

Masterarbeit

Deformation der Gleichgewichtsdichtematrix durch Kopplung an eine Umgebung

von

cand. M. Sc. Iris Conradi

Abgabe: 06. Oktober 2014
Referent: Prof. Dr. Gerd Schön
Koreferent: Prof. Dr. Frank Wilhelm-Mauch
Betreuer: Dr. Michael Marthaler

Masterarbeit

Deformation der
Gleichgewichtsdichtematrix durch
Kopplung an eine Umgebung

cand. M. Sc. Iris Conradi

Abgabe: 06. Oktober 2014

Institut für Theoretische Festkörperphysik (TFP)
am Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Masterarbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Die wörtlich oder inhaltlich übernommenen Stellen habe ich als solche kenntlich gemacht. Die Regeln des Karlsruher Instituts für Technologie zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis in der Fassung vom Mai 2010 habe ich beachtet.

Karlsruhe, den 06. Oktober 2014

Iris Conradi

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Grundlagen	7
2.1	Quantenemulation	7
2.2	Adiabatischer Quantencomputer	8
2.3	Veröffentlichung zur Dekohärenz im adiabatischen Quantencomputer . . .	9
2.3.1	Zusammenfassung	9
2.3.2	Limitierungen	12
3	Dichtematrix eines wechselwirkenden Systems im thermischen Gleichgewicht	14
3.1	Dekohärenz	16
3.2	Diagrammatische Entwicklung	17
3.2.1	Diagrammatik	19
3.3	Spektrale Dichte	22
3.3.1	Herleitung der Spektrale Dichte	23
3.3.2	Lorentzförmige Spektrale Dichte	25
3.4	Abbruch der Selbstenergie	26
3.4.1	Selbstenergie in zweiter Ordnung	26
3.4.2	Abbruchbedingung	28
3.5	Allgemeinere Wechselwirkung	31
3.6	Reproduzieren des Ergebnisses aus [DAAS13]	32
4	Markovnäherung	36
5	Lösung im Laplaceraum	39
5.1	Bedingungen	40
5.1.1	Eigenschaften der Diagramme	40
5.2	Analyse der Lösung	42
5.2.1	Renormierung der Energien	43
5.2.2	Deformation – Korrektur der Eigenzustände	45

6 Dekohärenz im Quantenemulator	47
6.1 Rekonstruktion des Ergebnisses	47
6.2 Selbstkonsistente Überprüfung der Deformation	48
7 Zusammenfassung	52
Abbildungsverzeichnis	55
Literaturverzeichnis	56

1 Einleitung

Der Simulation von quantenmechanischen Problemen auf klassischen Computern sind auf Grund des exponentiell mit der Problemgröße anwachsenden Zustandsraums Grenzen gesetzt. Schon die Speicherung des Spinzustandes von 40 Teilchen benötigt etwa 4TB, eine Verdopplung der Teilchenzahl führt zu einer unerreichbaren Speichergröße von 5×10^{12} TB (vgl. [GAN14]). Schon 1982 erkannte Richard Feynman, dass die Verwendung von quantenmechanischen Systemen, die einen mit der Zahl der Teilchen exponentiell anwachsenden Zustandsraum als Speicher zur Verfügung stellen, eine Lösung für dieses Problem sein kann.

„Let the computer itself be built of quantum mechanical elements which obey quantum mechanical laws.” (Feynman,1982)

Universelle Quantencomputer sind auch auf Grund der notwendigen Fehlerkorrektur sehr komplexe Systeme, die eine sehr große Zahl gekoppelter Qubits mit langen Kohärenzzeiten benötigen. Aktuelle Experimente zeigen, dass mit supraleitenden Schaltkreisen bei Logikgattern und Ausleseprozessen eine Genauigkeit erreicht werden kann, die die Grundvoraussetzung zur Realisierung eines universellen Quantencomputers bildet (vgl. [BKM⁺14]). Jedoch ist zur Skalierung hin zu Systemen bestehend aus vielen tausend Qubits noch intensive Forschungsarbeit nötig. Somit liegt die Simulation quantenmechanischer Probleme auf universellen Quantencomputern noch in ferner Zukunft.

In Kapitel 2 werden die Konzepte der Quantenemulation und des Adiabatischen Quantencomputers vorgestellt. Sie versprechen eine auf quantenmechanischen Prinzipien basierende Lösung spezieller Probleme. Die Umsetzung dieser Konzepte erscheint einfacher als die Entwicklung eines universellen Quantencomputers. Für beide Konzepte liegt jedoch keine Untersuchung über den Einfluss einer Wechselwirkung mit der Umgebung

vor. [DAAS13] beschäftigt sich mit Dekohärenz im Adiabatischen Quantencomputer. Die Argumentation in dieser Veröffentlichung wird in Kapitel 2 kritisch hinterfragt. In Kapitel 3 wird eine Idee aus [DAAS13] aufgegriffen, um im Allgemeinen die Auswirkung einer Umgebung auf ein System im thermischen Gleichgewicht zu untersuchen und daraus Erkenntnisse über Dekohärenz in Quantenemulatoren zu erhalten. Eine diagrammatische Theorie führt zu einer Bestimmungsgleichung für die reduzierte Dichtematrix des Systems. Die Lösung dieser Gleichung wird in Kapitel 4 mit Hilfe der Markovnäherung gesucht. In Kapitel 5 wird beschrieben, wie durch Laplacetransformation die Auswirkung der Wechselwirkung mit der Umgebung quantifiziert werden kann. Kapitel 6 behandelt die Bedeutung dieser Erkenntnisse für die Quantenemulation.

2 Grundlagen

2.1 Quantenemulation

Es gibt im Vergleich zu einem universellen Quantencomputer eine einfachere Möglichkeit Simulationen quantenmechanischer Probleme durchzuführen. Dazu wird der Hamilton-Operator des zu untersuchenden Modells auf eine andere Beschreibung übertragen, die mit Hilfe von Elementen wie Zweizustandssystemen und Resonatoren nachgebildet werden kann. Diese können in supraleitenden Schaltkreisen realisiert werden. Dieses Verfahren wird als Quantenemulation oder nicht universelle analoge Quantensimulation bezeichnet. [HCT⁺12] definiert einen Quantensimulator über vier grundlegende Kriterien.

Relevanz Das Problem, das mit Hilfe des Quantensimulators untersucht werden soll, sollte nicht von rein akademischem Interesse sein, sondern es sollte sich um ein physikalisch relevantes Problem handeln. Dies ist gegeben, wenn das System experimentell nicht zugänglich ist oder das Problem theoretisch mit anderen Methoden nicht lösbar ist.

Kontrollierbarkeit Eine sinnvolle Simulation kann nur durchgeführt werden, wenn die Parameter des Simulators, die Initialisierung und die Auslese gut kontrolliert sind. Diese Bedingung ist umso leichter zu erfüllen, je einfacher der supraleitende Schaltkreis aufgebaut ist.

Zuverlässigkeit Es muss gesichert sein, dass das beobachtete System tatsächlich dem gewünschten Modell entspricht.

Effizienz Die Lösung des Problems auf dem Quantensimulator muss effizienter möglich sein, als auf klassischen Computern. Dazu muss im Allgemeinen die Berechnungszeit oder die Speicherressourcen mit der Problemgröße auf dem Quantensimulator günstiger skalieren.

Zur Emulation des Spin-Boson Modells ist nur ein Qubit nötig. In [Hau15] wird gezeigt, dass das bosonische Bad mit Hilfe von Resonatoren nachgebildet werden kann. Der supraleitende Schaltkreis ist folglich sehr einfach und gut kontrollierbar. Trotzdem kann damit ein relevantes Problem gelöst werden. Denn im Regime starker Kopplung mit einem subohmschen Bad kann das Spin-Boson Modell nicht auf klassischen Computern gelöst werden. Ein Experiment [BSK⁺12], dass die Simulation eines Isingmodells mit variabler Wechselwirkung und hunderten Spins zeigt, verdeutlicht, dass Quantenemulatoren, die nach obiger Definition relevante Probleme effizient lösen, bald realisiert werden können. Drei der vier genannten Kriterien können somit voraussichtlich erfüllt werden. Zur Zuverlässigkeit eines Quantenemulators fehlt jedoch eine fundierte Untersuchung. Es existieren nur Vorschläge zur Validierung der Ergebnisse, durch Experimente an anderweitig lösbaren Problemen (vgl. [HCT⁺12]). Das Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung der Dekohärenz in Quantenemulatoren, ausgelöst durch die Kopplung des Emulators an seine Umgebung.

2.2 Adiabatischer Quantencomputer

Das in [FGGS00] vorgeschlagene Prinzip des Adiabatischen Quantencomputers ist eine spezielle Form des Quantenemulators, das die Bestimmung des Grundzustandes zum Ziel hat. Es erlaubt daher die Lösung von Optimierungsproblemen.

