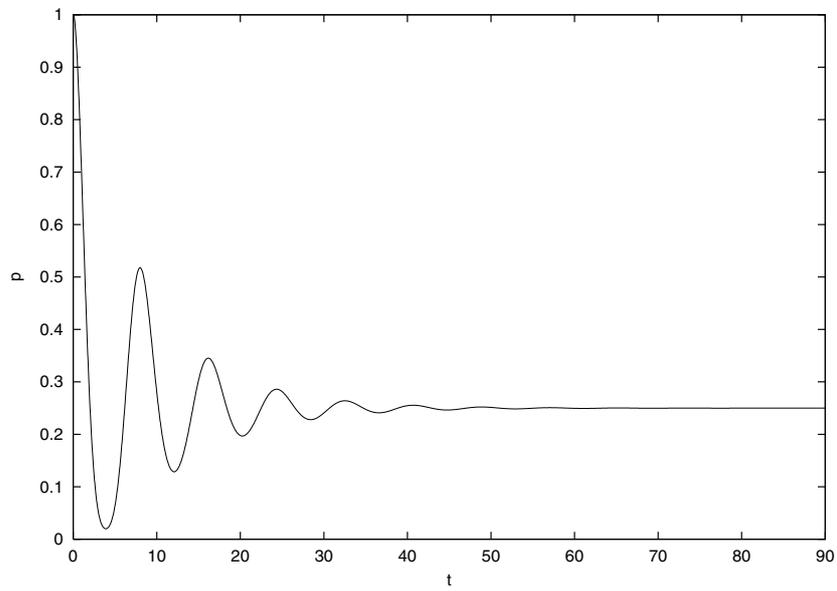


Abbildung 7.3: $J_z = 0.0$, $K = 0.1$ und $T = 10000.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$

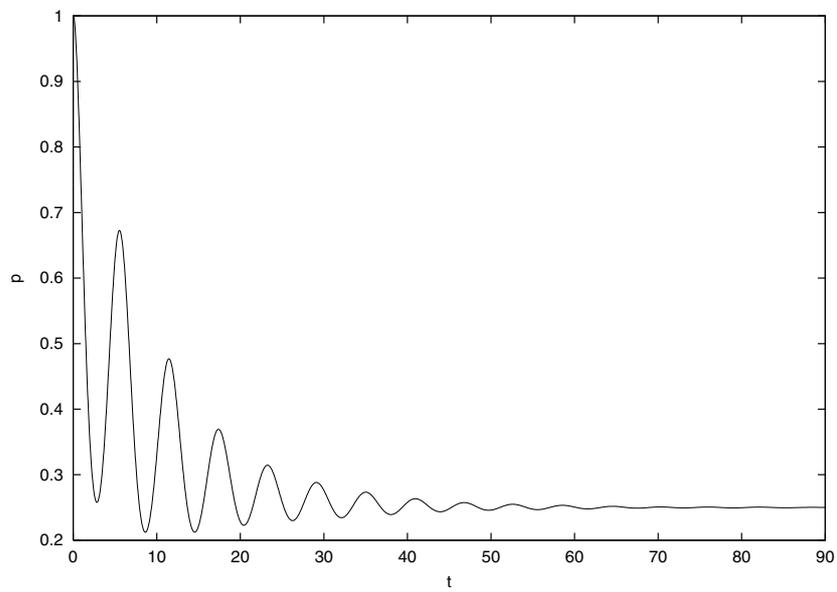
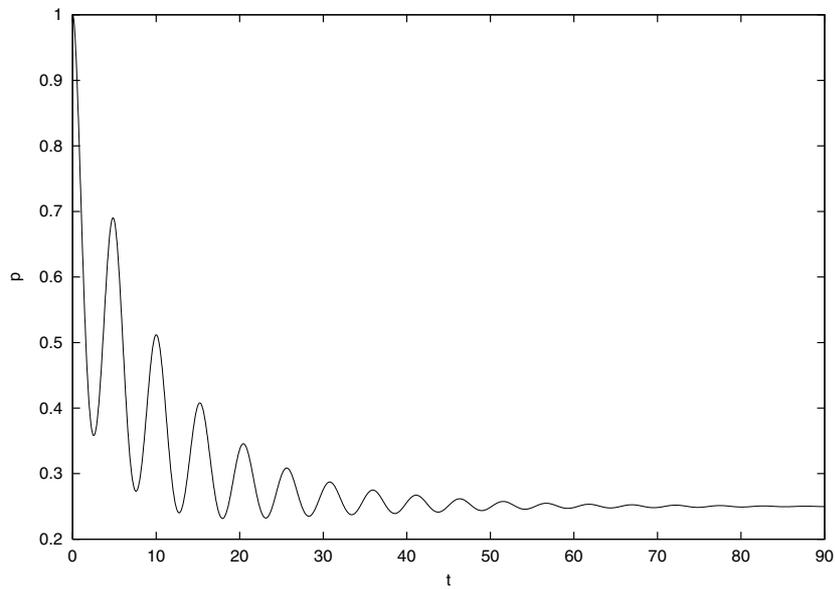
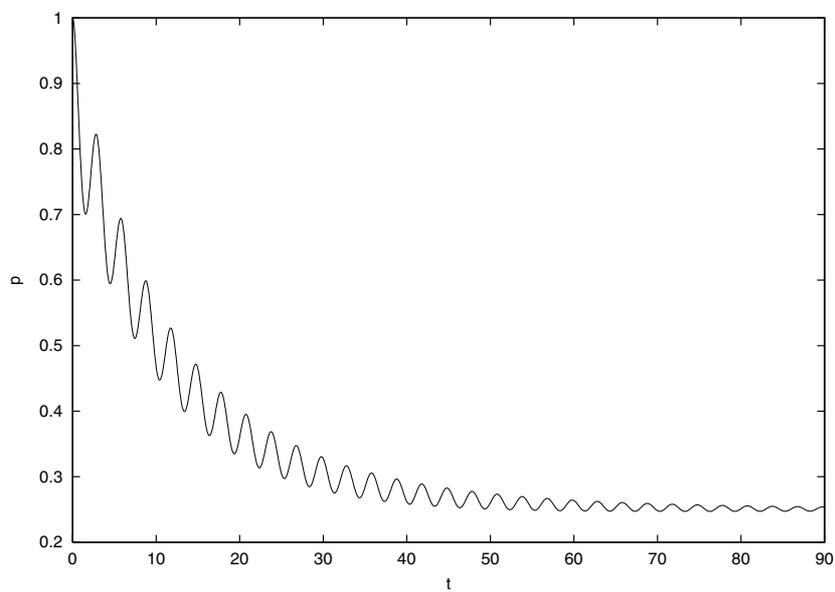


Abbildung 7.4: $J_z = 0.8$, $K = 0.1$ und $T = 10000.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$

Abbildung 7.5: $J_z = 1.0$, $K = 0.1$ und $T = 10000.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$ Abbildung 7.6: $J_z = 2.0$, $K = 0.1$ und $T = 10000.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$

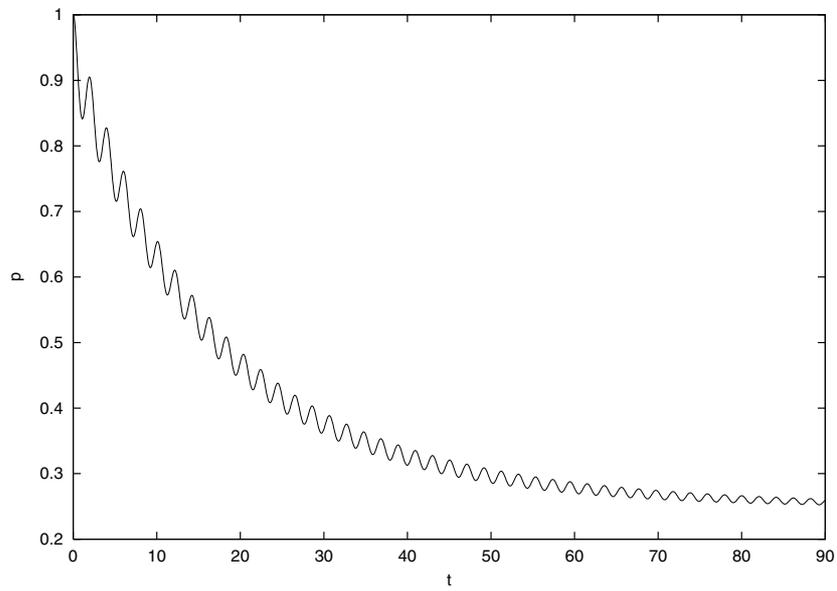


Abbildung 7.7: $J_z = 3.0$, $K = 0.1$ und $T = 10000.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$

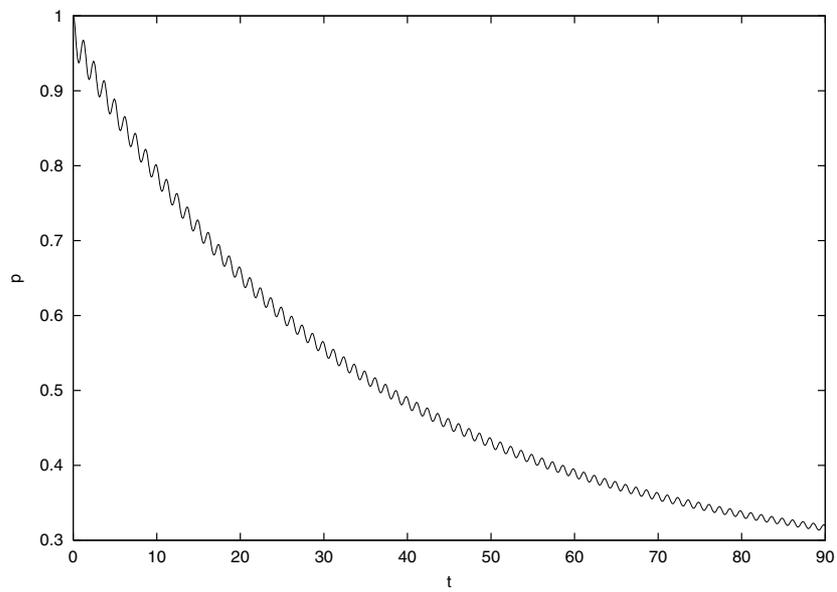


Abbildung 7.8: $J_z = 5.0$, $K = 0.1$ und $T = 10000.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$

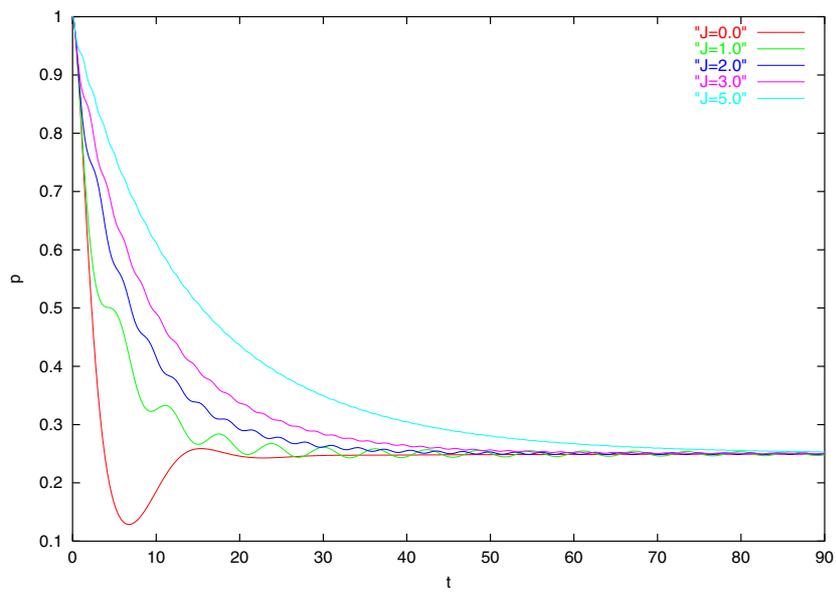


Abbildung 7.9: $K = 0.3$ und $T = 10000.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$

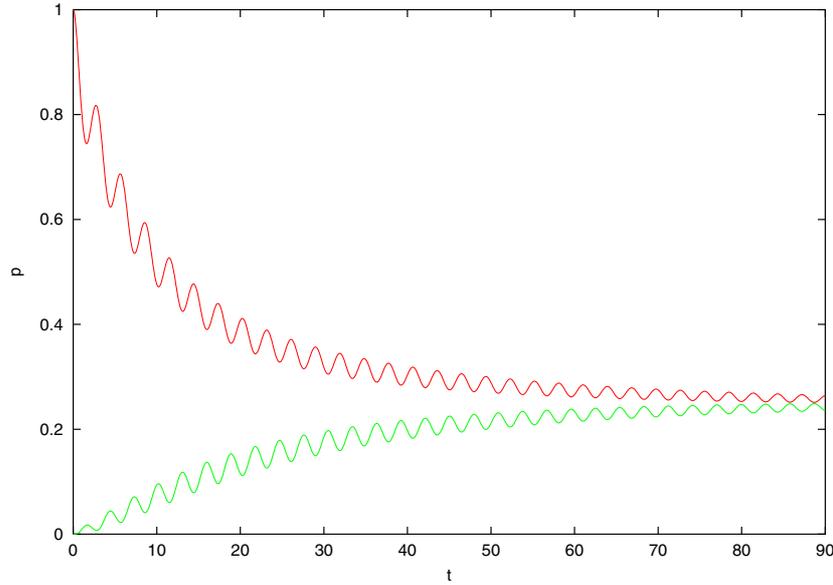


Abbildung 7.10: $J_z = 2.0$, $K_1 = 0.05$, $K_2 = 0.4$ und $T = 10000.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow}$

7.2 Boson-Bad mit Influenzfunktionalmethode

Die Abbildungen 7.11 bis 7.13 zeigen die Dynamik eines Zwei-Spin-Systems, das an ein Boson-Bad koppelt. Die beiden System-Spins koppeln untereinander über eine σ_z -Kopplung. Sie koppeln an dasselbe Wärmebad. Die Tunnelaufspaltung ist dabei für beide System-Spins $\Delta = 1.0$ und der Cutoff liegt bei $\omega_c = 20.0$. Es liegt kein Bias an. Die interne Wechselwirkung J , die Ankopplung an das Bad K und die Temperatur T sind in den Abbildungen angegeben. Das System wird immer im Zustand $|\uparrow\uparrow\rangle$ präpariert. Die charakteristische Abhängigkeit der Dynamik von der internen Kopplung J wird anhand der Abbildungen 7.11 bis 7.13 deutlich. Diese Kopplung wird dabei schrittweise erhöht. Je größer J dabei wird, desto mehr nehmen die Korrelationen zwischen den System-Spins zu. Für große Zeiten können die Wahrscheinlichkeiten mit Gleichung (6.27) bzw. mit der Abbildung 6.4 verglichen werden.