Der Adiabatische Quantencomputer wird mit einem einfachen Hamilton-Operator initialisiert, der leicht in seinen Grundzustand relaxiert. Durch Adiabatische Evolution wird der Hamilton-Operator modifiziert, bis der Hamilton-Operator des Problems erreicht wird. Dazu muss dieser genau wie im Fall des Quantenemulators auf eine Beschreibung

übertragen werden, die eine Darstellung mit Hilfe von supraleitenden Schaltkreisen oder Ähnlichem erlaubt.

Das adiabatische Theorem besagt, dass sich das System nach dem adiabatischen Übergang im Grundzustand des Hamilton-Operator des Problems befindet. Dieser kann ausgelesen werden. Aufgrund der Energielücke zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand soll der Adiabatische Quantencomputer gegenüber Dekohärenz robust sein. Dies soll in [DAAS13] gezeigt werden.

2.3 Veröffentlichung zur Dekohärenz im adiabatischen Quantencomputer

[DAAS13] stellt den Ausgangspunkt dieser Arbeit dar. Daher wird in diesem Kapitel der Inhalt dieser Veröffentlichung kurz wiedergegeben und kritisch hinterfragt.

2.3.1 Zusammenfassung

In „Decoherence induced deformation of the ground state in adiabatic quantum computation“ ([DAAS13]) beschäftigen sich Deng et al. mit der Dekohärenz in Adiabatischen Quantencomputern. Vielfach werde behauptet, dass Adiabatische Quantencomputer robust seien gegenüber Störungen durch die Umgebung. Es soll eine Größe ähnlich der Kohärenzzeit in gatterbasierten Quantencomputern definiert werden, die die Dekohärenz in Adiabatischen Quantencomputern abhängig von der Kohärenzzeit der Qubits, also abhängig von der Stärke der Kopplung an die Umgebung, beschreibt.

Der Hamilton-Operator des Adiabatischen Quantencomputers sei gegeben durch

$$H_S = A(s)H_D + B(s)H_P , \tag{2.1}$$

wobei $s = t/t_f$. t_f bezeichnet die Dauer der adiabatischen Entwicklung. Zu Beginn gilt $A(0) = 1$ und $B(0) = 0$. H_P sei der Hamilton-Operator, dessen Grundzustand die Lösung des zu untersuchenden Problems ist. In der adiabatischen Entwicklung werden die Vorfaktoren langsam variiert, sodass $A(1) = 0$ und $B(1) = 1$ gilt. Wenn die Entwicklung ausreichend langsam verlief, befindet sich das System mit hoher Wahrscheinlichkeit im Grundzustand von H_P .

Das Gesamtsystem werde durch den Hamilton-Operator \tilde{H} beschrieben.

$$\tilde{H} = H_S + H_B + H_I \quad (2.2)$$

H_B bezeichne den Hamilton-Operator der Umgebung. H_I beschreibe die Kopplung zum System. Im Falle einer schwachen Kopplung an die Umgebung seien zwei Effekte zu erwarten. Zum einen träte eine Verschiebung der Eigenenergien des Systems auf. Die dadurch resultierende Dephasierung beeinflusse den Adiabatischen Quantencomputer nicht, da nur die Wahrscheinlichkeit im Grundzustand zu sein von Interesse sei. Die Phasenbeziehung der Eigenzustände sei daher nicht von Bedeutung. Zum anderen träten thermische Übergänge auf, die das System ins thermische Gleichgewicht überführen. Die dadurch resultierende Absenkung der Wahrscheinlichkeit, dass sich das System im Grundzustand befindet, könne durch wiederholtes Ausführen der Berechnung ausgeglichen werden. Diese Punkte würden erklären, warum der Adiabatische Quantencomputer als robust gegenüber Dekohärenz gelte.

In [DAAS13] wird der Fall behandelt, dass die Kopplung an die Umgebung etwas stärker ist, als im obigen Fall, jedoch noch eine Störungstheorie möglich ist. Dies führe dazu, dass sich nicht nur die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Zustände verändern, sondern die Eigenzustände selbst. Diese Deformation werde durch virtuelle Übergänge erzeugt. Um diesen Effekt zu quantifizieren definieren sie die „normalized ground state fidelity“.

$$F = P_0^{-1/2} \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho_0} \tilde{\rho}_S \sqrt{\rho_0}} = \sqrt{\frac{\tilde{P}_0}{P_0}} \quad (2.3)$$

wobei P_0 (\tilde{P}_0) die Wahrscheinlichkeit bezeichne, dass sich das ungekoppelte (gekoppelte) System im Grundzustand von H_S befindet. $\tilde{\rho}_S$ bezeichne die reduzierte Dichtematrix des gekoppelten Systems. ρ_0 sei die ideale Dichtematrix, die den Zustand beschreibe, in dem das System sich sicher im Grundzustand befindet. Durch die Normierung mit $P_0^{-1/2}$ werde der Effekt der thermischen Übergänge herausgerechnet, sodass F ein Maß für die durch die Deformation der Eigenzustände ausgelöste Verringerung der Grundzustandswahrscheinlichkeit sei.

Zur Berechnung von F zunächst die Berechnung von P_0 nötig. Es gelte

$$\tilde{P}_0 = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial E_0} \ln(\tilde{Z}) \quad , \text{wobei} \quad \tilde{Z} = \text{Tr} \left(e^{-\beta \tilde{H}} \right) \quad (2.4)$$

Dabei bezeichne E_n die Energie des Eigenzustandes $|n\rangle$ von H_S . Mit Hilfe der Beziehung

$$e^{-\beta \tilde{H}} = e^{-\beta(H_S+H_B)} \mathcal{T} \exp \left(- \int_0^\beta d\tau H_I(\tau) \right) \quad (2.5)$$

und einer Entwicklung nach H_I in zweiter Ordnung wird \tilde{P}_0 berechnet. Es ergebe sich eine Gleichung der folgenden Form

$$\tilde{P}_0 = P_0 + \delta P_0 - \sum_{n \neq 0} (\Gamma_{0n} P_0 - \Gamma_{n0} P_n) \quad (2.6)$$

δP_0 sei durch eine Renormierung der Energien zu begründen. Der letzte Term entstehe durch die virtuellen Übergänge, welche zur Deformation der Eigenzustände führen würden. Mit Hilfe des Ergebnisses für \tilde{P}_0 könne F berechnet werden.

Zunächst wird eine Auswertung des Ausdrucks für F im Spezialfall eines einzelnen Qubits durchgeführt. Ein Vergleich mit den Ausdrücken für die Relaxations- und Dephasierungszeit eines Qubits zeige, dass der Prozess der Deformation insbesondere mit Relaxation und nicht mit Dephasierung in Verbindung stehe. Außerdem führen sie numerische Be-

rechnungen von F für Multiqubitsysteme durch, die durch den D-Wave One Prozessor inspiriert seien. Um am Ende der adiabatischen Entwicklung mit hoher Wahrscheinlichkeit den Grundzustand zu messen, müsse über den gesamten Prozess hinweg F nahe 1 sein. Dies sei jedoch sogar mit Qubits möglich, deren Kohärenzzeiten für die Anwendung in einem gatterbasierten Quantencomputer nicht ausreichend seien.

2.3.2 Limitierungen

In diesem Abschnitt werden die Ausführung der Veröffentlichung kritisch hinterfragt. In der vorliegenden Arbeit wurden diese Kritikpunkte aufgegriffen, um die Zuverlässigkeit des Quantenemulators korrekt zu untersuchen.

Definition der Fidelity

Die Größe $F = \tilde{P}_0/P_0$ ist im Allgemeinen kein Maß für die Deformation der Eigenzustände des Systems. Wenn Deformation vorliegt so ist $\tilde{\rho}_S$ in der Eigenbasis von H_S nicht diagonal. Die Diagonalelemente sind auf 1 normiert. Es gilt $\tilde{P}_0 = \langle 0 | \tilde{\rho}_S | 0 \rangle$. Die Nebendiagonalelemente von $\tilde{\rho}_S$, die die Deformation beschreiben, tragen also zu F nicht bei. Die Aussage

„The deviation from the Boltzmann form provides a good qualitative measure of how strongly the eigenstates [...] are deformed in comparison to the unperturbed states.” [DAAS13]

ist korrekt. Jedoch wird dies nicht konsequent umgesetzt. Nach [Uhl76] ist

$$F(\rho_1, \rho_2) = \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho_1} \rho_2 \sqrt{\rho_1}} \quad (2.7)$$

ein Maß für den Unterschied der Zustände die durch die Dichtematrizen ρ_1 und ρ_2 beschrieben werden. Konsequenterweise müsste als Maß für die Deformation

$$F = \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho_S} \tilde{\rho}_S \sqrt{\rho_S}} \quad (2.8)$$

verwendet werden. Denn dies quantifiziert den Unterschied zwischen der reduzierten Dichtematrix des Systems in Anwesenheit der Wechselwirkung und der Gleichgewichtsdichtematrix die das System ohne Wechselwirkung mit der Umgebung beschreibt. Diese Gleichgewichtsmatrix stellt die im Zitat angesprochene „Boltzmann form“ dar. Diese wird in [DAAS13] durch ${}^{10}\langle 0|/P_0$ ersetzt. Dadurch ist F wesentlich leichter zu berechnen. Die in [DAAS13] verwendete Form der Fidelity berücksichtigt nur diagonale Beiträge der reduzierten Dichtematrix. Das Auftreten von Nebendiagonalelementen in der reduzierten Dichtematrix in der Basis der Eigenzustände von H_S ist jedoch Ausdruck der Deformation, die in [DAAS13] untersucht werden sollte.

Abbruch der Entwicklung

Die oben diskutierten Punkte zeigen, dass die Schlussfolgerungen aus den Berechnungen falsch sind. Aber auch in der Berechnung selbst gibt es einen zweifelhaften Punkt. Eine zeitgeordnete Exponentialfunktion mit Integral, wie sie in Gleichung (2.5) auftritt, unter einer Spur liegt typischerweise diagrammatischen Techniken zu Grunde. In diesen werden die Exponentialfunktionen entwickelt. Ein einfacher Abbruch der Reihe ist nicht möglich. Es müssen bestimmte Diagramme aufsummiert werden. Dazu werden Selbstenergien definiert und die Dyson-Gleichung verwendet. Es erscheint daher zweifelhaft, dass hier ein Abbruch der Exponentialreihe nach der zweiten Ordnung in H_I eine korrekte Näherung darstellt.

3 Dichtematrix eines wechselwirkenden Systems im thermischen Gleichgewicht

Das Ziel dieser Arbeit ist die Analyse der Auswirkung einer Kopplung eines Systems an seine Umgebung auf die Eigenzustände und Eigenenergien des Systems. Der Hamilton-Operator des dazu betrachteten Gesamtsystems besteht aus drei Teilen: dem Hamilton-Operator H_S , der das (Qubit-)System beschreibt, einem Bad H_B und einer Kopplung zwischen diesen beiden Teilen H_I .

$$\tilde{H} = H_S + H_B + H_I \tag{3.1}$$

Das Gesamtsystem (vgl. Abbildung 3.1) befindet sich im thermischen Gleichgewicht.

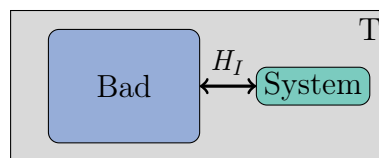


Abbildung 3.1: System gekoppelt an eine Umgebung im thermischen Gleichgewicht

Das System kann beispielsweise durch einen Quantenemulator gegeben sein. Dieser Aufbau kann aber auch auf einen adiabatischen Quantencomputer angewendet werden, wobei H_S dann den im aktuellen Zeitschritt vorliegenden Hamilton-Operator beschreibt.

Die reduzierte Dichtematrix des Systems beschreibt den Zustand, den das System im thermischen Gleichgewicht annimmt. Die Basis in der die reduzierte Dichtematrix diagonal ist, ist die Eigenbasis des Systems in Anwesenheit der Kopplung an die Umgebung. Da sich das Gesamtsystem im thermischen Gleichgewicht befindet, ist dessen Dichtematrix durch die thermische Dichtematrix gegeben, wobei \tilde{Z} die Zustandssumme des Gesamtsystems mit Hamilton-Operator \tilde{H} darstellt.

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{\tilde{Z}} e^{-\beta\tilde{H}} \quad (3.2)$$

Die reduzierte Dichtematrix des Systems ergibt sich durch Ausspuren des Bades. Da die Wechselwirkung nicht verschwindend gering ist, ist die reduzierte Dichtematrix nicht durch die thermische Dichtematrix gegeben.

$$\tilde{\rho}_S = \text{Tr}_B(\tilde{\rho}) \neq \frac{1}{Z_S} e^{-\beta H_S} = \rho_S \quad (3.3)$$

Um den Einfluss der Umgebung beschreiben zu können, muss diese reduzierte Dichtematrix berechnet werden und mit der thermischen Dichtematrix ρ_S verglichen werden (vgl. Abschnitt 2.3.2). In Abschnitt 2.3.1 wurde erläutert, dass [DAAS13] eine Entwicklung der Zustandssumme des Gesamtsystems verwendet.

$$\tilde{Z} = \text{Tr} \left(e^{-\beta\tilde{H}} \right) \quad (3.4)$$

In Abschnitt 3.2 wird diese Methode auf die Berechnung der reduzierten Dichtematrix übertragen.

$$\tilde{\rho}_S = \frac{1}{\tilde{Z}} \text{Tr}_B \left(e^{-\beta\tilde{H}} \right) \quad (3.5)$$

Wie in Abschnitt 2.3.2 ausgeführt, werden in [DAAS13] nur die Diagonalelemente berücksichtigt. Zu einer Untersuchung der Auswirkung einer Kopplung an die Umgebung ist es jedoch erforderlich die gesamte Dichtematrix zu berücksichtigen.

3.1 Dekohärenz

Macroscopic quantum systems are never isolated from their environments. [...] they should not be expected to follow Schrödinger's equation. ([Zur91])

Die Instrumente zur Kontrolle und zur Messung eines Qubitsystems stellen Rauschquellen dar (siehe [MSS01]) und führen zu Dephasierung und Relaxation, da sie eine Kopplung an die Umgebung bedingen. Die reduzierte Dichtematrix, die hier betrachtet wird, beschreibt die Situation nach Ablauf dieser Prozesse, wenn das Gesamtsystem das thermische Gleichgewicht erreicht hat.

In zwei Grenzfällen sind Aussagen über die reduzierte Dichtematrix möglich. Wenn die Wechselwirkung infinitesimal klein ist, dann hat die Dichtematrix die gleiche Form wie im thermischen Gleichgewicht und ist somit diagonal in der Basis von H_S . Im Fall einer unendlich starken Kopplung wird die Dichtematrix diagonal in der Eigenbasis des Kopplungsoperators H_I (siehe [Zur91] S.40). Falls also die Basiszustände von H_S und H_I nicht identisch sind, ist nicht klar, in welcher Basis die reduzierte Dichtematrix für beliebige Kopplungsstärken diagonal ist. In der Basis der Eigenzustände von H_S treten nicht verschwindende Nebendiagonalelemente in der reduzierten Dichtematrix auf. Die Veränderung der Eigenzustände im Vergleich zu den Eigenzuständen des ungekoppelten Systems wird als Deformation bezeichnet (siehe Abbildung 3.2).

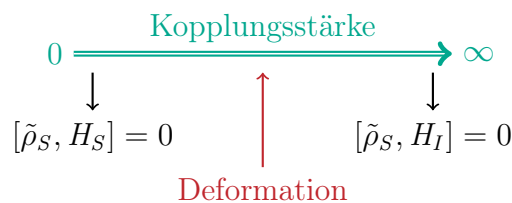


Abbildung 3.2: Durch die Kopplung an eine Umgebung wird die reduzierte Dichtematrix in einer neuen Basis diagonal.

3.2 Diagrammatische Entwicklung

Die reduzierte Dichtematrix des Systems ist definiert durch

$$\tilde{\rho}_S = \text{Tr}_B \left(\frac{1}{Z} e^{-\beta \tilde{H}} \right). \quad (3.6)$$

Analog zu [DAAS13] wird eine Entwicklung der Exponentialfunktion in kleiner Kopplung durchgeführt.

Im Wechselwirkungsbild (mit imaginärer Zeit)

$$H_I(\tau) = e^{\tau(H_S+H_B)} H_I e^{-\tau(H_S+H_B)} \quad (3.7)$$

kann von der Exponentialfunktion, die den vollen Hamilton-Operator \tilde{H} enthält, eine Exponentialfunktion von $\beta(H_S + H_B)$ abgespalten werden. Diese kann auf die thermischen Dichtematrizen ρ_S und ρ_B zurückgeführt werden. Der verbleibende Term kann nach H_I entwickelt werden. Es gilt (vgl. [DAAS13]):

$$e^{-\beta \tilde{H}} = e^{-\beta(H_S+H_B)} \underbrace{\mathcal{T} \exp \left(- \int_0^\beta d\tau H_I(\tau) \right)}_{= \mathcal{S}} \quad (3.8)$$

Beweis: verwende $U_0 = e^{-\beta(H_S+H_B)}$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} U_0 \mathcal{S} = -(H_S + H_B) U_0 \mathcal{S} - U_0 H_I(\beta) \mathcal{S} \quad (3.9)$$

$$= -(H_S + H_B) U_0 \mathcal{S} - U_0 U_0^{-1} H_I U_0 \mathcal{S} \quad (3.10)$$

$$= -(H_S + H_B + H_I) U_0 \mathcal{S} \quad (3.11)$$

$$\Rightarrow U_0 \mathcal{S} = e^{-\beta(H_S+H_B+H_I)} \quad (3.12)$$

Unter der Verwendung von Gleichung (3.8) kann die reduzierte Dichtematrix in Abhängigkeit von ρ_S und ρ_B ausgedrückt werden.