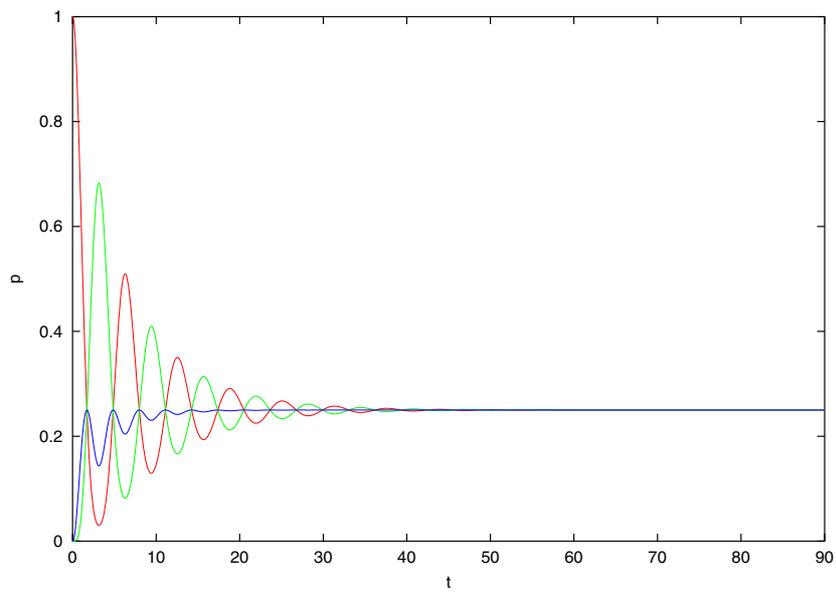


Abbildung 7.11: $J_z = 0.0$, $K = 0.005$ und $T = 10.0$; rot: $p_{\uparrow\uparrow}$, blau: $p_{\uparrow\downarrow}$ und grün: $p_{\downarrow\downarrow}$

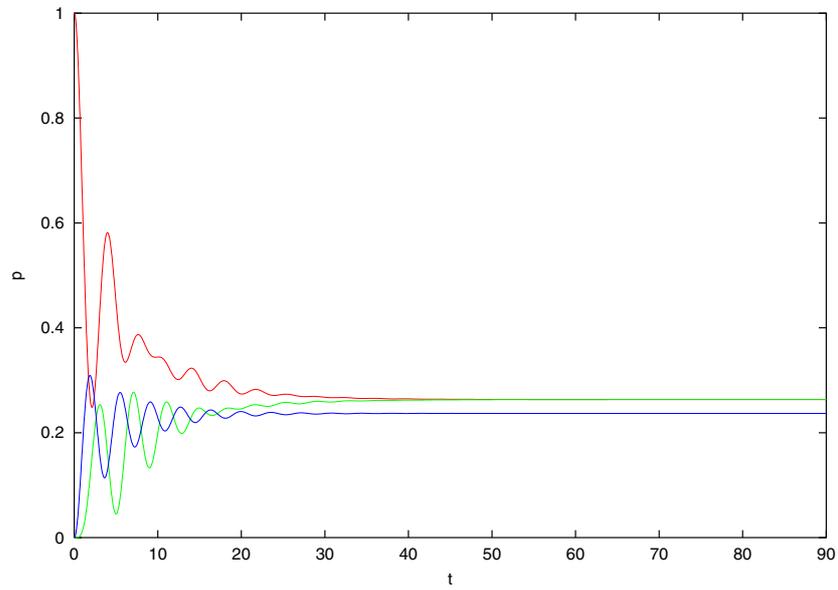


Abbildung 7.12: $J_z = -1.0$, $K = 0.005$ und $T = 10.0$; rot: $p_{\uparrow\uparrow}$, blau: $p_{\uparrow\downarrow}$ und grün: $p_{\downarrow\downarrow}$

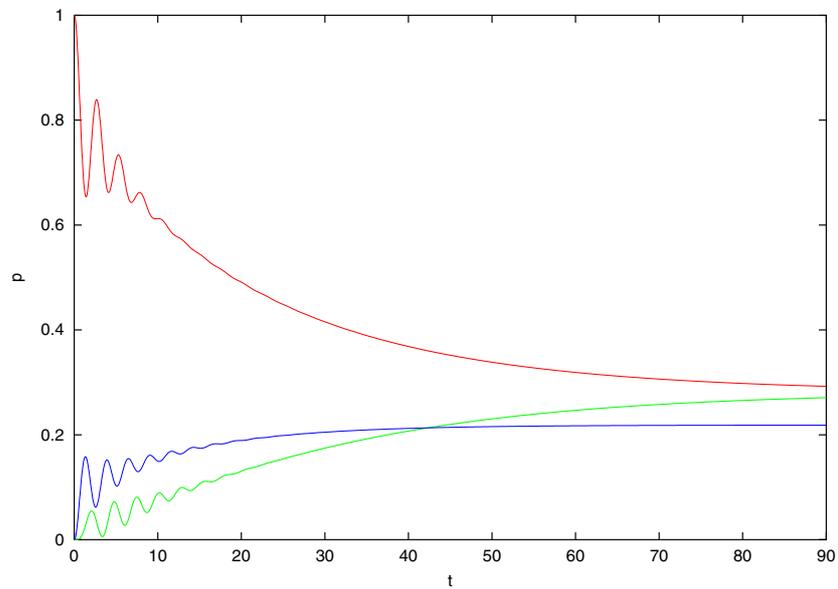


Abbildung 7.13: $J_z = -2.0$, $K = 0.005$ und $T = 10.0$; rot: $p_{\uparrow\uparrow}$, blau: $p_{\uparrow\downarrow}$ und grün: $p_{\downarrow\downarrow}$

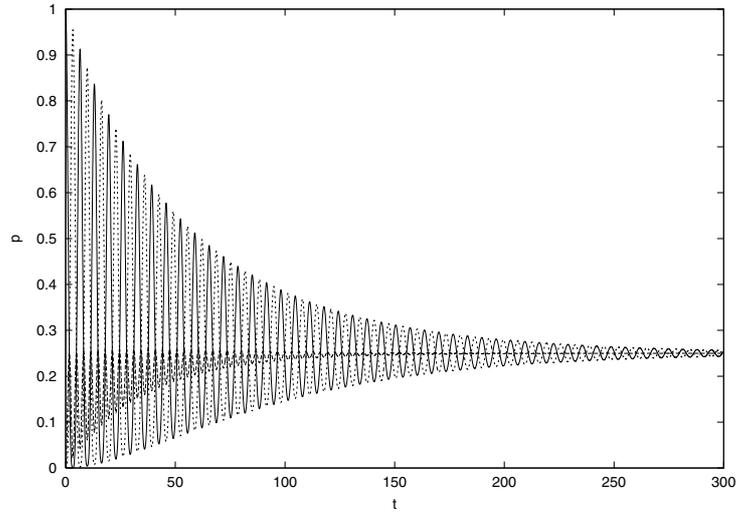


Abbildung 7.14: $J = 0.0$, $K = 0.01$, $T = 0.1$, $\epsilon = 0.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$, $p_{\uparrow\downarrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow}$

7.3 Boson-Bad mit Redfield-Methode

Die Abbildungen 7.14 bis 7.36 zeigen die Dynamik eines Zwei-Spin-Systems, das an ein Boson-Bad koppelt. Die beiden Spins koppeln mit gleicher spektraler Dichte an verschiedene Bäder. In den Abbildungen 7.14 bis 7.20 wird die Dynamik der gekoppelten Spins in Abhängigkeit der Kopplungsstärke J_y gezeigt. Die Modulationseffekte durch die Kopplung der Spins werden deutlich, ebenso die zunehmende Wahrscheinlichkeit von $p_{\uparrow\uparrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow}$ auf Kosten der anderen beiden Zustände bei zunehmendem J . Man stellt Übereinstimmung mit den Werten, die in Abbildung 6.5 dargestellt sind, fest. Abbildung 7.21 zeigt ein System mit Bias. Bei den Abbildungen ist die Zeit zu jeweils 0.01 Zeiteinheiten diskretisiert, die beiden Tunnelaufspaltungen der Spins sind $\Delta = 1.0$ und der Cutoff liegt bei $\omega_c = 50.0$. Das System wird jeweils im Zustand $|\uparrow\uparrow\rangle$ präpariert. In den Abbildungen liegen $p_{\uparrow\downarrow}$ und $p_{\downarrow\uparrow}$ übereinander. In den Abbildungen 7.22 bis 7.26 werden die verschiedenen Kopplungen über σ_x , σ_y und σ_z verglichen. Diese Abbildungen können wiederum direkt mit den Abbildungen 5.3 bis 5.8 verglichen werden.

In den Abbildungen 7.33 bis 7.36 wird die Dynamik der gekoppelten Spins in Abhängigkeit der Temperatur T gezeigt.

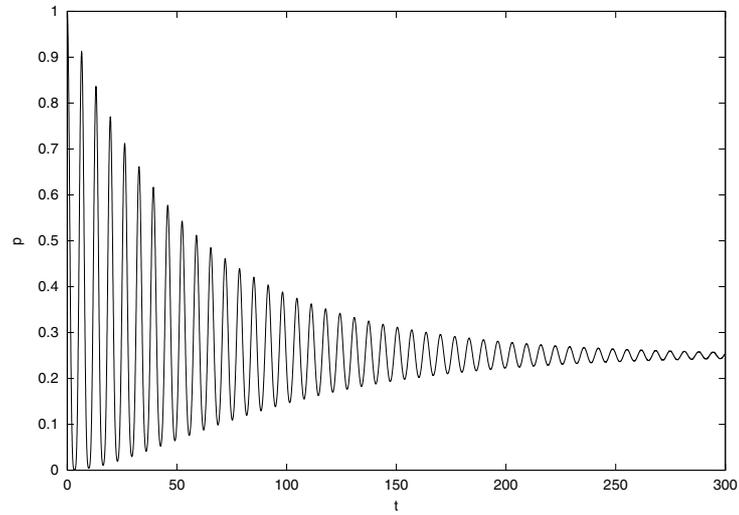


Abbildung 7.15: $J = 0.0$, $K = 0.01$, $T = 0.1$, $\epsilon = 0.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$

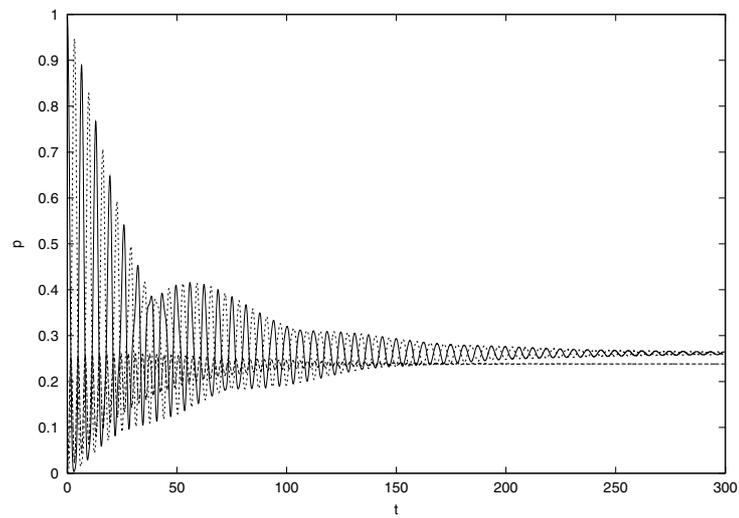


Abbildung 7.16: $J_y = 0.1$, $K = 0.01$, $T = 0.1$, $\epsilon = 0.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$, $p_{\downarrow\downarrow}$ und $p_{\uparrow\downarrow}$

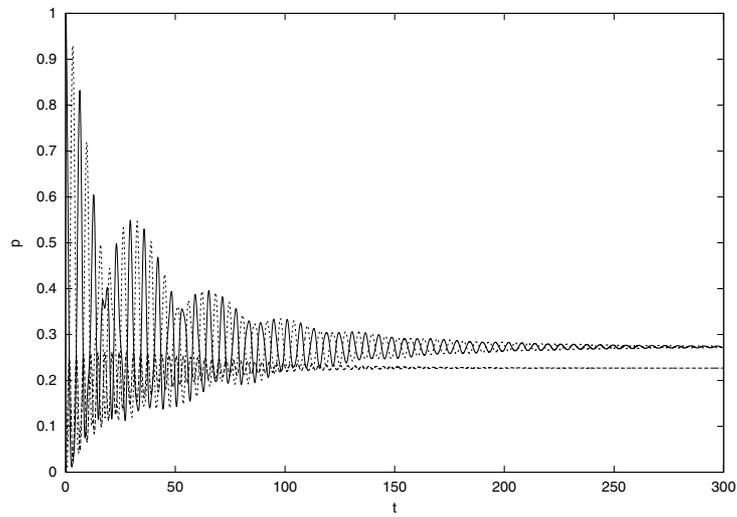


Abbildung 7.17: $J_y = 0.2$, $K = 0.01$, $T = 0.1$, $\epsilon = 0.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$, $p_{\downarrow\downarrow}$ und $p_{\uparrow\downarrow}$

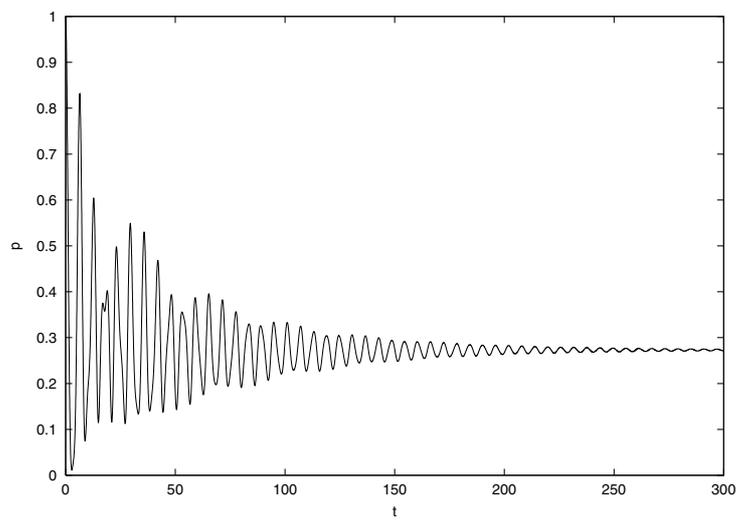


Abbildung 7.18: $J_y = 0.2$, $K = 0.01$, $T = 0.1$, $\epsilon = 0.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$