$$\tilde{\rho}_S = \text{Tr}_B \left(\frac{1}{\tilde{Z}} e^{-\beta \tilde{H}} \right) \quad (3.13)$$

$$= \text{Tr}_B \left(\frac{1}{\tilde{Z}} e^{-\beta(H_S+H_B)} \cdot \mathcal{S} \right) \quad (3.14)$$

$$= \rho_S \frac{Z_S Z_B}{\tilde{Z}} \text{Tr}_B (\rho_B \mathcal{S}) \quad (3.15)$$

Zurück bleibt ein Bruch aus Zustandssummen, der als Vakuumbigramme zu identifizieren ist,

$$\langle \mathcal{S} \rangle_o = \text{Tr} (\rho \mathcal{S}) = \frac{\tilde{Z}}{Z_S Z_B} \quad (3.16)$$

da der Erwartungswert des Operators \mathcal{S} mit der Dichtematrix des Gesamtsystems ohne Kopplung $\rho = \rho_S \rho_B$ gebildet wird. Folgende Gleichung definiert somit die reduzierten Dichtematrix:

$$\tilde{\rho}_S = \frac{1}{\langle \mathcal{S} \rangle_o} \rho_S \langle \mathcal{S} \rangle_B . \quad (3.17)$$

Mit Hilfe einer Entwicklung von \mathcal{S} kann eine Näherung für die reduzierte Dichtematrix gefunden werden.

$$\mathcal{S} \approx 1 - \underbrace{\int_0^\beta H_I(\tau) d\tau}_{\text{Tr}_B \Rightarrow 0} + \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 H_I(\tau_1) H_I(\tau_2) + \mathcal{O}(H_I^3) \quad (3.18)$$

Dabei wird verwendet, dass die ungeraden Potenzen von H_I in der Bildung des Erwartungswertes $\langle \dots \rangle_B$ verschwinden. Falls gilt $\langle H_I \rangle_B \neq 0$ kann dies als Konstante zu H_S definiert werden. Die Zeitordnung ist implizit durch die Integrationsgrenzen gegeben.

3.2.1 Diagrammatik

Um eine Näherung für die reduzierte Dichtematrix zu erhalten, muss $\langle \mathcal{S} \rangle_B$ entwickelt werden. Mit Hilfe einer Diagrammatik kann kontrolliert werden, welche Terme der Entwicklung vernachlässigbar sind.

Die Diagrammatik wird für Wechselwirkungen der folgenden Form eingeführt,

$$H_I = \sum_j \mathcal{O} \cdot t_j (b_j^\dagger + b_j) = \sum_j \mathcal{O} \cdot q_j \quad (3.19)$$

wobei \mathcal{O} ein Operator des Systems ist. b_j^\dagger, b_j bezeichnen Erzeuger und Vernichter bosonischer Moden. Im Wechselwirkungsbild mit imaginärer Zeit lautet der Wechselwirkungsoperator:

$$H_I(\tau) = \sum_j e^{\tau H_S} \mathcal{O} e^{-\tau H_S} q_j(\tau). \quad (3.20)$$

Die diagrammatischen Regeln werden an Hand der ersten Terme der Entwicklung für ein Matrixelement der reduzierten Dichtematrix hergeleitet. $|s\rangle$ bezeichnet einen Eigenzustand von H_S mit Energie E_s .

$$(\tilde{\rho}_S)_{s's} = \langle |s\rangle \langle s'| \rangle \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} &\approx \frac{1}{Z_S \langle \mathcal{S} \rangle_o} \langle s'|s\rangle e^{-(\beta-0)E_{s'}} + \frac{1}{Z_S \langle \mathcal{S} \rangle_o} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \sum_{\bar{s},j} e^{-(\beta-\tau_1)E_{s'}} \\ &\quad \cdot \langle s'|\mathcal{O}|\bar{s}\rangle e^{-(\tau_1-\tau_2)E_{\bar{s}}} \langle \bar{s}|\mathcal{O}|s\rangle e^{-(\tau_2-0)E_s} \langle q_j(\tau_1)q_j(\tau_2) \rangle_B + \mathcal{O}(H_I^4) \end{aligned}$$

Dabei wurde verwendet,

$$\langle q_j(\tau_1)q_k(\tau_2) \rangle = 0 \quad \text{für } j \neq k \quad (3.22)$$

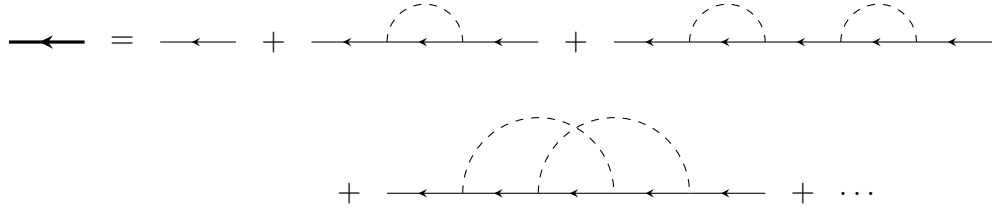


Abbildung 3.3: Diagrammatische Entwicklung der nicht normierten reduzierten Dichtematrix $\tilde{\rho}_S^{(u)}$

dass verschiedene Badmoden nicht korreliert sind. Außerdem wurde durch die Integralgrenzen die Zeitordnung der Operatoren fixiert, sodass der Zeitordnungsoperator weggelassen werden kann. Im Folgenden werden diagrammatische Regeln definiert, um die Terme der Entwicklung der nicht normierten reduzierten Dichtematrix $\tilde{\rho}_S^{(u)}$ zu erhalten,

$$\tilde{\rho}_S^{(u)} = Z_S \langle S \rangle_o \tilde{\rho}_S \quad (3.23)$$

die in Abbildung 3.3 dargestellt sind.

Diagrammatische Regeln

- Eine gerade Linie stellt eine freie Propagation $e^{-(\tau_{left}-\tau_{right})H_S}$ dar.
- Eine gestrichelte Linie stellt einen Badkorrelator $\sum_j \langle q_j(\tau_{left})q_j(\tau_{right}) \rangle_B$ dar.
- An jedem Start- oder Endpunkt einer gestrichelten Linie wird ein Operator \mathcal{O} eingefügt. Die Reihenfolge der freien Propagationen und Operatoren \mathcal{O} im Sinne der Matrixmultiplikation ist durch das Diagramm gegeben.
- An jedem vollständigen Vertex wird über die dem Vertex zugeordnete Zeit τ_n integriert $\int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n$, wobei τ_{n-1} links davon liegende Zeit bezeichnet.
- Alle Diagramme beginnen bei $\tau = 0$ rechts außen und enden links außen an β .

Um aus diesen Regeln Gleichung (3.21) für ein Matrixelement aus der diagrammatischen Reihe zu erhalten, muss nach Anwendung der Regeln das Matrixelement $s's$ gebildet werden und es müssen Vollständigkeitsrelationen eingefügt werden.

Durch die Festlegung der Integrationsgrenzen ist die Zeitordnung der Operatoren berücksichtigt worden. Wenn Diagramme dargestellt werden, die nicht bei Zeitpunkt 0 beginnen, beispielsweise im Folgenden für die Selbstenergie, müssen die Integrationsgrenzen angepasst werden, sodass die Zeitordnung der Operatoren gewährleistet ist.

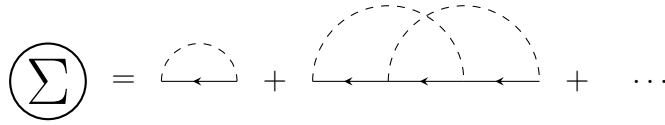


Abbildung 3.4: Selbstenergie

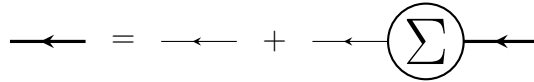


Abbildung 3.5: Dyson-Gleichung

Wie üblich wird eine Selbstenergie definiert (siehe Abbildung 3.4), die die nicht separablen Diagramme beinhaltet. Somit ergibt sich die Dyson-Gleichung (siehe Abbildung 3.5).

Wobei die Selbstenergie durch die folgende Gleichung gegeben ist.

$$\Sigma(\tau_{left} - \tau_{right}) = \sum_{\bar{s}, j} \mathcal{O} |\bar{s}\rangle e^{-(\tau_{left} - \tau_{right})E_{\bar{s}}} \langle \bar{s} | \mathcal{O} \langle q_j(\tau_{left}) q_j(\tau_{right}) \rangle_B + \dots \quad (3.24)$$

Die Reihe der Selbstenergie darf abgebrochen werden. Dies wird in Abschnitt 3.4 gezeigt. Zur Beschreibung des Systems bei kleiner Kopplungsstärke ist es daher ausreichend den ersten Term der Selbstenergie zu verwenden (siehe Abbildung 3.6).



Abbildung 3.6: Erste Ordnung der Selbstenergie

Die diagrammatischen Regeln ermöglichen den Weg von der diagrammatischen Dyson-Gleichung zurück in die mathematische Darstellung.

$$\tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) = e^{-\beta H_S} + \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 e^{-(\beta-\tau_1)H_S} \Sigma(\tau_1 - \tau_2) \tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau_2) \quad (3.25)$$

Dies ist die Bestimmungsgleichung für die unnormierte reduzierte Dichtematrix. Sie muss im Folgenden gelöst werden. Nach Lösung der Gleichung ist eine Normierung der Dichtematrix leicht möglich. Es muss gelten

$$\text{Tr}_S \tilde{\rho}_S = 1 \quad (3.26)$$

Eine Möglichkeit zur Vereinfachung der Gleichung (3.25) ist das Differenzieren nach β . Es ergibt sich

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) = -H_S \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) + \int_0^\beta d\tau_2 \Sigma(\beta - \tau_2) \tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau_2) \quad (3.27)$$

3.3 Spektrale Dichte

Die Spektrale Dichte beschreibt die Stärke des Rauschens bei verschiedenen Frequenzen. Ihr Zusammenhang zu den Badkorrelatoren ist gegeben durch

$$\sum_j \langle q_j(\tau_1) q_j(\tau_2) \rangle_B = \int \frac{d\omega}{2\pi} S(\omega) e^{-\omega(\tau_1 - \tau_2)} = \sum_j \langle q_j(\tau_1 - \tau_2) q_j(0) \rangle_B . \quad (3.28)$$

Diese Beziehung wird in Abschnitt 3.3 hergeleitet.

Mit der Spektralen Dichte ist die erste Ordnung der Selbstenergie gegeben durch

$$\Sigma^{(1)}(\tau_l - \tau_r) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s}} \mathbb{G} |\bar{s}\rangle e^{-(\tau_l - \tau_r)E_{\bar{s}}} \mathbb{G} S(\omega) e^{-\omega(\tau_l - \tau_r)}. \quad (3.29)$$

3.3.1 Herleitung der Spektrale Dichte

Der Wechselwirkungsoperator des bosonischen Bades ist gegeben durch:

$$q_j = t_j(b_j^\dagger + b_j) \quad (3.30)$$

Er beschreibt die Auslenkung der bosonischen Mode j des Bades. Bei einem harmonischen Oszillator mit Potential $V(x) = 1/2m\omega^2x^2$ ist die Observable x , die die Auslenkung beschreibt, durch die Summe der bosonischen Erzeuger- und Vernichterooperatoren gegeben.

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a) \quad (3.31)$$

Der Vorfaktor t_j hängt also von der Frequenz der Mode ω_j und der Masse m_j des dadurch beschriebenen Oszillators ab. Eine hohe Auslenkung einer Mode führt zu einer stärkeren Wechselwirkung dieser Mode mit dem System. Neben der Besetzung der einzelnen Moden beeinflusst also die Verteilung der t_j die Wirkung des Bades auf das System maßgeblich. In diesem Abschnitt soll der Zusammenhang der mikroskopischen Größe t_j zur Spektralen Dichte hergestellt werden, die die Stärke des Rauschens bei verschiedenen Frequenzen beschreibt und dabei der Beweis für Gleichung (3.28) erbracht werden.

Für den Badkorrelator gilt:

$$\sum_j \langle q_j(\tau) q_j(0) \rangle_B \quad (3.32)$$

$$= \sum_j t_j^2 \langle e^{\tau H_B} b_j^\dagger e^{-\tau H_B} b_j \rangle_B + \langle e^{\tau H_B} b_j e^{-\tau H_B} b_j^\dagger \rangle_B \quad (3.33)$$

Da $H_B = \sum_j \omega_j b_j^\dagger b_j$ ist gilt

$$e^{\tau H_B} b_j^\dagger e^{-\tau H_B} = b_j^\dagger e^{\tau \omega_j} \quad , \quad e^{\tau H_B} b_j e^{-\tau H_B} = b_j e^{-\tau \omega_j} \quad . \quad (3.34)$$

Somit kann der Korrelator durch $n(\omega_j) = \langle b_j^\dagger b_j \rangle_B$ die Besetzungszahl der Mode j ausgedrückt werden.

$$\sum_j \langle q_j(\tau) q_j(0) \rangle_B \quad (3.35)$$

$$= \sum_j t_j^2 \left(\langle b_j^\dagger b_j \rangle_B e^{\tau \omega_j} + \langle b_j b_j^\dagger \rangle_B e^{-\tau \omega_j} \right) \quad (3.36)$$

$$= \sum_j t_j^2 \left(n(\omega_j) e^{\tau \omega_j} + (1 + n(\omega_j)) e^{-\tau \omega_j} \right) \quad (3.37)$$

Zum Übergang zu kontinuierlichen Frequenzen ω wird die Größe $J(\omega)$ analog zu einer Zustandsdichte definiert. Sie beschreibt jedoch die Stärke des Rauschens.

$$J(\omega) = \sum_j t_j^2 \delta(\omega - \omega_j) 2\pi \quad (3.38)$$

Es gilt $J(\omega) = 0$ für $\omega < 0$ da die bosonischen Moden nur positive Frequenzen haben. Unter Verwendung einer Beziehung, die für die Bose-Einstein-Statistik gilt

$$n(\omega) = \frac{1}{e^{\beta \omega} - 1} \quad \Rightarrow \quad 1 + n(\omega) = -n(-\omega) \quad (3.39)$$

wird der Korrelator ausgedrückt durch

$$\sum_j \langle q_j(\tau) q_j(0) \rangle_B \quad (3.40)$$

$$= \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega) (n(\omega) e^{\tau\omega} - n(-\omega) e^{-\tau\omega}) . \quad (3.41)$$

Durch antisymmetrische Erweiterung von $J(\omega)$ auf negative Frequenzen

$$J(\omega) = -J(-\omega) \quad (3.42)$$

wird die Spektrale Dichte $S(\omega)$ definiert:

$$\sum_j \langle q_j(\tau) q_j(0) \rangle_B \quad (3.43)$$

$$= \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} J(-\omega) n(-\omega) e^{-\tau\omega} + \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega) (-n(-\omega)) e^{-\tau\omega} \quad (3.44)$$

$$= \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \underbrace{J(\omega) (-n(-\omega))}_{=S(\omega)} e^{-\tau\omega} \quad (3.45)$$

Somit ist der Zusammenhang zwischen den Korrelatoren der Badoperatoren und der Spektralen Dichte bewiesen.

3.3.2 Lorentzförmige Spektrale Dichte

Häufig treten Spektralen Dichten der Form

$$S(\omega) = \frac{1}{1 - e^{-\beta\omega}} \cdot \omega \cdot \text{Cut}(\omega) \quad (3.46)$$

auf. Die Funktion $\text{Cut}(\omega)$ beschränkt den Frequenzbereich in dem das Rauschen wirkt. In einem wichtigen Fall ist die Funktion $\text{Cut}(\omega)$ durch eine Lorentz-Funktion gegeben.

$$S(\omega) = \frac{1}{1 + (\omega/\omega_c)^2} \frac{\omega}{1 - e^{-\beta\omega}} \quad (3.47)$$

Die Frequenz ω_c ist ein Maß für den Frequenzbereich in dem das Rauschen signifikant stark ist.

Zweilevelsysteme in der Oxidschicht eines Josephson Kontaktes sind wichtige Quellen für die Dekohärenz eines supraleitenden Qubits (siehe [KC05]). Die Spektraldichte des Rauschens welches durch die Zweilevelfluktuatoren erzeugt wird ist Lorentz-förmig.

3.4 Abbruch der Selbstenergie

In diesem Abschnitt soll dargestellt werden, dass der Abbruch der Reihe für die Selbstenergie eine gültige Näherung für die reduzierte Dichtematrix darstellt.

3.4.1 Selbstenergie in zweiter Ordnung

Um ein Gefühl für die Diagramme zu erhalten, die vernachlässigt werden, sind hier die zwei Diagramme der zweiten Ordnung der Selbstenergie angegeben.

Es muss beachtet werden, dass durch das Entfernen der äußeren Enden eines Diagramms die inneren Integrale nicht mehr bei 0 beginnen dürfen, um die Zeitordnung sicher zu stellen. Da der Wert am rechten Vertex τ_r nicht in einem Bereich von 0 bis zum nächsten Vertex variiert, muss im Ausdruck für die Selbstenergie dafür Sorge getragen werden, dass die inneren Vertizes keine Zeiten kleiner als τ_r annehmen. Dies bedeutet, dass die inneren Integrale bei τ_r beginnen müssen.