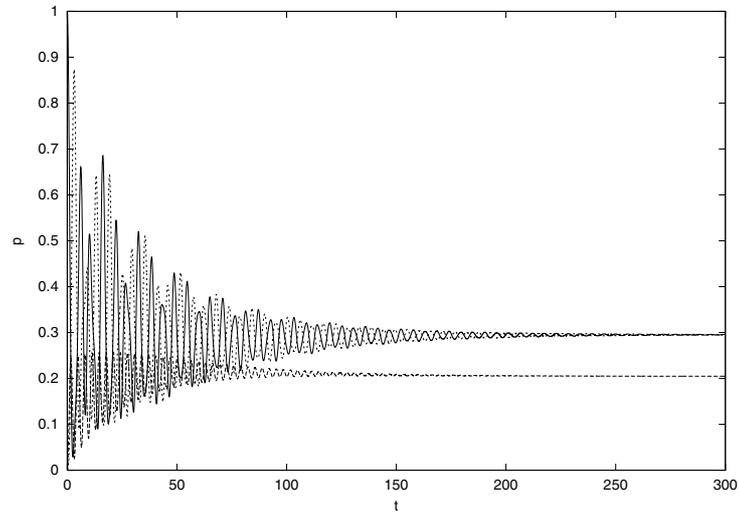


Abbildung 7.19: $J_y = 0.4$, $K = 0.01$, $T = 0.1$, $\epsilon = 0.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$, $p_{\downarrow\downarrow}$ und $p_{\uparrow\downarrow}$

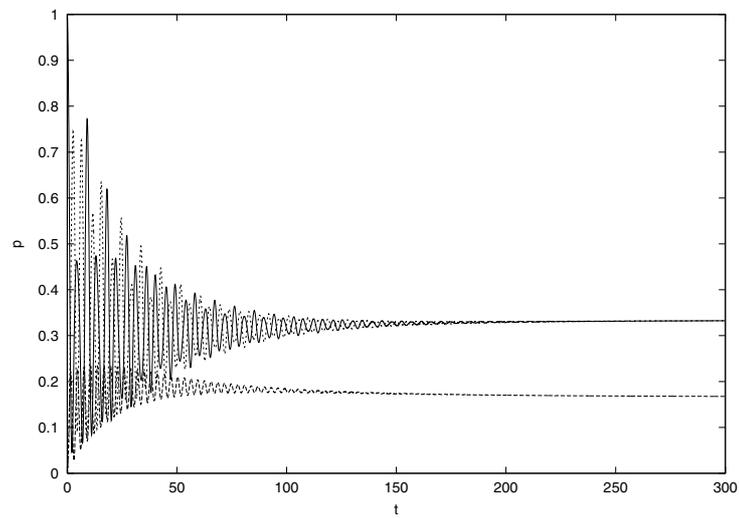


Abbildung 7.20: $J_y = 0.8$, $K = 0.01$, $T = 0.1$, $\epsilon = 0.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$, $p_{\downarrow\downarrow}$ und $p_{\uparrow\downarrow}$

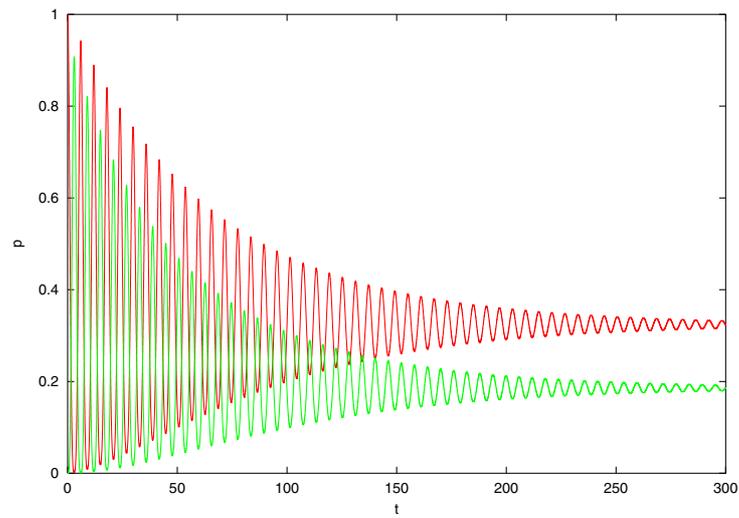


Abbildung 7.21: $J = 0.0$, $K = 0.01$, $T = 0.1$, $\epsilon = 0.3$; $p_{\uparrow\uparrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow}$

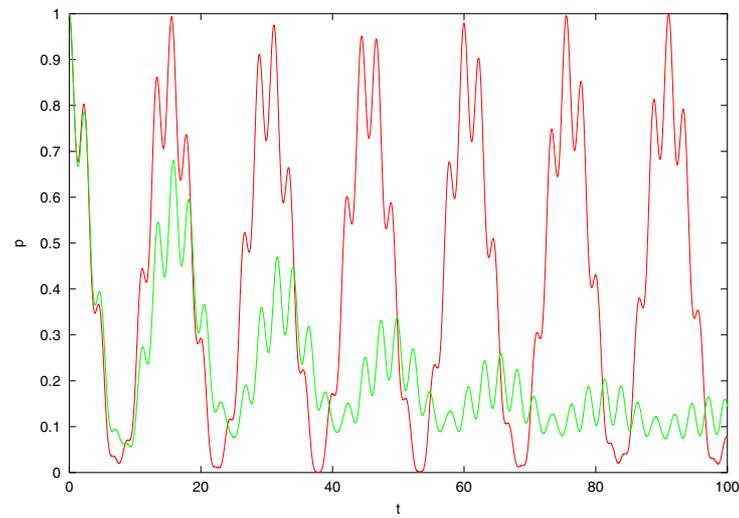


Abbildung 7.22: $T = 0.1$, rot: freie Propagation, grün: $K = 0.01$, Kopplung über σ_z , $J_z = 1.0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

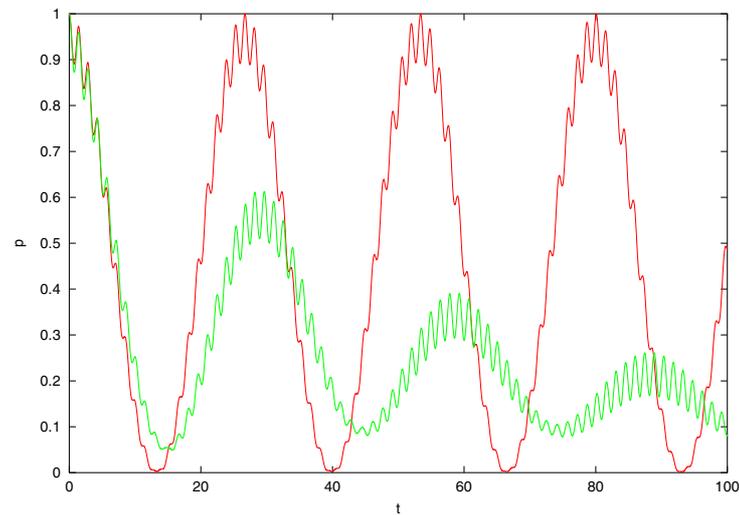


Abbildung 7.23: $T = 0.1$, rot: freie Propagation, grün: $K = 0.01$, Kopplung über σ_z , $J_z = 2.0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

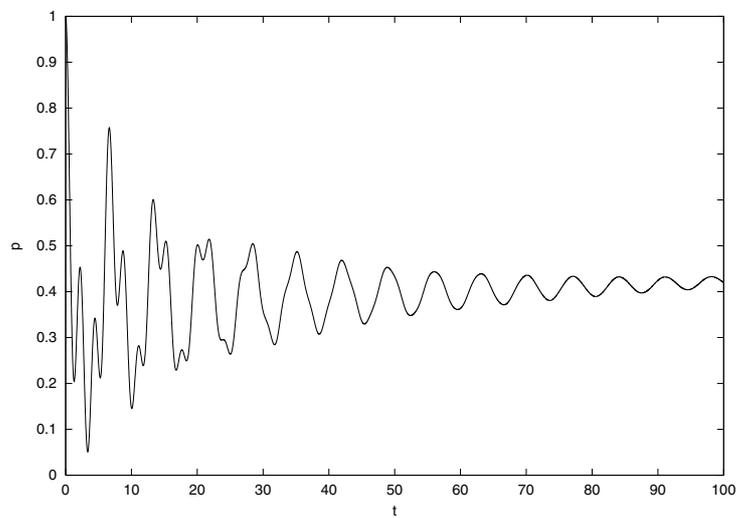


Abbildung 7.24: $T = 0.1$, $K = 0.01$, Kopplung über σ_x , $J_x = 1.0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

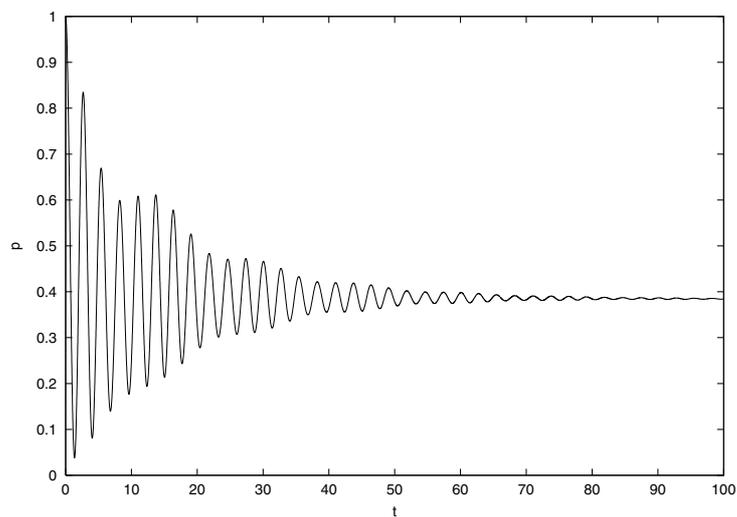


Abbildung 7.25: $T = 0.1$, $K = 0.01$, Kopplung über σ_y , $J_y = 1.0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

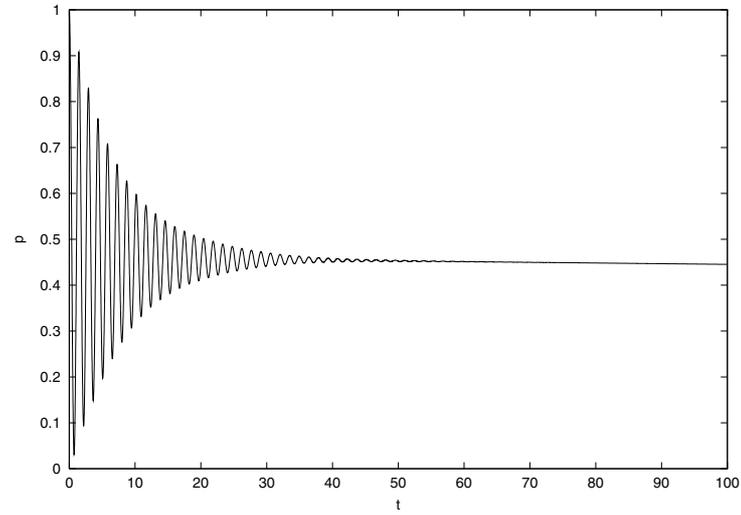


Abbildung 7.26: $T = 0.1$, $K = 0.01$, Kopplung über σ_y , $J_y = 2.0$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

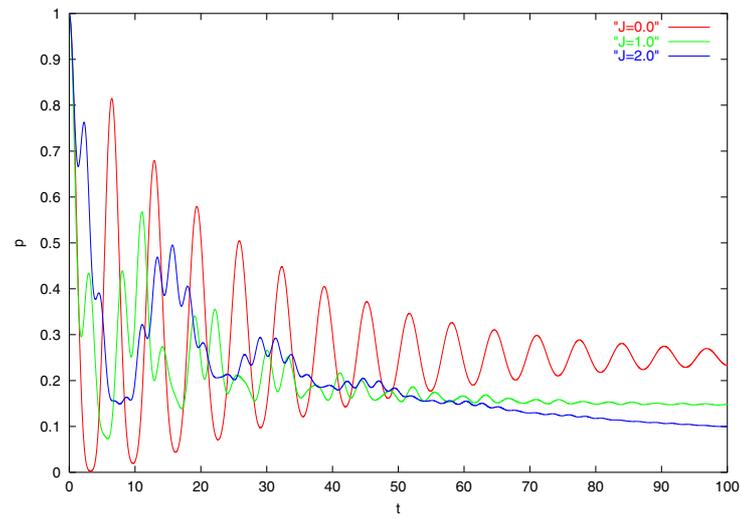


Abbildung 7.27: $T = 1.0$, $K = 0.01$, Kopplung über σ_z , $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

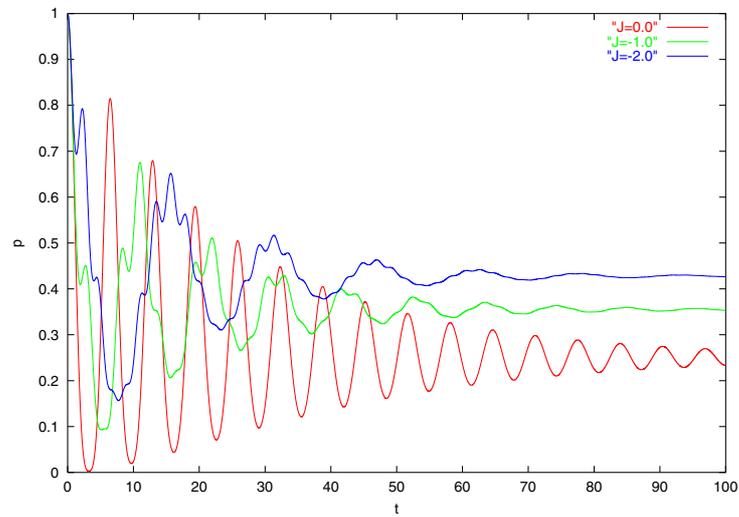


Abbildung 7.28: $T = 1.0$, $K = 0.01$, Kopplung über σ_z , $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