Wenn rechts an die Selbstenergie eine freie Zeitentwicklung angeschlossen wird, so wird über τ_r von 0 bis zum links von der Selbstenergie liegenden Vertex integriert. Wenn man die Selbstenergie dann explizit ausschreibt, unterscheiden sich die Integralgrenzen von dem Fall, in dem das Diagramm direkt ausgeschrieben wird. Da die Zeitordnung in beiden Fällen sichergestellt ist, wird über die gleichen Kombinationen von Zeiten integriert. Dies kann man sich beispielsweise für ein Diagramm der Selbstenergie in zweiter Ordnung deutlich machen.

$$\int_0^\beta d\tau_l \int_0^{\tau_l} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_r \hat{=} \int_0^\beta d\tau_l \int_0^{\tau_l} d\tau_r \int_{\tau_r}^{\tau_l} d\tau_1 \int_{\tau_r}^{\tau_1} d\tau_2 \quad (3.48)$$

Die Terme der zweiten Ordnung der Selbstenergie sind in Abbildung 3.7 dargestellt. Explizit gegeben sind sie durch folgende Ausdrücke.

$$\begin{aligned} & \Sigma^{(2a)}(\tau_l - \tau_r) \\ &= \int_{\tau_r}^{\tau_l} d\tau_1 \int_{\tau_r}^{\tau_1} d\tau_2 \mathcal{O} e^{-(\tau_l - \tau_1)H_S} \mathcal{O} e^{-(\tau_1 - \tau_2)H_S} \mathcal{O} e^{-(\tau_2 - \tau_r)H_S} \mathcal{O} \end{aligned} \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned} & \cdot \sum_{j_1, j_2} \langle q_{j_1}(\tau_l) q_{j_1}(\tau_2) \rangle_B \langle q_{j_2}(\tau_1) q_{j_2}(\tau_r) \rangle_B \\ &= \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \int \frac{d\omega_2}{2\pi} \sum_{\bar{s}_1 \bar{s}_2 \bar{s}_3} \mathcal{O} |\bar{s}_1\rangle \langle \bar{s}_1| \mathcal{O} |\bar{s}_2\rangle \langle \bar{s}_2| \mathcal{O} |\bar{s}_3\rangle \langle \bar{s}_3| \mathcal{O} S(\omega_1) S(\omega_2) \end{aligned} \quad (3.50)$$

$$\begin{aligned} & \cdot e^{\tau_r(\omega_2 + E_{\bar{s}_3})} e^{\tau_l(-\omega_1 - E_{\bar{s}_1})} \int_{\tau_r}^{\tau_l} d\tau_1 \frac{e^{\tau_1(\omega_1 + E_{\bar{s}_2} - E_{\bar{s}_3})} - e^{\tau_r(\omega_1 + E_{\bar{s}_2} - E_{\bar{s}_3})}}{\omega_1 + E_{\bar{s}_2} - E_{\bar{s}_3}} e^{\tau_1(-\omega_2 + E_{\bar{s}_1} - E_{\bar{s}_2})} \\ &= \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \int \frac{d\omega_2}{2\pi} \sum_{\bar{s}_1 \bar{s}_2 \bar{s}_3} \mathcal{O} |\bar{s}_1\rangle \langle \bar{s}_1| \mathcal{O} |\bar{s}_2\rangle \langle \bar{s}_2| \mathcal{O} |\bar{s}_3\rangle \langle \bar{s}_3| \mathcal{O} S(\omega_1) S(\omega_2) \end{aligned} \quad (3.51)$$

$$\cdot \left(\frac{e^{-(\tau_l - \tau_r)(\omega_2 + E_{\bar{s}_3})} - e^{-(\tau_l - \tau_r)(\omega_1 + E_{\bar{s}_1})}}{(\omega_1 + E_{\bar{s}_2} - E_{\bar{s}_3})(\omega_1 - \omega_2 + E_{\bar{s}_1} - E_{\bar{s}_3})} + \frac{e^{-(\tau_l - \tau_r)(\omega_1 + \omega_2 + E_{\bar{s}_2})} - e^{-(\tau_l - \tau_r)(\omega_1 - E_{\bar{s}_1})}}{(\omega_1 + E_{\bar{s}_2} - E_{\bar{s}_3})(\omega_2 - E_{\bar{s}_1} + E_{\bar{s}_2})} \right)$$

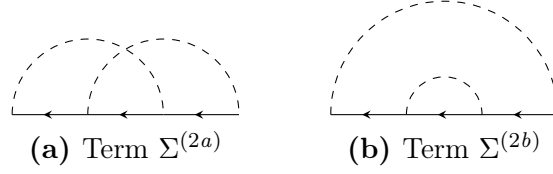


Abbildung 3.7: Terme der zweiten Ordnung der Selbstenergie.

$$\begin{aligned}
 & \Sigma^{(2b)}(\tau_l - \tau_r) \\
 &= \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \int \frac{d\omega_2}{2\pi} \sum_{\bar{s}_1 \bar{s}_2 \bar{s}_3} \mathcal{O} |\bar{s}_1\rangle \langle \bar{s}_1| \mathcal{O} |\bar{s}_2\rangle \langle \bar{s}_2| \mathcal{O} |\bar{s}_3\rangle \langle \bar{s}_3| \mathcal{O} S(\omega_1) S(\omega_2) \\
 & \cdot \left(\frac{e^{-(\tau_l - \tau_r)(\omega_1 + E_{\bar{s}_3})} - e^{-(\tau_l - \tau_r)(\omega_1 + E_{\bar{s}_1})}}{(\omega_2 + E_{\bar{s}_2} - E_{\bar{s}_3})(E_{\bar{s}_1} - E_{\bar{s}_3})} + \frac{e^{-(\tau_l - \tau_r)(\omega_1 + \omega_2 + E_{\bar{s}_2})} - e^{-(\tau_l - \tau_r)(\omega_1 - E_{\bar{s}_1})}}{(\omega_2 + E_{\bar{s}_2} - E_{\bar{s}_3})(\omega_2 - E_{\bar{s}_1} + E_{\bar{s}_2})} \right)
 \end{aligned} \tag{3.52}$$

Die Terme hängen nur von der Zeitdifferenz $\tau_l - \tau_r$ ab.

3.4.2 Abbruchbedingung

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, dass die zweite Ordnung der Selbstenergie gegenüber der ersten Ordnung vernachlässigt werden kann. Exemplarisch wird dazu aufgezeigt, dass das oben als $\Sigma^{(2a)}$ bezeichnete Diagramm der zweiten Ordnung der Selbstenergie kleiner ist als die Selbstenergie in erster Ordnung (vgl. Abbildung 3.8). In Analogie zu entsprechenden Rechnung in anderen diagrammatischen Techniken wird

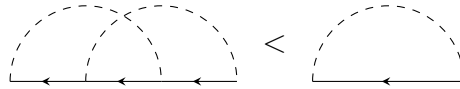


Abbildung 3.8: Vergleich der Diagramme $\Sigma^{(2a)}$ und $\Sigma^{(1)}$

dazu ein Integral über den Selbstenergien verglichen.

$$\int_0^\beta d\tau \Sigma^{(2a)}(\tau) < \int_0^\beta d\tau \Sigma^{(1)}(\tau) \tag{3.53}$$

Um eine Abschätzung für diese Integrale zu erhalten, wird angenommen, dass die freien Zeitentwicklungen den höchst möglichen Beitrag liefern

$$E_{\bar{s}} = 0 \quad \forall \bar{s} \quad \Rightarrow \quad e^{-(\tau_l - \tau_r)E_{\bar{s}}} = 1 \quad (3.54)$$

und alle Matrixelemente von \mathbb{O} beitragen.

$$\mathbb{O}_{s_1 s_2} = 1 \quad \forall s_1, s_2 \quad (3.55)$$

Außerdem wird angenommen, dass alle Frequenzen des Rauschens berücksichtigt werden müssen.

$$\text{Cut}(\omega) = \eta \quad (3.56)$$

Mit diesen Angaben kann zunächst die Abhängigkeit des Korrlators von τ berechnet werden, um anschließend die Integrale über die Terme der Selbstenergie zu berechnen.

$$\sum_j \langle q_j(\tau) q_j(0) \rangle_B = \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\eta\omega}{1 - e^{-\beta\omega}} e^{-\omega\tau} + \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\eta\omega}{1 - e^{-\beta\omega}} e^{-\omega\tau} \quad (3.57)$$

$$= \frac{\eta}{2\pi\beta^2} \psi^{(1)}(1 - \tau/\beta) + \frac{\eta}{2\pi\beta^2} \zeta(2, \tau/\beta) \quad (3.58)$$

Dabei bezeichnet $\psi^{(1)}$ die Polygammafunktion der ersten Ordnung und ζ die Hurwitzsche Zetafunktion. Abbildung 3.9 zeigt schematisch die Abhängigkeit des Korrelators von τ .