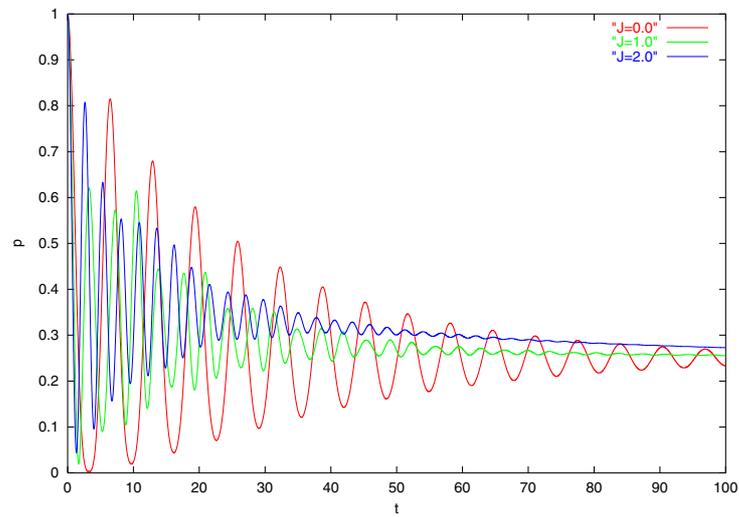


Abbildung 7.29: $T = 1.0$, $K = 0.01$, Kopplung über σ_y , $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

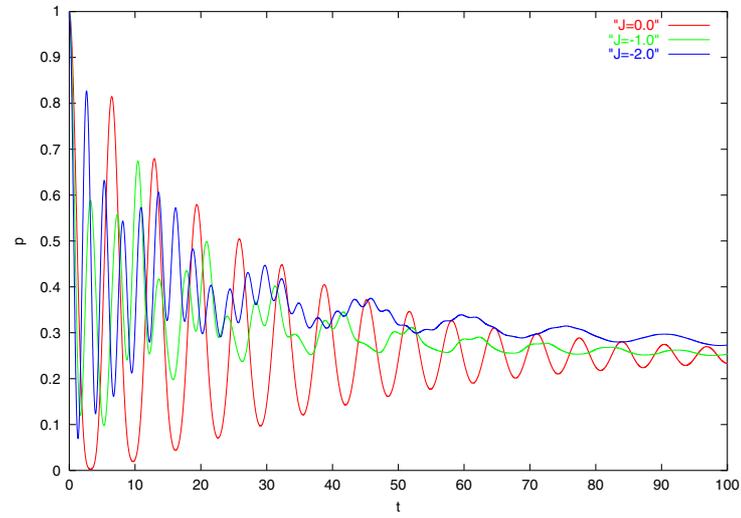


Abbildung 7.30: $T = 1.0$, $K = 0.01$, Kopplung über σ_y , $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

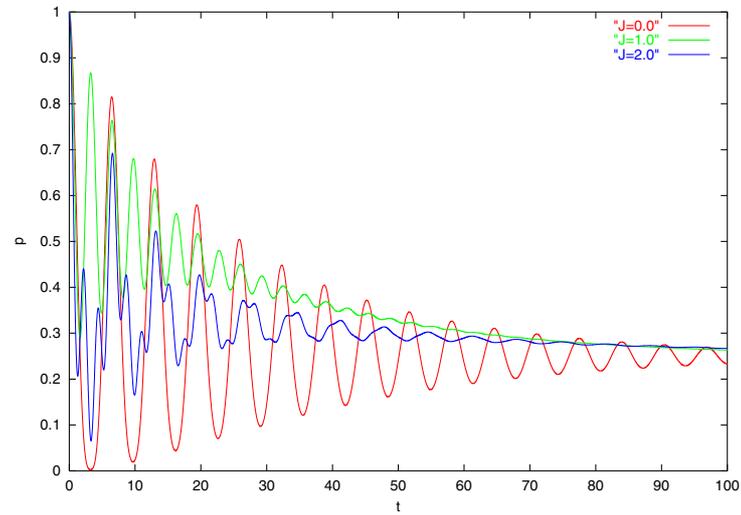


Abbildung 7.31: $T = 1.0$, $K = 0.01$, Kopplung über σ_x , $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

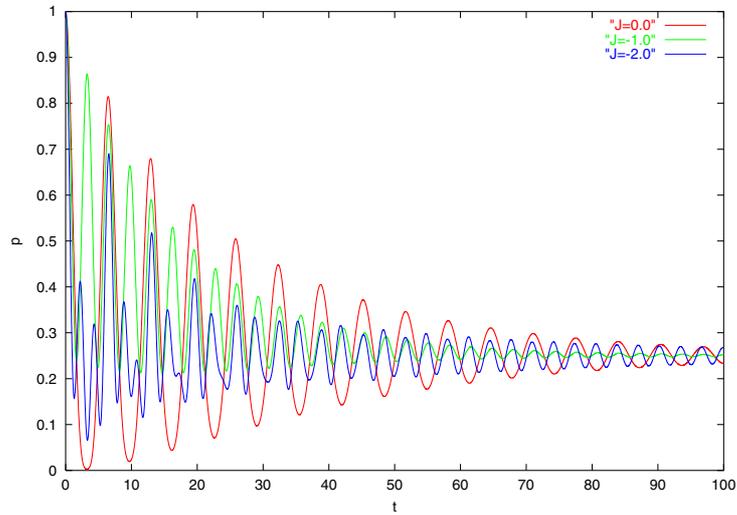


Abbildung 7.32: $T = 1.0$, $K = 0.01$, Kopplung über σ_x , $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

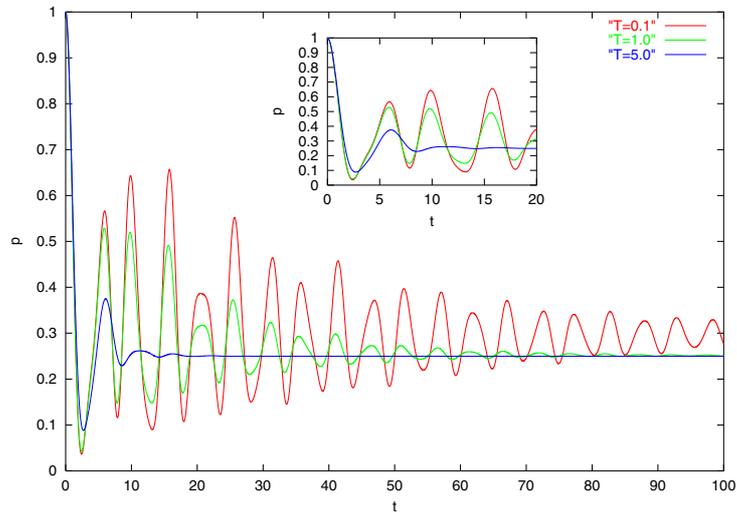


Abbildung 7.33: $K = 0.01$, $J_y = 0.5$, Kopplung über σ_y , $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

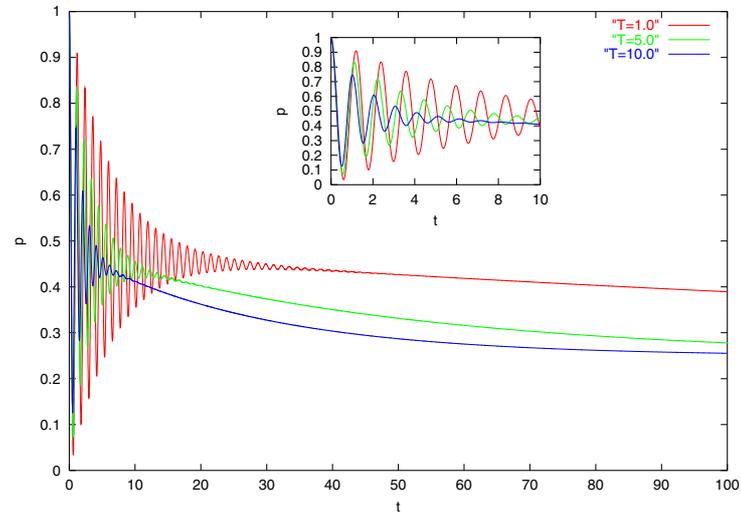


Abbildung 7.34: $K = 0.01$, $J_y = 5.0$, Kopplung über σ_y , $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

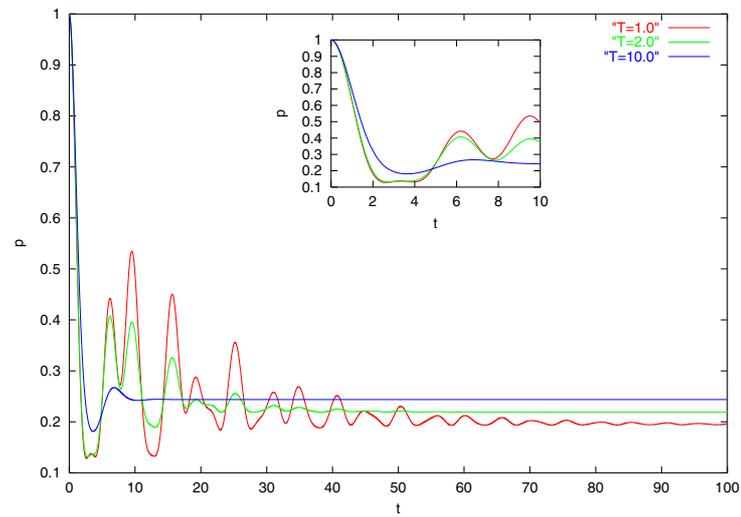


Abbildung 7.35: $K = 0.01$, $J_z = 0.5$, Kopplung über σ_z , $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

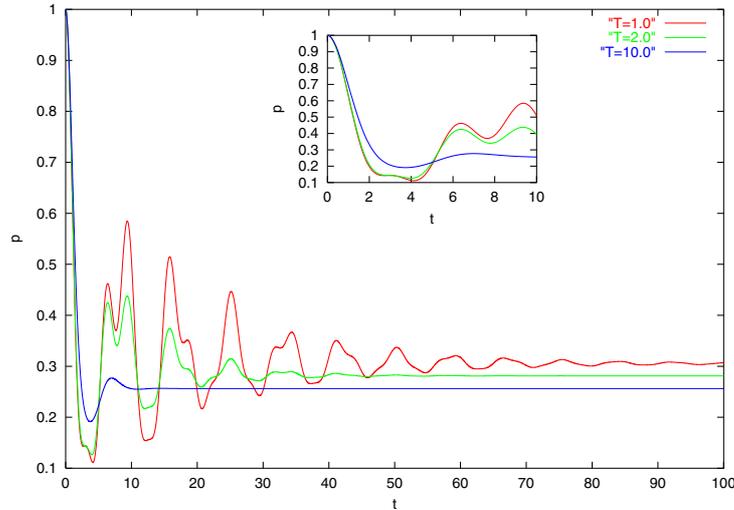


Abbildung 7.36: $K = 0.01$, $J_z = -0.5$, Kopplung über σ_z , $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$; $p_{\uparrow\uparrow}$

7.4 Gültigkeitsbereiche der beiden Verfahren

Systeme, die an ein Spin-Bad koppeln, zeigen bei gleichen Parametern längere Kohärenzzeiten als solche, die an ein Boson-Bad gekoppelt sind. Das liegt am Sättigungsverhalten, das ein Spin-Bad zeigt.

Man kann das gekoppelte System je nach Wechselspiel der Parameter charakterisieren als schwach korreliert (kleine gegenseitige Beeinflussung), als stärker korreliert (relativ starke gegenseitige Beeinflussung) oder als zusammengeschlossen bzw. vereint (die Wechselwirkung ist dann so groß, daß sich die beiden Spins wie ein einzelner Spin mit modifizierter Tunnelaufspaltung verhalten). Die Abbildung 7.38 zeigt die qualitative Abgrenzung dieser Bereiche für ein Spin-Bad, die Abbildungen 7.39 und 7.40 zeigen die qualitative Abgrenzung dieser Bereiche für ein Boson-Bad bei kleiner bzw. mittlerer Ankopplung an das Bad.

Qualitativ kann z.B. für das Boson-Bad gesagt werden, daß für große interne Wechselwirkung (und nicht so große Temperaturen) die Systemspins vereint sind und die Dynamik wesentlich von dieser internen Wechselwirkung bestimmt wird. Für kleine interne Wechselwirkungen gibt es auch nur geringe gegenseitige Beeinflussung und damit im Falle kleiner Kopplung an das Bad ein charakteristisches Frequenzverhalten mit Schwebungseffekten. Ist die Temperatur größer, dann werden niederfrequente Effekte eher unterdrückt. Ist die Temperatur größer als eine an sich schon große interne Wechselwirkung, dann sind die Systemspins nicht vereint (große Temperatur), aber stark korreliert.

Die Ergebnisse werden für kleine Ankopplungen an das Boson-Bad (K_1 und K_2) und kleine Temperaturen mit dem Redfield-Algorithmus gewonnen. Für größere Ankopplungen an das Bad bzw. größere Temperaturen werden sie mit dem rekursiven Algorithmus, der auf der Influenzfunktionalmethode fußt, gewonnen (siehe

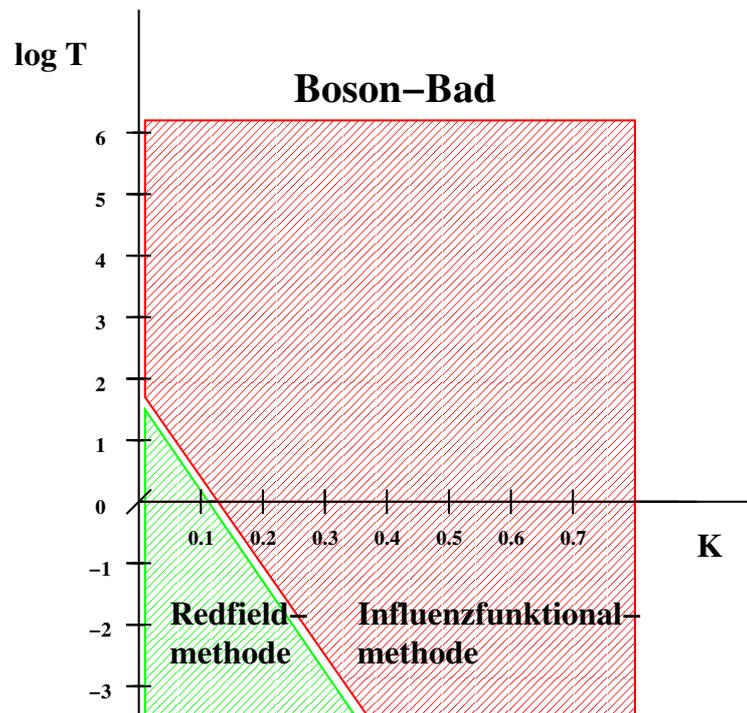


Abbildung 7.37: Die Abbildung zeigt die qualitative Abgrenzung der Parameterbereiche, in denen die beiden Methoden bzw. Algorithmen zum Einsatz kommen für ein Boson-Bad.

Abbildung 7.37). Der rekursive Algorithmus liefert bei schwachen Kopplungen an das Bad quantitativ keine besonders guten Ergebnisse. Das liegt daran, daß im kohärenten Regime die Länge der Blips immer mehr anwächst und somit die Annahme der wenig dichten Blips immer schlechter wird. Nichtsdestotrotz liefert diese Methode auch in diesem Regime gute qualitative Ergebnisse, die mit der Redfield-Methode verglichen werden können. Die Redfield-Methode hat ihre Stärken gerade im Bereich der schwachen Ankopplung an das Bad. In diesem sehr kohärenten Bereich liefert sie sehr gute qualitative und quantitative Ergebnisse. In den Übergangsbereichen wurden die Methoden quantitativ verglichen. Die Ankopplung an das Spin-Bad kann nur mit dem rekursiven Algorithmus behandelt werden.

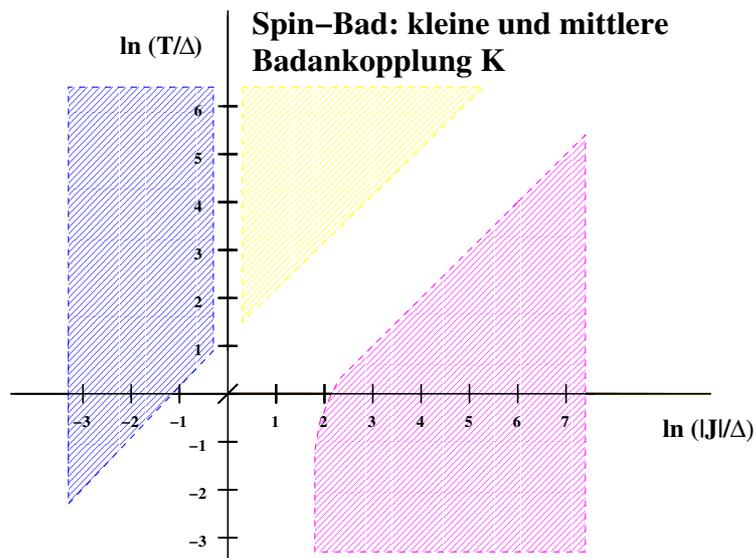


Abbildung 7.38: Die Abbildung zeigt die qualitative Abgrenzung zwischen dem schwach korrelierten (blau), dem stärker korrelierten (gelb) und dem zusammengeschlossenen Bereich (lila) der Dynamik für ein Spin-Bad.

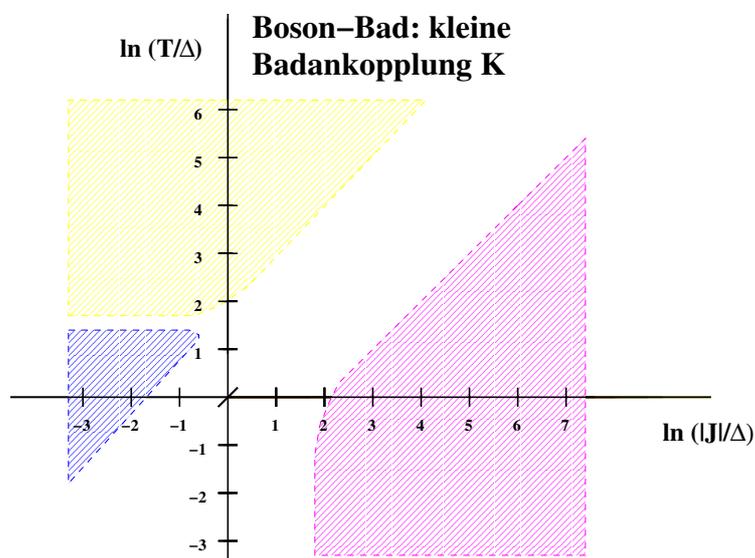


Abbildung 7.39: Die Abbildung zeigt die qualitative Abgrenzung zwischen dem schwach korrelierten (blau), dem stärker korrelierten (gelb) und dem zusammengeschlossenen Bereich (lila) der Dynamik für ein Boson-Bad bei kleiner Badankopplung K.

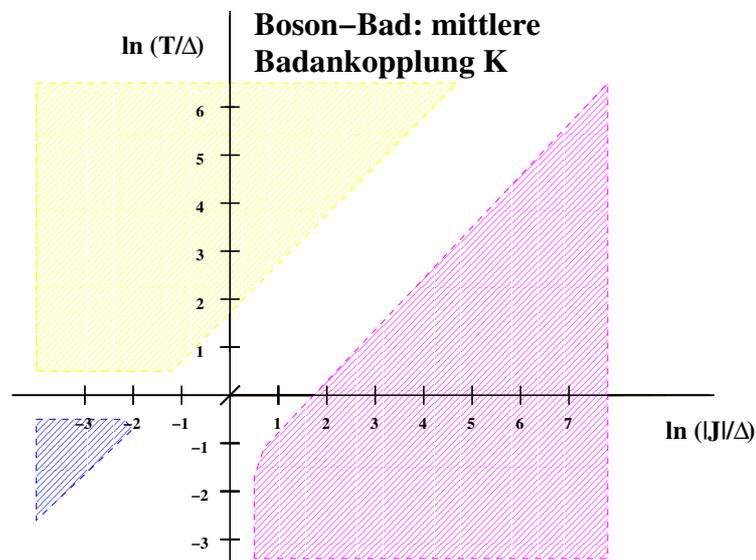


Abbildung 7.40: Die Abbildung zeigt die qualitative Abgrenzung zwischen dem schwach korrelierten (blau), dem stärker korrelierten (gelb) und dem zusammengesetzten Bereich (lila) der Dynamik für ein Boson-Bad bei mittlerer Badankopplung K.

Kapitel 8

Drei-Spin-System: Influenzfunktionalmethode

Der quantenmechanische Meßprozeß eines gekoppelten Spin-Systems kann als Drei-Spin-System aufgefaßt werden. Ein Spin repräsentiert dabei die Meßapparatur, die anderen beiden das System, dessen Zustand gemessen wird. Der Algorithmus, der in Kapitel 5 vorgestellt wurde, konnte auf ein Drei-Spin-System erweitert werden. Auch dieses koppelt wiederum an ein oder mehrere Wärmebäder, welche für die Dephasierung des Systems sorgen (Abbildungen 8.1 und 8.2). Das System besteht aus drei Spins, die untereinander über die Wechselwirkungsparameter J_{12} , J_{13} und J_{23} gekoppelt sind (siehe Abbildungen). Der Wechselwirkungsparameter, der die jeweilige Kopplung an das Bad beschreibt, ist K bzw. K_1 bis K_3 . Die drei System-Spins haben im Folgenden keinen Bias. Sie haben vorerst jeweils die gleiche Tunnelaufspaltung Δ . Zuerst wird der Fall der Kopplung an ein Bad untersucht (Abbildung 8.1).

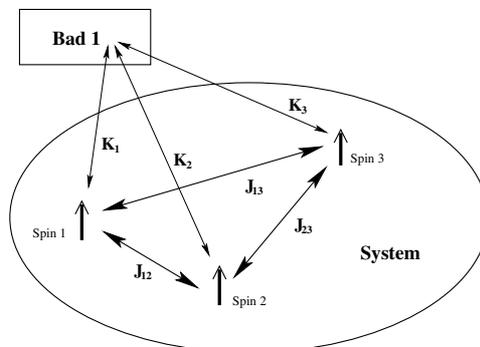


Abbildung 8.1: Drei Spins wechselwirken untereinander und mit einem Bad

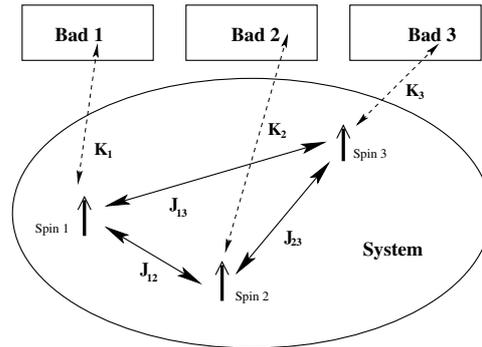


Abbildung 8.2: Drei Spins wechselwirken untereinander und mit jeweils einem Bad

8.1 Drei-Spin-System ohne Bad

Das Drei-Spin-System mit gegenseitiger diagonaler Wechselwirkung über σ_z wird durch den Hamiltonian

$$H = -\frac{1}{2}(\Delta\sigma_{1x} + \Delta\sigma_{2x} + \Delta\sigma_{3x}) + J_{12}\sigma_{1z}\sigma_{2z} + J_{13}\sigma_{1z}\sigma_{3z} + J_{23}\sigma_{2z}\sigma_{3z} \quad (8.1)$$

beschrieben. Dieser Hamiltonian kann wie folgt dargestellt werden

$$H = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}, \quad (8.2)$$

wobei a , b und c durch die Blöcke

$$a = \begin{pmatrix} J_{12} + J_{13} + J_{23} & -\frac{\Delta_3}{2} & -\frac{\Delta_2}{2} & 0 \\ -\frac{\Delta_3}{2} & J_{12} - J_{13} - J_{23} & 0 & -\frac{\Delta_2}{2} \\ -\frac{\Delta_2}{2} & 0 & -J_{12} + J_{13} - J_{23} & -\frac{\Delta_3}{2} \\ 0 & -\frac{\Delta_2}{2} & -\frac{\Delta_3}{2} & -J_{12} - J_{13} + J_{23} \end{pmatrix}, \quad (8.3)$$

$$b = \begin{pmatrix} -J_{12} - J_{13} + J_{23} & -\frac{\Delta_3}{2} & -\frac{\Delta_2}{2} & 0 \\ -\frac{\Delta_3}{2} & -J_{12} + J_{13} - J_{23} & 0 & -\frac{\Delta_2}{2} \\ -\frac{\Delta_2}{2} & 0 & J_{12} - J_{13} - J_{23} & -\frac{\Delta_3}{2} \\ 0 & -\frac{\Delta_2}{2} & -\frac{\Delta_3}{2} & J_{12} + J_{13} + J_{23} \end{pmatrix} \quad (8.4)$$

und

$$c = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta_1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\Delta_1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\Delta_1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\Delta_1}{2} \end{pmatrix} \quad (8.5)$$

gegeben sind. Ohne Wechselwirkung innerhalb des Systems und für jeweils gleiche Tunnelaufspaltung erhält man beim Drei-Spin-System für die Energien (Eigenwerte) $E_1 = -\frac{3}{2}\Delta$, $E_{2,3,4} = -\frac{1}{2}\Delta$, $E_{5,6,7} = \frac{1}{2}\Delta$ und $E_8 = \frac{3}{2}\Delta$ die folgenden Eigenzustände

$$\Psi_1 = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \right), \quad (8.6)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{2} \left(-|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \right), \quad (8.7)$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{2} \left(-|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right), \quad (8.8)$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{2} \left(-|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \right), \quad (8.9)$$

$$\Psi_5 = \frac{1}{2} \left(|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \right), \quad (8.10)$$

$$\Psi_6 = \frac{1}{2} \left(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right), \quad (8.11)$$

$$\Psi_7 = \frac{1}{2} \left(|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \right) \quad (8.12)$$

und

$$\begin{aligned} \Psi_8 = \frac{1}{2\sqrt{2}} & \left(-|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \right. \\ & \left. + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \right). \end{aligned} \quad (8.13)$$

Beim Drei-Spin-System mit jeweils gleicher Tunnelaufspaltung und nur einer Wechselwirkung J_{12} hat man die Eigenwerte

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{\Delta}{2} - \sqrt{\Delta^2 + J_{12}^2}, \\ E_2 &= -\frac{\Delta}{2} - J_{12}, \\ E_3 &= -\frac{\Delta}{2} + J_{12}, \\ E_4 &= -\frac{\Delta}{2} + \sqrt{\Delta^2 + J_{12}^2}, \\ E_5 &= \frac{\Delta}{2} - \sqrt{\Delta^2 + J_{12}^2}, \\ E_6 &= \frac{\Delta}{2} - J_{12}, \\ E_7 &= \frac{\Delta}{2} + J_{12}, \\ E_8 &= \frac{\Delta}{2} + \sqrt{\Delta^2 + J_{12}^2}. \end{aligned} \quad (8.14)$$

Betrachtet man ein Drei-Spin-System mit jeweils gleicher Wechselwirkungsstärke $J=J_{12}=J_{13}=J_{23}$, so erhält man als Eigenwerte

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{\Delta}{2} + J - \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta J + 4J^2}, \\ E_2 &= -\frac{\Delta}{2} + J + \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta J + 4J^2}, \\ E_3 &= -\frac{\Delta}{2} - J, \\ E_4 &= -\frac{\Delta}{2} - J, \\ E_5 &= \frac{\Delta}{2} - J, \\ E_6 &= \frac{\Delta}{2} - J, \\ E_7 &= \frac{\Delta}{2} + J - \sqrt{\Delta^2 - 2\Delta J + 4J^2}, \\ E_8 &= \frac{\Delta}{2} + J + \sqrt{\Delta^2 - 2\Delta J + 4J^2}. \end{aligned} \quad (8.15)$$

8.2 Drei-Spin-System mit Ankopplung an das Wärmebad

Der Hamiltonian des Gesamtsystems lautet

$$H = H_0(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) + H_B(\sigma_k) + H_I(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3; \sigma_k), \quad (8.16)$$

wobei der Systemanteil als

$$H_0 = -\frac{1}{2}\hbar\Delta\sigma_{x1} - \frac{1}{2}\hbar\Delta\sigma_{x2} - \frac{1}{2}\hbar\Delta\sigma_{x3} \\ + \frac{1}{2}K_{zz12}\sigma_{z1}\sigma_{z2} + \frac{1}{2}K_{zz13}\sigma_{z1}\sigma_{z3} - \frac{1}{2}K_{zz23}\sigma_{z2}\sigma_{z3} \quad (8.17)$$

und der Badanteil als

$$H_B = \frac{1}{2} \sum_k \hbar\omega_k \sigma_{xk} \quad (8.18)$$

gegeben ist. Der Wechselwirkungsanteil lautet

$$H_I = \sum_k J_{k1} X_1 \sigma_{zk} + \sum_k J_{k2} X_2 \sigma_{zk} + \sum_k J_{k3} X_3 \sigma_{zk}. \quad (8.19)$$

Die σ -Matrizen sind die Pauli-Matrizen der Einzelspins. Die relevante System-Koordinate der Spins 1, 2 und 3 ist hierbei X_1 , X_2 und X_3 . Die drei internen Kopplungsparameter sind

$$J_{12} = K_{zz12} + \epsilon_{12} = K_{zz12} + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J'_{12}(\omega)}{\omega}, \quad (8.20)$$

$$J_{13} = K_{zz13} + \epsilon_{13} = K_{zz13} + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J'_{13}(\omega)}{\omega} \quad (8.21)$$

und

$$J_{23} = K_{zz23} + \epsilon_{23} = K_{zz23} + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J'_{23}(\omega)}{\omega}. \quad (8.22)$$

Die Kopplungsparameter J_{12} , J_{13} und J_{23} bestehen dabei wieder aus einer direkten Kopplung K_{zz} (siehe Hamiltonian (8.17)) und der badinduzierten (indirekten) Kopplung.