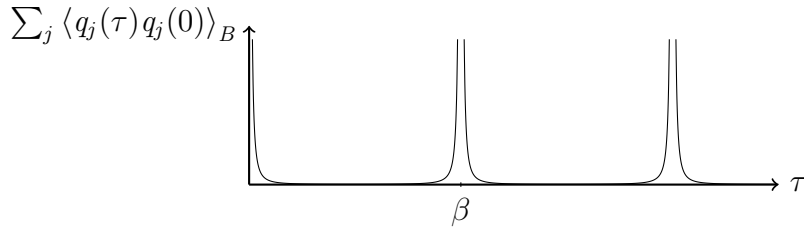


Abbildung 3.9: Illustration der τ -Abhängigkeit des Korrelators $\sum_j \langle q_j(\tau) q_j(0) \rangle$.

Ähnlich zu anderen diagrammatischen Techniken liegt eine hohe Korrelation für kurze Zeiten τ vor. Jedoch ist für $\tau \rightarrow \beta$ ein Anstieg zu erkennen. Außerdem setzt sich die Form periodisch in β fort. In dieser Periodizität spiegelt sich die Ähnlichkeit zum Matsubara Formalismus wieder. Für die Berechnung der Integrale über die Terme der Selbstenergie wird das Verhalten auf $[0, \beta]$ durch Exponentialfunktionen angenähert.

$$\sum_j \langle q_j(\tau) q_j(0) \rangle_B \approx \frac{\eta}{2\pi\beta^2} (e^{-\tau/\beta} + e^{-(\tau-\beta)/\beta}) \quad (3.59)$$

Damit ergeben sich für die Integrale über die Terme der Selbstenergie folgende Ergebnisse.

$$\int_0^\beta d\tau \Sigma^{(1)}(\tau) \approx \int_0^\beta d\tau N \frac{\eta}{2\pi\beta^2} (e^{-\tau/\beta} + e^{-(\tau-\beta)/\beta}) \quad (3.60)$$

$$= N \frac{\eta}{2\pi\beta^2} (\beta(1 - e^{-1}) + \beta(e - 1)) \propto \frac{\eta}{\beta} \quad (3.61)$$

$$\int_0^\beta d\tau \Sigma^{(2a)}(\tau) \approx \int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 N^3 \frac{\eta^2}{(2\pi)^2 \beta^4} (e^{-(\tau-\tau_2)/\beta} + e^{-(\tau-\tau_2-\beta)/\beta}) (e^{-\tau_1/\beta} + e^{-(\tau_1-\beta)/\beta}) \quad (3.62)$$

$$= N^3 \frac{\eta^2}{(2\pi)^2 \beta^4} \beta^3 \frac{(1+e)^2(e^2-1-2e)}{2e^2} \propto \frac{\eta^2}{\beta} \quad (3.63)$$

N bezeichnet die Anzahl der Eigenzustände des Systems. Um einen Abbruch der Selbstenergie zu rechtfertigen muss somit gelten,

$$\eta \ll 1. \quad (3.64)$$

Der Entwicklungsparameter der Reihe für die Selbstenergie ist somit durch η gegeben. Für Fälle mit anderen Funktionen $\text{Cut}(\omega)$ gilt somit im Wesentlichen auch, dass ein

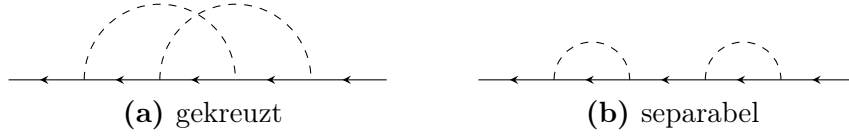


Abbildung 3.10: Zwei Diagramme der Entwicklung der reduzierten Dichtematrix in zweiter Ordnung von H_I .

Abbruch der Selbstenergie für kleine Kopplungsstärken möglich ist. Ein Abbruch der Reihe der reduzierten Dichtematrix in Ordnungen von H_I ist jedoch nicht unter der gleichen Bedingung möglich. Zwei Diagramme der selben Ordnung von H_I (z.B. in Abbildung 3.10) können nicht ab der selben Kopplungsstärke vernachlässigt werden. Die Integration über die freie Zeitentwicklung im separablen Diagramm liefert große Beiträge. Der entsprechende Beitrag im anderen Diagramm ist durch die Korrelatoren unterdrückt. Ein Abbruch der Selbstenergie liefert jedoch eine konsistente Näherung, da entsprechende Diagramme aufsummiert werden.

3.5 Allgemeinere Wechselwirkung

Wenn das durch H_S beschriebene System ein Qubit-System darstellt, ist es sinnvoll anzunehmen, dass die Qubits einzeln an untereinander gleiche Bäder koppeln. Der Hamilton-Operator der Wechselwirkung H_I muss folgendermaßen angepasst werden:

$$H_I = \mathbb{O} \sum_j q_j = \sum_n \mathbb{O}^{(n)} \cdot \sum_j q_j \quad \rightarrow \quad H_I = \sum_{n,j} \mathbb{O}^{(n)} q_j^{(n)} = \sum_n h_n . \quad (3.65)$$

Es wird angenommen, dass die Bäder der einzelnen Qubits gleich beschaffen sind und dass die Badoperatoren nicht untereinander korreliert sind.

$$\langle q_j^{(n)}(\tau_1) q_j^{(n)}(\tau_2) \rangle_B = \langle q_j^{(k)}(\tau_1) q_j^{(k)}(\tau_2) \rangle_B \quad \langle q_j^{(n)}(\tau_1) q_j^{(k)}(\tau_2) \rangle_B = 0 \quad \text{für } n \neq k \quad (3.66)$$

Diese Situation lässt sich auf die zuvor entwickelte Theorie zurückführen. Die Selbstenergie Σ des Problems ist gegeben durch

$$\Sigma = \sum_n \Sigma_n . \quad (3.67)$$

Dabei sind die Selbstenergien Σ_n durch die obige Definition der Selbstenergie gegeben, wenn für die Wechselwirkung H_I der Operator h_n verwendet wird.

3.6 Reproduzieren des Ergebnisses aus [DAAS13]

Um den Zusammenhang der diagrammatischen Methode mit der Arbeit in [DAAS13] zu verdeutlichen, wird in diesem Abschnitt gezeigt, wie das grundlegende Ergebnis aus [DAAS13] mit Hilfe der in dieser Arbeit verwendeten Gleichungen erreicht werden kann. In [DAAS13] wird die Wahrscheinlichkeit berechnet, dass sich das gekoppelte System im Grundzustand $|0\rangle$ von H_S befindet (vgl. Gleichung (2.6) auf Seite 11). In der Notation des Papers wird diese Wahrscheinlichkeit als \tilde{P}_0 bezeichnet. Sie ist durch ein Matrixelement der reduzierten Dichtematrix gegeben

$$(\tilde{\rho}_S)_{00} = \langle 0| \langle 0| = \frac{1}{\langle \mathcal{S} \rangle_o} (\rho_S)_{00} \langle 0| \langle \mathcal{S} \rangle_B |0\rangle \quad (3.68)$$

In [DAAS13] wird eine störungstheoretische Entwicklung in H_I bis zur zweiten Ordnung verwendet. Die ersten zwei Terme der Entwicklung der reduzierten Dichtematrix ergeben

$$\langle 0| \langle 0| \approx \frac{(\rho_S)_{00}}{\langle \mathcal{S} \rangle_o} \left(1 + \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \sum_{\bar{s}, j} |\mathcal{G}_{\bar{s}0}|^2 \langle q_j(\tau_1) q_j(\tau_2) \rangle_B e^{(E_0 - E_{\bar{s}})(\tau_1 - \tau_2)} \right) \quad (3.69)$$

$$= \frac{(\rho_S)_{00}}{\langle \mathcal{S} \rangle_o} \left(1 + \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s}} |\mathcal{G}_{\bar{s}0}|^2 \frac{S(\omega)}{E_{\bar{s}} - E_0 + \omega} \left(\beta - \frac{e^{\beta(E_0 - E_{\bar{s}} - \omega)} - 1}{E_0 - E_{\bar{s}} - \omega} \right) \right) . \quad (3.70)$$

Im zweiten Schritt wurde neben der Integration die Definition der Spektralen Dichte $S(\omega)$ verwendet.