Die spektralen Dichten sind

$$J'_{12}(\omega) = \pi \sum_k \frac{J_{k1} J_{k2}^*}{\hbar} \delta(\omega - \omega_k), \quad (8.23)$$

$$J'_{13}(\omega) = \pi \sum_k \frac{J_{k1} J_{k3}^*}{\hbar} \delta(\omega - \omega_k) \quad (8.24)$$

und

$$J'_{23}(\omega) = \pi \sum_k \frac{J_{k2} J_{k3}^*}{\hbar} \delta(\omega - \omega_k). \quad (8.25)$$

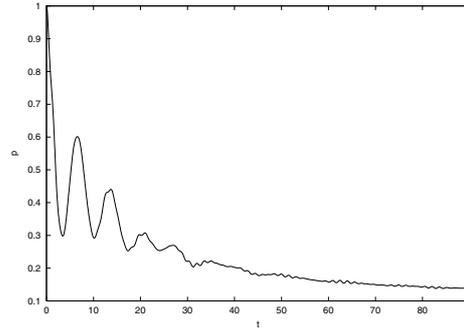


Abbildung 8.3: $K=0.1$, $J_{12} = 4.0$, $J_{13} = 0.5$, $J_{23} = 0.1$; $p_{\uparrow\uparrow\uparrow}$

8.3 Dynamik

Es wird die Dynamik untersucht, die sich für die acht denkbaren Systemeinstellungen ergibt. Deren Wahrscheinlichkeiten sind $p_{\uparrow\uparrow\uparrow}$, $p_{\uparrow\uparrow\downarrow}$, $p_{\uparrow\downarrow\uparrow}$, $p_{\downarrow\uparrow\uparrow}$, $p_{\uparrow\downarrow\downarrow}$, $p_{\downarrow\uparrow\downarrow}$, $p_{\downarrow\downarrow\uparrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow\downarrow}$. Abbildung 8.3 zeigt den Verlauf für $p_{\uparrow\uparrow\uparrow}$. Dabei sind die Parameter zu $\Delta = 1.0$, $\beta = 0.0001$ und $\omega_c = 20.0$ gesetzt. Der Kondo-Parameter K ist hier für alle drei Spins gleich groß. Weitere Abbildungen folgen in Kapitel 10.

8.4 Influenzkern

Beim Spin-Bad ist

$$Q_1(t) = 2K \left[-\arctan(\omega_c t) + i \ln \frac{\Gamma(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{1}{2} - \frac{it}{2\beta\hbar})\Gamma(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{it}{2\beta\hbar})}{\Gamma(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} + \frac{1}{2} + \frac{it}{2\beta\hbar})\Gamma(\frac{1}{2\hbar\omega_c\beta} - \frac{it}{2\beta\hbar})} \right] \quad (8.26)$$

und

$$Q_2(t) = K \ln(1 + \omega_c^2 t^2) . \quad (8.27)$$

Für den Rekursionskern von Spin 1 ergibt sich

$$g^{(1)}(\sigma, \tau, \lambda) = \frac{\Delta^2}{2} \exp(-Q_2^{(1)}(t)) \cos(\tau J_{12}t + \sigma J_{13}t - \lambda Q_1^{(1)}(t)) . \quad (8.28)$$

Dabei ist λ die Sojourn-Ladung, die dem Blip direkt vorangeht, τ ist die Ladung des direkt überlappenden Sojourns von Spin 2 und σ ist die Ladung des direkt überlappenden Sojourns von Spin 3.

Analog lautet der Rekursionskern von Spin 2

$$g^{(2)}(\sigma, \tau, \lambda) = \frac{\Delta^2}{2} \exp(-Q_2^{(2)}(t)) \cos(\tau J_{12}t + \sigma J_{23}t - \lambda Q_1^{(2)}(t)) . \quad (8.29)$$

Hier ist τ die Ladung des direkt überlappenden Sojourns von Spin 1 und σ ist die Ladung des direkt überlappenden Sojourns von Spin 3. Der Rekursionskern

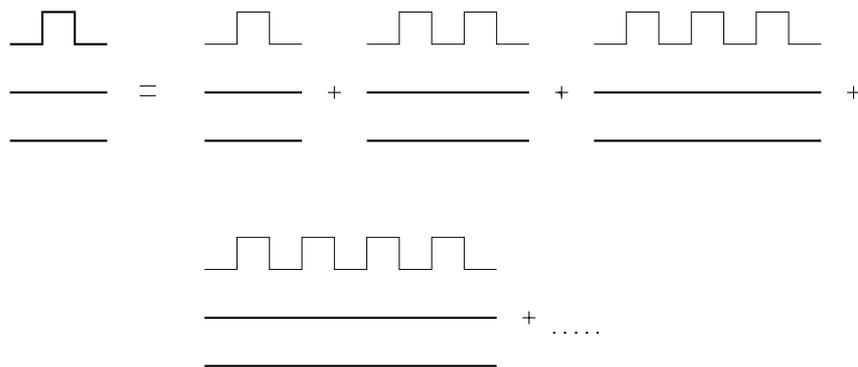


Abbildung 8.5: Zusammensetzung einer Blip-Gruppe.

Kapitel 9

Drei-Spin-System: Redfield-Methode

9.1 Hamiltonian

Der Drei-Spin-Hamiltonian

$$H = H_{3\text{qb}} + H_B + \frac{1}{2}(\sigma_z^{(1)} + \sigma_z^{(2)} + \sigma_z^{(3)})X \quad (9.1)$$

hat als System-Anteil (als Beispiel für eine σ_y -Kopplung)

$$H_{3\text{qb}} = -\frac{E_J^{(1)}}{2}\sigma_x^{(1)} - \frac{E_J^{(2)}}{2}\sigma_x^{(2)} - \frac{E_J^{(3)}}{2}\sigma_x^{(3)} - \frac{E_z^{(1)}}{2}\sigma_z^{(1)} - \frac{E_z^{(2)}}{2}\sigma_z^{(2)} - \frac{E_z^{(3)}}{2}\sigma_z^{(3)} \\ + \frac{\gamma_{12}}{2}\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)} + \frac{\gamma_{13}}{2}\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(3)} + \frac{\gamma_{23}}{2}\sigma_y^{(2)}\sigma_y^{(3)} \quad (9.2)$$

bzw. in der Matrixdarstellung

$$H_{3\text{qb}} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} . \quad (9.3)$$

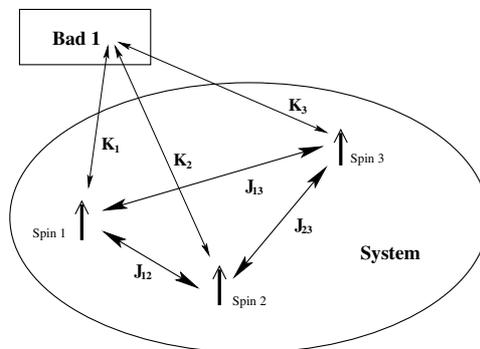


Abbildung 9.1: Drei Spins wechselwirken untereinander und mit einem Bad

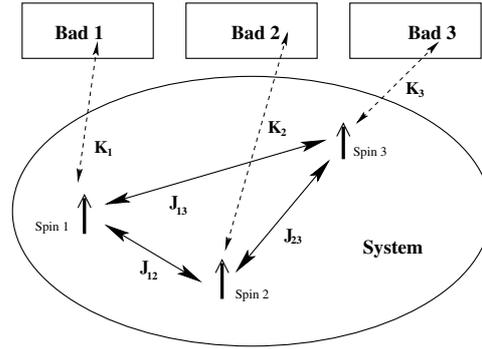


Abbildung 9.2: Drei Spins wechselwirken untereinander und mit jeweils einem Bad

Dabei sind a , b , c und d jeweils 4×4 -Matrizen, welche die folgende Form besitzen

$$a = \begin{pmatrix} -\frac{E_z^{(1)}}{2} - \frac{E_z^{(2)}}{2} - \frac{E_z^{(3)}}{2} & & & -\frac{E_J^{(3)}}{2} & & & -\frac{E_J^{(2)}}{2} & & & -\frac{\gamma_{23}}{2} \\ & -\frac{E_J^{(3)}}{2} & & & -\frac{E_z^{(1)}}{2} - \frac{E_z^{(2)}}{2} + \frac{E_z^{(3)}}{2} & & & \frac{\gamma_{23}}{2} & & -\frac{E_J^{(2)}}{2} \\ & & -\frac{E_J^{(2)}}{2} & & & \frac{\gamma_{23}}{2} & & & -\frac{E_z^{(1)}}{2} + \frac{E_z^{(2)}}{2} - \frac{E_z^{(3)}}{2} & -\frac{E_J^{(1)}}{2} \\ & & & -\frac{\gamma_{23}}{2} & & & -\frac{E_J^{(3)}}{2} & & & -\frac{E_z^{(1)}}{2} + \frac{E_z^{(2)}}{2} + \frac{E_z^{(3)}}{2} \end{pmatrix}, \quad (9.4)$$

$$b = \begin{pmatrix} -\frac{E_J^{(1)}}{2} & -\frac{\gamma_{13}}{2} & -\frac{\gamma_{12}}{2} & 0 \\ \frac{\gamma_{13}}{2} & -\frac{E_J^{(1)}}{2} & 0 & -\frac{\gamma_{12}}{2} \\ \frac{\gamma_{12}}{2} & 0 & -\frac{E_J^{(1)}}{2} & -\frac{\gamma_{13}}{2} \\ 0 & \frac{\gamma_{12}}{2} & \frac{\gamma_{13}}{2} & -\frac{E_J^{(1)}}{2} \end{pmatrix}, \quad (9.5)$$

$$c = \begin{pmatrix} -\frac{E_J^{(1)}}{2} & \frac{\gamma_{13}}{2} & \frac{\gamma_{12}}{2} & 0 \\ -\frac{\gamma_{13}}{2} & -\frac{E_J^{(1)}}{2} & 0 & \frac{\gamma_{12}}{2} \\ -\frac{\gamma_{12}}{2} & 0 & -\frac{E_J^{(1)}}{2} & \frac{\gamma_{13}}{2} \\ 0 & -\frac{\gamma_{12}}{2} & -\frac{\gamma_{13}}{2} & -\frac{E_J^{(1)}}{2} \end{pmatrix} \quad (9.6)$$

und

$$d = \begin{pmatrix} \frac{E_z^{(1)}}{2} - \frac{E_z^{(2)}}{2} - \frac{E_z^{(3)}}{2} & & & -\frac{E_J^{(3)}}{2} & & & -\frac{E_J^{(2)}}{2} & & & -\frac{\gamma_{23}}{2} \\ & -\frac{E_J^{(3)}}{2} & & & \frac{E_z^{(1)}}{2} - \frac{E_z^{(2)}}{2} + \frac{E_z^{(3)}}{2} & & & \frac{\gamma_{23}}{2} & & -\frac{E_J^{(2)}}{2} \\ & & -\frac{E_J^{(2)}}{2} & & & \frac{\gamma_{23}}{2} & & & \frac{E_z^{(1)}}{2} + \frac{E_z^{(2)}}{2} - \frac{E_z^{(3)}}{2} & -\frac{E_J^{(1)}}{2} \\ & & & -\frac{\gamma_{23}}{2} & & & -\frac{E_J^{(3)}}{2} & & & \frac{E_z^{(1)}}{2} + \frac{E_z^{(2)}}{2} + \frac{E_z^{(3)}}{2} \end{pmatrix}. \quad (9.7)$$

Im Vergleich zum Algorithmus aus Kapitel 6 steigt hier aufgrund des wesentlich größeren Redfield-Tensors die Rechenzeit beachtlich an.

Kapitel 10

Drei-Spin-System: Resultate

Die Abbildungen 10.1 bis 10.12 stellen das Dekohärenzverhalten eines Drei-Spin-Systems, das an ein Spin-Bad koppelt, dar. Die Ergebnisse wurden mit dem rekursiven Algorithmus gewonnen. Die Parameter sind $\Delta = 1.0$, $\beta = 0.0001$ und $\omega_c = 20.0$. Die Wechselwirkungsstärke K und die internen Wechselwirkungen sind jeweils angegeben. Die Ankopplung der drei System-Spins an das Bad ist in den Abbildungen 10.1 bis 10.10 jeweils gleich groß. In Abhängigkeit der Parameter zeigt das gekoppelte Drei-Spin-System eine reichhaltige Dynamik mit Schwebungs- und Modulationseffekten. Je nach Einstellung der Parameter können die Ergebnisse mit denen aus Kapitel 4 und Kapitel 7 verglichen werden.

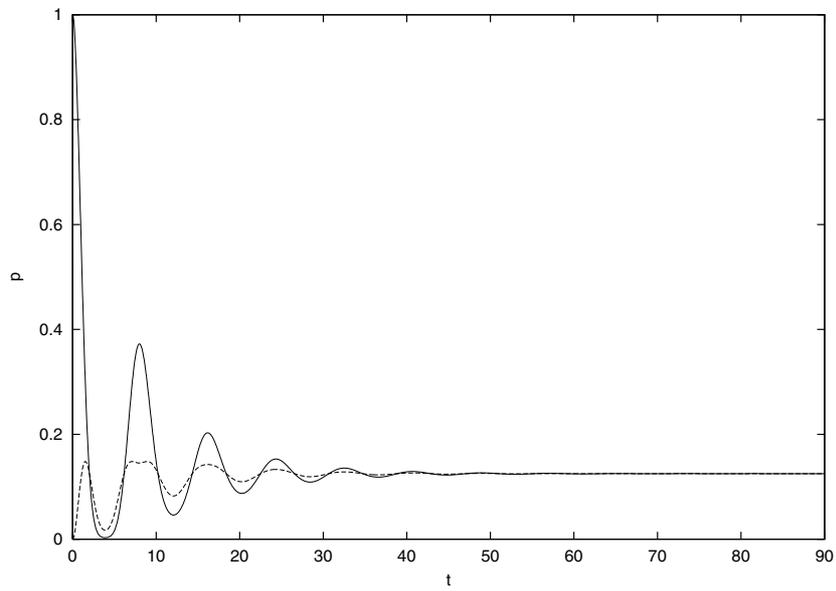


Abbildung 10.1: $K=0.1$, $J_{12} = 0.0$, $J_{13} = 0.0$, $J_{23} = 0.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$ und $p_{\uparrow\downarrow}$

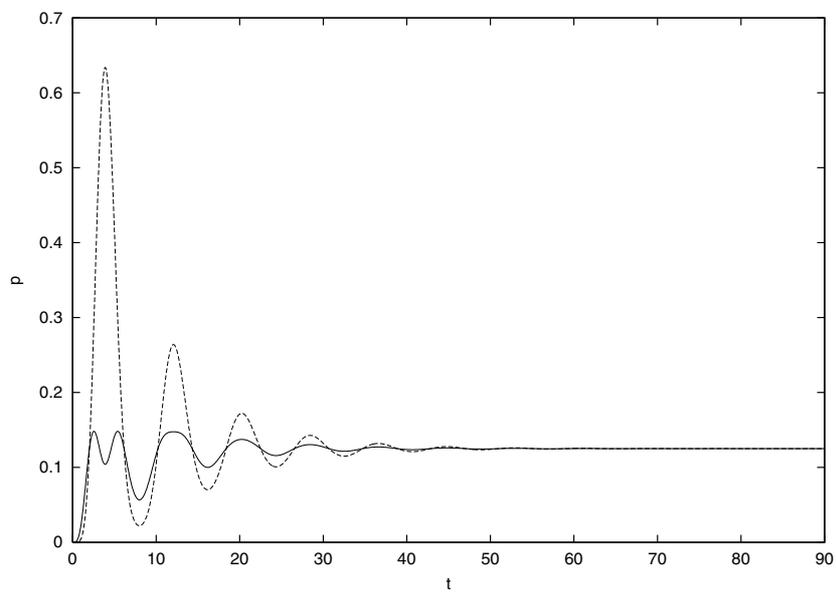


Abbildung 10.2: $K=0.1$, $J_{12} = 0.0$, $J_{13} = 0.0$, $J_{23} = 0.0$; $p_{\uparrow\downarrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow}$

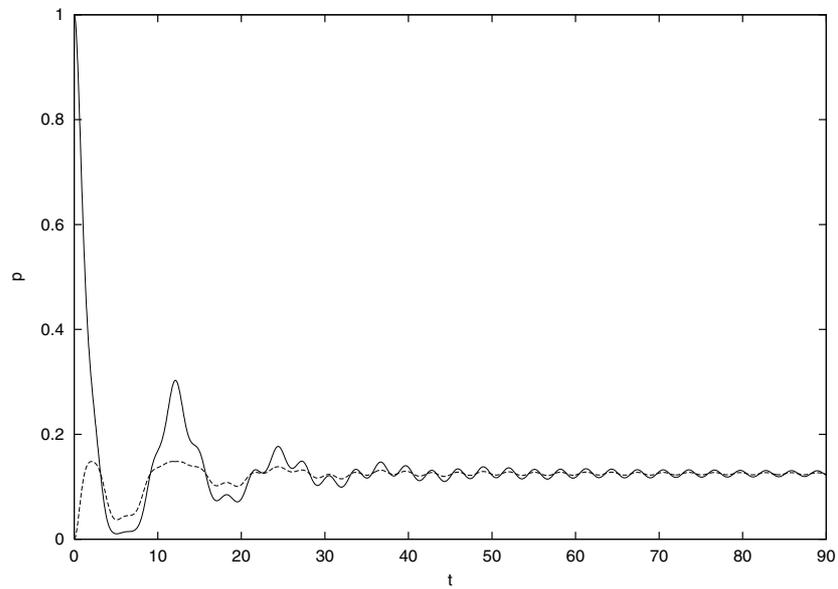


Abbildung 10.3: $K=0.1$, $J_{12} = 1.0$, $J_{13} = 1.0$, $J_{23} = 1.0$; $p_{\uparrow\uparrow\uparrow}$ und $p_{\uparrow\uparrow\downarrow}$

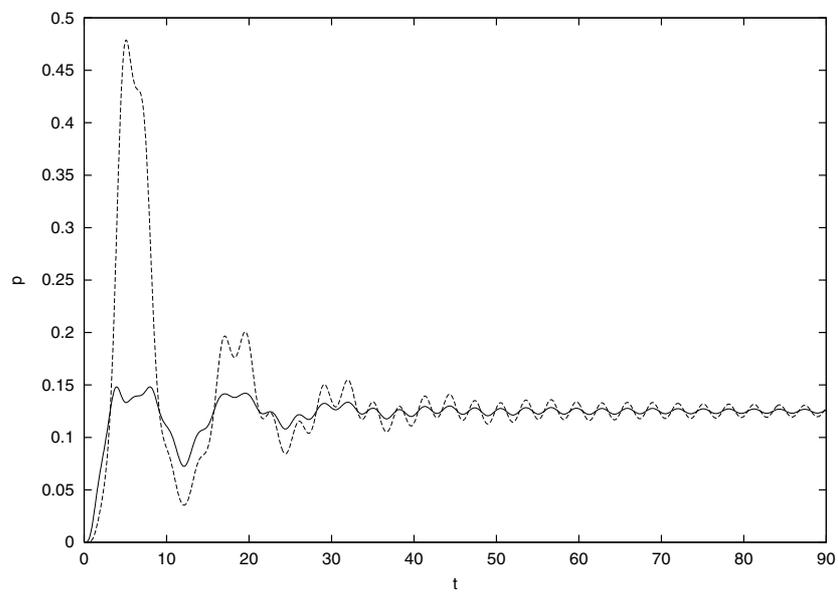


Abbildung 10.4: $K=0.1$, $J_{12} = 1.0$, $J_{13} = 1.0$, $J_{23} = 1.0$; $p_{\uparrow\downarrow\downarrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow\downarrow}$

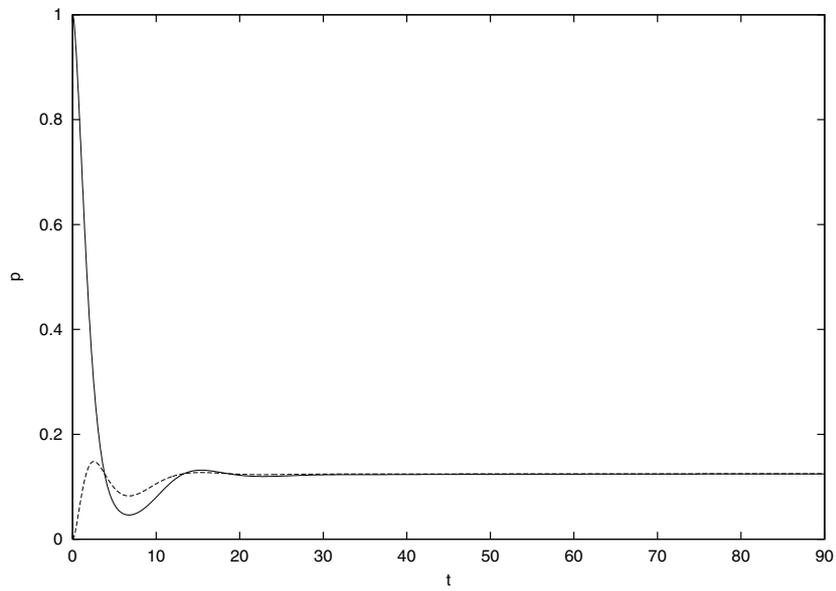


Abbildung 10.5: $K=0.3$, $J_{12} = 0.0$, $J_{13} = 0.0$, $J_{23} = 0.0$; $p_{\uparrow\uparrow}$ und $p_{\uparrow\downarrow}$

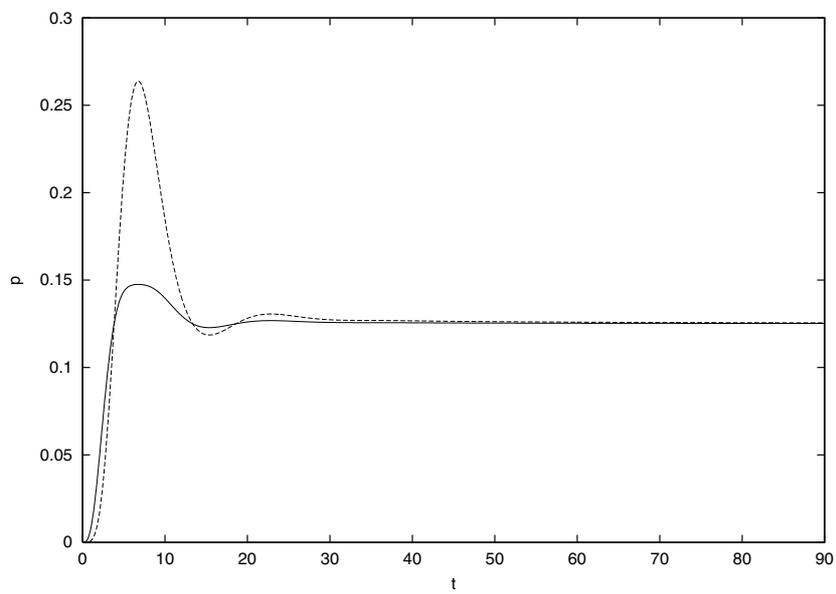


Abbildung 10.6: $K=0.3$, $J_{12} = 0.0$, $J_{13} = 0.0$, $J_{23} = 0.0$; $p_{\uparrow\downarrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow}$

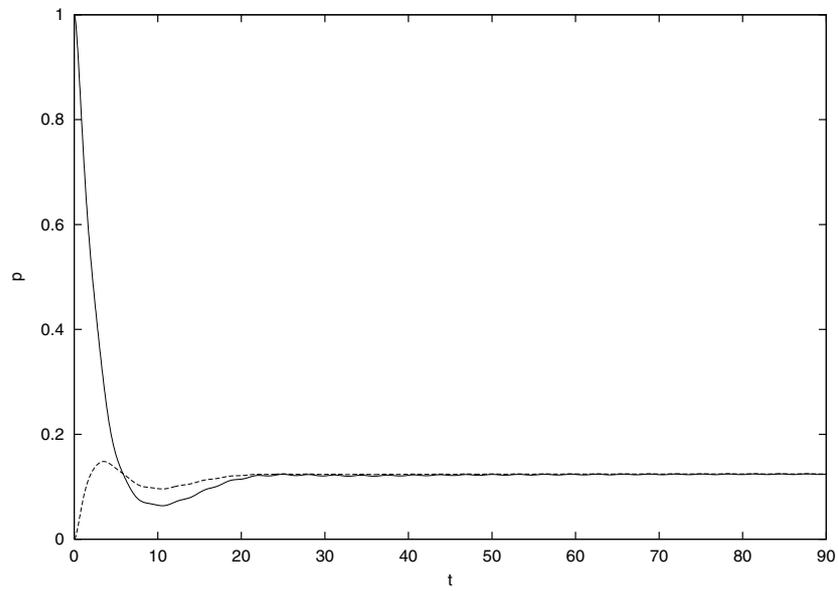


Abbildung 10.7: $K=0.3$, $J_{12} = 1.0$, $J_{13} = 1.0$, $J_{23} = 1.0$; $p_{\uparrow\uparrow\uparrow}$ und $p_{\uparrow\uparrow\downarrow}$

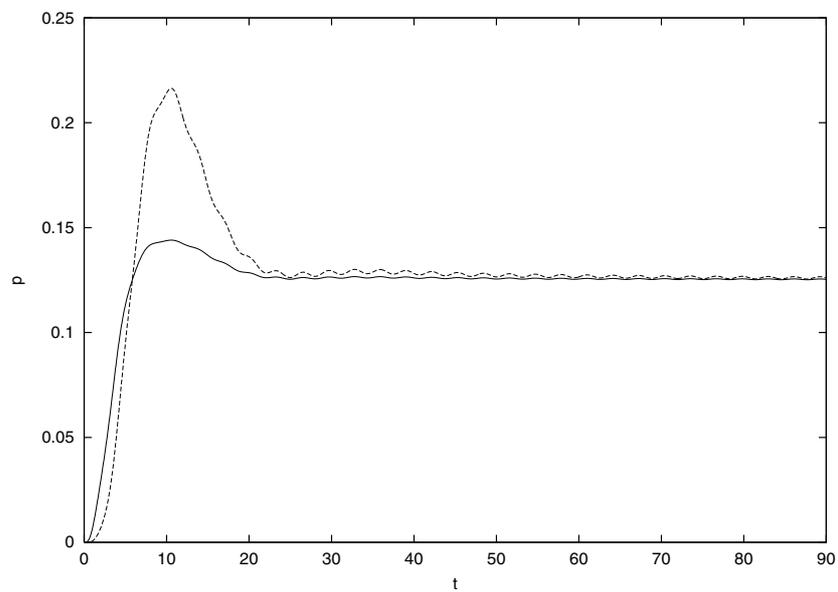


Abbildung 10.8: $K=0.3$, $J_{12} = 1.0$, $J_{13} = 1.0$, $J_{23} = 1.0$; $p_{\uparrow\downarrow\downarrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow\downarrow}$

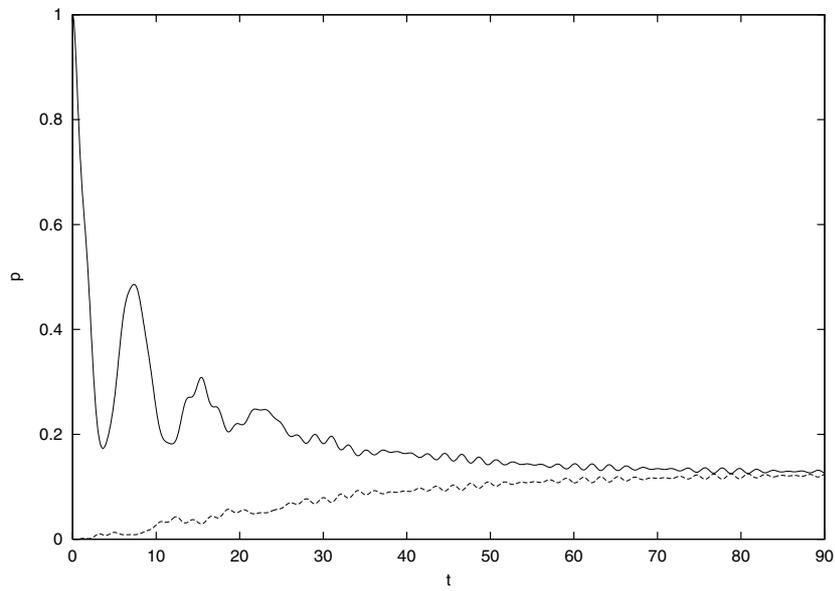


Abbildung 10.9: $K=0.1$, $J_{12} = 0.2$, $J_{13} = 0.2$, $J_{23} = 3.0$; $p_{\uparrow\uparrow\uparrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow\downarrow}$

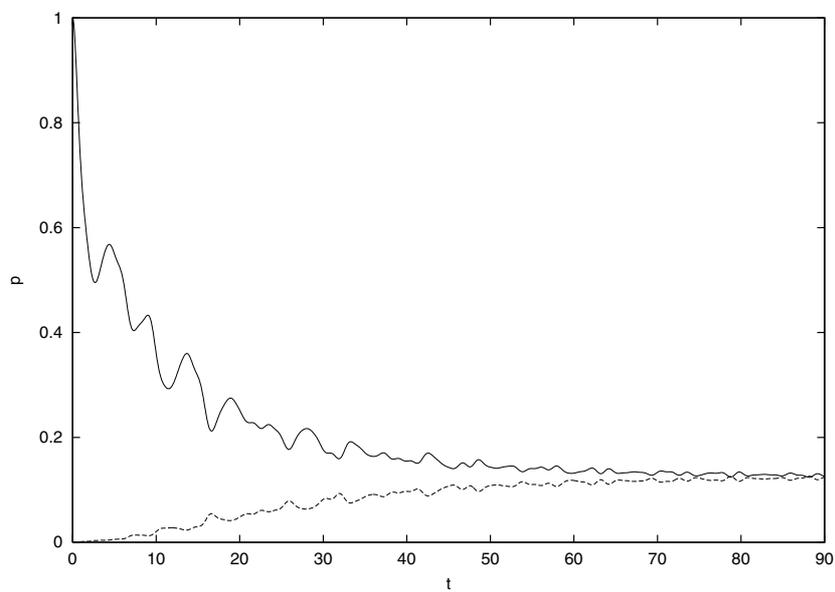


Abbildung 10.10: $K=0.1$, $J_{12} = 0.2$, $J_{13} = 1.0$, $J_{23} = 3.0$; $p_{\uparrow\uparrow\uparrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow\downarrow}$

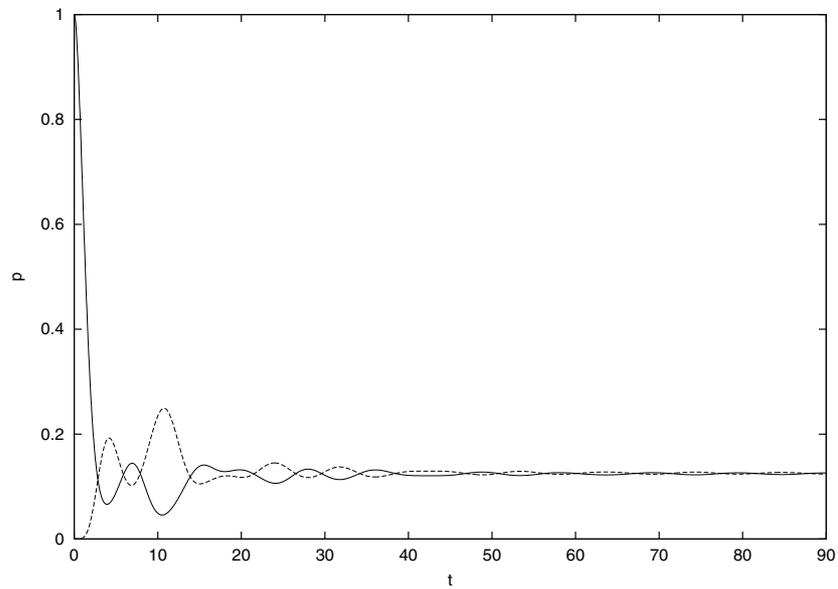


Abbildung 10.11: $K_1=0.1$, $K_2=0.2$, $K_3=0.3$, $J_{12} = 0.3$, $J_{13} = 0.3$, $J_{23} = 0.3$; $p_{\uparrow\uparrow\uparrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow\downarrow}$

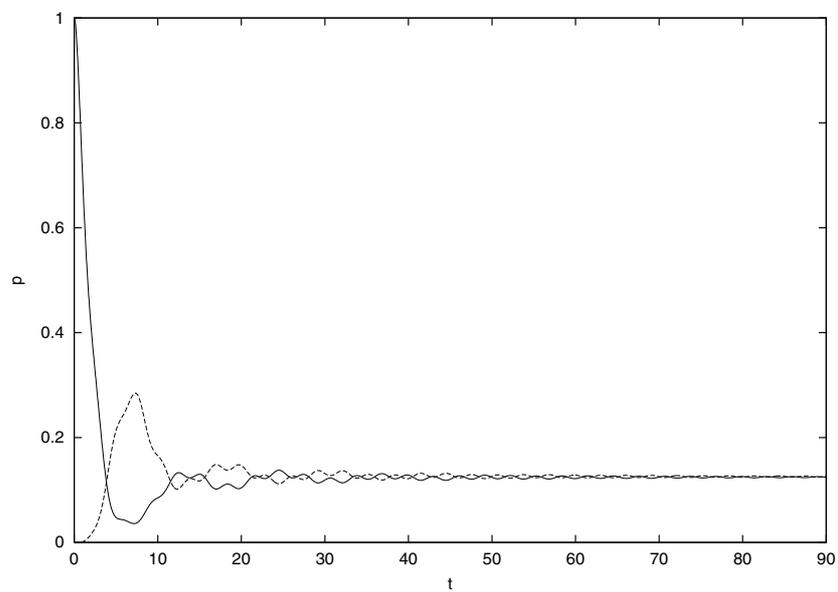


Abbildung 10.12: $K_1=0.1$, $K_2=0.2$, $K_3=0.3$, $J_{12} = 1.0$, $J_{13} = 1.0$, $J_{23} = 1.0$; $p_{\uparrow\uparrow\uparrow}$ und $p_{\downarrow\downarrow\downarrow}$

Kapitel 11

Zusammenfassung

Zum Abschluß wollen wir kurz die wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit rekapitulieren.

In Kapitel 1 wurden Konzepte und Realisierungsmöglichkeiten von Quantencomputing vorgestellt. In Kapitel 2 wurden die Grundlagen der dissipativen Quantenmechanik dargestellt und dabei die Influenzfunktionalmethode behandelt, auf welcher viele in dieser Arbeit erzielte Ergebnisse beruhen. Ein Teil der erzielten Ergebnisse wurde mit der Redfield-Methode gewonnen, diese wurde in Kapitel 3 vorgestellt. Die Dynamik eines Spin-Systems, das an ein Spin-Bad koppelt, wurde in Kapitel 4 analytisch abgeleitet. Für die analytischen und numerischen Ergebnisse, die in den weiteren Kapiteln diskutiert wurden, war das ein wichtiges Vergleichskriterium. In Kapitel 5 wurde zuerst die Dynamik eines freien Zwei-Spin-Systems diskutiert. Dann wurde die Implementierung eines rekursiven Algorithmusses im Rahmen der Influenzfunktionalmethode beschrieben, der die Dynamik eines Zwei-Spin-Systems, das in Wechselwirkung mit einem Wärmebad steht, berechnet. Das Wärmebad konnte dabei ein Boson- oder ein Spin-Bad sein. Der Algorithmus, der auf der Redfield-Methode beruht, wurde in Kapitel 6 beschrieben. Mit den analytischen Ableitungen und den beschriebenen Algorithmen konnte im ganzen Parameterbereich Information über die Dynamik von Zwei-Spin- bzw. Zwei-Qubit-Systemen, die an ein Boson- oder Spin-Bad koppeln, gewonnen werden. Dazu folgten in Kapitel 7 einige Abbildungen und eine Diskussion der Ergebnisse und des Gültigkeitsbereichs der beiden Algorithmen. In Kapitel 8 und 9 wurde die methodische Erweiterung der beiden Algorithmen auf ein Drei-Spin-System diskutiert. Die Ergebnisse davon wurden in Kapitel 10 dargestellt.

Literaturverzeichnis

- [1] R. L. Rivest, A. Shamir, und L. Adleman, *Comm. Assoc. Comput. Mach.* **21**, 120 (1978).
- [2] P. W. Shor, *SIAM J. Computing* **26**, 1484 (1997).
- [3] S. Chakravarty, J. Hirsch, *Phys. Rev. B* **25**, 3273 (1982).
- [4] F. Sols, P. Bhattacharyya, *Phys. Rev. B* **38**, 12 263 (1988).
- [5] A. Matro, J.A. Cini, *J. Phys. Chem.* **99**, 2568 (1995).
- [6] K. H. Fischer, J. A. Hertz, *Spin Glasses*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1991).
- [7] S. Hunklinger, A.K. Raychaudhuri, *Prog. Low Temp. Phys.* **9**, 267 (1986).
- [8] C.C. Yu, A.J. Leggett, *Comments Sol. St. Phys.* **14**, 231 (1989).
- [9] C.C. Yu, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1160 (1989).
- [10] S. Coppersmith, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2015 (1991).
- [11] S. Burin, *J. Low Temp. Phys.* **100**, 309 (1995).
- [12] K.G. Wilson, *Phys. Rev.* **140**, B445 (1965).
- [13] R. Schaback, H. Werner, *Numerische Mathematik*, (Springer Verlag, Berlin, 1992).
- [14] A. K. Lenstra, H. W. Lenstra, *The Development of the Number Field Sieve*, (Springer Verlag, Berlin, 1993).
- [15] M. Aigner, *Diskrete Mathematik*, (Vieweg Verlag, Braunschweig, 1993).
- [16] A. Ekert, C. Macchiavello, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2585 (1996).
- [17] A. Steane, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 793 (1995).
- [18] Y. Makhlin et al., *Rev. Mod. Phys.* **73**, 357 (2001).

-
- [19] A. O. Caldeira et al., Phys. Rev. B **48**, 13974 (1993).
- [20] R. P. Feynman, F. L. Vernon, Ann. Phys. (N.Y.) **24**, 118 (1963).
- [21] R. P. Feynman, A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [22] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics*, (W.A.Benjamin,inc., Reading, 1972).
- [23] A. J. Leggett et al., Rev. Mod. Phys. **59**, 1 (1987).
- [24] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, (World Scientific, Singapore, 1999).
- [25] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryshik, *Table of Integrals, Series and Products*, (Academic Press, 1965).
- [26] J. Shao, P. Hänggi, Phys. Rev. Lett. **81**, 5710 (1998).
- [27] M. Winterstetter, U. Weiss, Chem. Phys. **217**, 155 (1997).
- [28] M. Dube, P. C. E. Stamp, Int. J. Mod. Phys. B **12**, 1191 (1998).
- [29] M. Governale, M. Grifoni, G. Schön, Preprint, Chem. Phys., (2002).
- [30] N. Makri, J. Phys. Chem. **103**, 2823 (1999).
- [31] K. M. Forsythe, N. Makri, Phys. Rev. B **60**, 972 (1999).
- [32] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, Ann. Phys. **149**, 374 (1983).
- [33] F. Bloch, Phys. Rev. **105**, 1206 (1957).
- [34] A. G. Redfield, IBM J. Res. Develop. **1**, 19 (1957).
- [35] D. R. Simon, SIAM J. Computing **26**, 1474 (1997).
- [36] P. W. Shor, Phys. Rev. A **52**, R2493 (1995).
- [37] A. Barenco et al., Phys. Rev. A **52**, 3457 (1995).
- [38] A. Steane, Proc. R. Soc. Lond. Ser. A **452**, 2551 (1996).
- [39] A. Barenco, Proc. R. Soc. Lond. Ser. A **449**, 679 (1995).
- [40] W. Wootters, W. H. Zurek, Nature **299**, 802 (1982).
- [41] W. H. Zurek, Physics Today **44**, 36 (1991).
- [42] M. Grifoni, M. Winterstetter, und U. Weiss, Phys. Rev. E **56**, 334 (1997).

- [43] A. Shnirman, G. Schön, und Z. Hermon, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4710 (1997);
Y. Makhlin, G. Schön, und A. Shnirman, *Nature* **398**, 305 (1999).
- [44] D. P. DiVincenzo, *Science* **269**, 255 (1995).
- [45] R. Egger, C. H. Mak, und U. Weiss, *J. Chem. Phys.* **100**, 2651 (1994).
- [46] G. Mahler, V. A. Weberruß, *Quantum Networks*, (Springer, Berlin, 1998).
- [47] L. Hartmann, I. Goychuk, M. Grifoni, P. Hänggi, (2000).
- [48] J. T. Stockburger, *Phys. Rev. E.* **59**, 4709 (1999).

Danksagung

Zum Schluß möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Besonders danke ich

- Herrn Prof. Dr. U. Weiss für die gute Zusammenarbeit und den gewährten Freiraum,
- Herrn Prof. Dr. G. Mahler für die Übernahme des Mitberichts,
- allen Institutsmitgliedern, speziell Holger Baur, Roman Bedau, Jürgen Stockburger, Gunther Lang, Manfred Winterstetter und Wiltrud Meyer-Haake,
- Svenja, Matthias und Andreas für gute Diskussionen,
- meinen Eltern und Mirjam.

Danket dem HERRN; denn er ist freundlich,
und seine Güte währet ewiglich.
Psalm 118,1