Zur weiteren Umformung werden zwei Relationen benötigt. Aus der Definition der thermischen Dichtematrix folgt

$$(\rho_S)_{00} e^{-\beta(E_{\bar{s}} - E_0)} = (\rho_S)_{\bar{s}\bar{s}} . \quad (3.71)$$

Das detaillierte Gleichgewicht besagt

$$S(-\omega) = S(\omega) e^{-\beta\omega} . \quad (3.72)$$

Weiterhin wird verwendet

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S(-\omega)}{(E_{\bar{s}} - E_0 + \omega)^2} d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S(\omega)}{(E_0 - E_{\bar{s}} + \omega)^2} d\omega . \quad (3.73)$$

Somit gilt

$$\begin{aligned} \langle |0\rangle \langle 0| \rangle &\approx \frac{(\rho_S)_{00}}{\langle \mathcal{S} \rangle_o} + \frac{1}{\langle \mathcal{S} \rangle_o} \beta \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s}} |\mathcal{O}_{\bar{s}0}|^2 \frac{S(\omega)}{E_{\bar{s}} - E_0 + \omega} (\rho_S)_{00} \\ &+ \frac{1}{\langle \mathcal{S} \rangle_o} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s}} |\mathcal{O}_{\bar{s}0}|^2 \frac{S(\omega)}{(E_0 - E_{\bar{s}} + \omega)^2} (\rho_S)_{\bar{s}\bar{s}} \\ &- \frac{1}{\langle \mathcal{S} \rangle_o} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s}} |\mathcal{O}_{\bar{s}0}|^2 \frac{S(\omega)}{(E_{\bar{s}} - E_0 + \omega)^2} (\rho_S)_{00} . \end{aligned} \quad (3.74)$$

Die Vakuumbigramme $\langle \mathcal{S} \rangle_o$ hängen von H_I ab. Nach Berechnung der Dichtematrix mit Hilfe der Diagrammatik muss eine Normierung vorgenommen werden. Dieser Normierungsfaktor hängt davon ab, welche Terme zur Berechnung der Dichtematrix herangezogen wurden. Da hier ein normierter Ausdruck explizit angegeben werden soll, muss der

Normierungsfaktor entsprechend entwickelt und einbezogen werden.

$$\frac{1}{\langle \mathcal{S} \rangle_o} = \frac{1}{1+x} \approx 1-x \quad (3.75)$$

wobei x von der Ordnung H_I^2 ist. Da nur bis zu dieser Ordnung entwickelt wird, werden Multiplikationen von x mit den Termen höherer Ordnung in H_I vernachlässigt. Zunächst muss x bestimmt werden.

$$\langle \mathcal{S} \rangle_o = \sum_{\hat{s}} (\rho_S)_{\hat{s}\hat{s}} \langle \hat{s} | \langle \mathcal{S} \rangle_B | \hat{s} \rangle \quad (3.76)$$

Dieser Ausdruck ähnelt Gleichung (3.68), daher kann das Ergebnis für die Vakuumdiagramme aus Gleichung (3.74) abgeleitet werden. Da über \hat{s} summiert wird heben sich die zwei Terme mit quadratischem Nenner auf.

$$\langle \mathcal{S} \rangle_o = 1 + \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s}\hat{s}} |\mathcal{G}_{\bar{s}\hat{s}}|^2 S(\omega) \beta \frac{(\rho_S)_{\hat{s}\hat{s}}}{E_{\bar{s}} - E_{\hat{s}} + \omega} \quad (3.77)$$

Wie beschrieben wird dies nun in Gleichung (3.74) verwendet. Dabei wird ausgenutzt, dass sich die Summanden mit $\bar{s} = 0$ der beiden Terme mit quadratischem Nenner genau aufheben.

$$\begin{aligned} \langle |0\rangle \langle 0| \rangle &\approx (\rho_S)_{00} + \beta \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s}} |\mathcal{G}_{\bar{s}0}|^2 \frac{S(\omega)}{E_{\bar{s}} - E_0 + \omega} (\rho_S)_{00} \\ &+ \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s} \neq 0} |\mathcal{G}_{\bar{s}0}|^2 \frac{S(\omega)}{(E_0 - E_{\bar{s}} + \omega)^2} (\rho_S)_{\bar{s}\bar{s}} \\ &- \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s} \neq 0} |\mathcal{G}_{\bar{s}0}|^2 \frac{S(\omega)}{(E_{\bar{s}} - E_0 + \omega)^2} (\rho_S)_{00} \\ &- \beta \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s}\hat{s}} |\mathcal{G}_{\bar{s}\hat{s}}|^2 \frac{S(\omega)}{E_{\bar{s}} - E_{\hat{s}} + \omega} (\rho_S)_{00} (\rho_S)_{\hat{s}\hat{s}} \end{aligned} \quad (3.78)$$

Mit den Definitionen

$$\Gamma_{s_1 s_2} = \int \frac{d\omega}{2\pi} |\mathcal{G}_{s_1 s_2}|^2 \frac{S(\omega)}{(E_{s_2} - E_{s_1} + \omega)^2} \quad (3.79)$$

$$(\delta\rho_S)_{00} = -\beta(\rho_S)_{00} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s}\hat{s}} |\mathcal{G}_{\bar{s}\hat{s}}|^2 \frac{S(\omega)}{E_{\bar{s}} - E_{\hat{s}} + \omega} ((\rho_S)_{\hat{s}\bar{s}} - \delta_{0\hat{s}}) \quad (3.80)$$

ergibt sich

$$\langle |0\rangle \langle 0| \rangle \approx (\rho_S)_{00} + (\delta\rho_S)_{00} - \sum_{\bar{s} \neq 0} (\Gamma_{0\bar{s}}(\rho_S)_{00} - \Gamma_{\bar{s}0}(\rho_S)_{\bar{s}\bar{s}}) \quad (3.81)$$

Dies entspricht Gleichung (6) in [DAAS13].

4 Markovnäherung

Die in Kapitel 3 mit Hilfe der Diagrammatik hergeleitete Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) = -H_S \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) + \int_0^\beta d\tau_2 \Sigma(\beta - \tau_2) \tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau_2) \quad (4.1)$$

ähnelt stark der Mastergleichung wie sie mit dem Keldysh-Formalismus hergeleitet wird. Zur Lösung einer Mastergleichung wird häufig die Markovnäherung verwendet. Wenn die Zeitskala des Bades deutlich kleiner ist als die des Systems, so wird davon ausgegangen, dass nur der gegenwärtige Zustand des Systems seine Entwicklung beeinflusst, nicht aber die Vergangenheit. Dies wird als markovsches Verhalten bezeichnet. Die Zeitskala des Bades ist seine Relaxationszeit. Wenn das Bad im Vergleich zu den Veränderung im System schnell relaxiert, so wird eine durch das System verursachte Veränderung im Bad nicht auf das System zurückwirken, da das Bad schon relaxiert ist (vgl. [Car02, Abschnitt 1.3.3]). In diesem Fall zeigen die Badkorrelatoren folgendes Verhalten

$$\langle q_j(\tau) q_j(0) \rangle \propto e^{-\tau/\tau_R} \quad (4.2)$$

wobei τ_R die Relaxationszeit des Bades ist. Wenn die reduzierte Dichtematrix auf dieser Zeitskala nur langsam variiert so erscheint es sinnvoll die Abhängigkeit der reduzierten Dichtematrix von τ_2 im Integral zu vernachlässigen.

Eine häufig verwendete Form der Markovnäherung beinhaltet noch die niedrigste Ordnung der Zeitentwicklung. Diese ist durch das ungestörte System gegeben. Auf den hier vorliegenden Fall übertragen bedeutet dies, dass im Integral verwendet wird

$$\tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau_2) = e^{(\beta - \tau_2)H_S} \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) . \quad (4.3)$$

Die Lösung der sich dadurch ergebenden Differentialgleichung lautet

$$\tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) = \exp \left(-\beta H_S + \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \Sigma(\tau_1 - \tau_2) e^{(\tau_1 - \tau_2) H_S} \right). \quad (4.4)$$

Die reduzierte Dichtematrix muss hermitesch sein. Eine Matrixexponentialfunktion ist genau dann hermitesch, wenn der Exponent hermitesch ist. Die Selbstenergie hängt von Operator \mathcal{O} ab, der in den relevanten Fällen nicht mit H_S vertauscht. Somit ist der Integrand nicht hermitesch. Für die erste Ordnung der Selbstenergie kann gezeigt werden, dass auch das Integral nicht hermitesch ist.

$$\begin{aligned} & \langle s | \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \Sigma(\tau_1 - \tau_2) e^{(\tau_1 - \tau_2) H_S} | s' \rangle \\ &= \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \sum_{\bar{s}, j} \langle s | \mathcal{O} | \bar{s} \rangle \langle \bar{s} | \mathcal{O} | s' \rangle e^{-(\tau_1 - \tau_2) E_{\bar{s}}} \langle q_j(\tau_1) q_j(\tau_2) \rangle_B e^{(\tau_1 - \tau_2) E_{s'}} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Da das transponierte Matricelement eine Exponentialfunktion mit E_s beinhaltet, kann auch mit Hilfe von Integralsubstitution keine Gleichheit gezeigt werden. Da die resultierende Dichtematrix nicht hermitesch wäre, liefert die auf diese Art durchgeführte Markovnäherung kein sinnvolles Ergebnis.

Wenn die Relaxationszeit des Bades sehr kurz ist im Vergleich zur Zeitskala des Systems, so ist folgende Form der Markovnäherung angebracht

$$\tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau_2) = \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta). \quad (4.6)$$

Die Differentialgleichung, die sich damit für die erste Ordnung der Selbstenergie ergibt

lautet

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) = \left(-H_S + \int_0^\beta d\tau_2 \sum_{\bar{s}, j} \langle s | \mathcal{O} | \bar{s} \rangle \langle \bar{s} | \mathcal{O} | s' \rangle e^{-(\beta - \tau_2) E_{\bar{s}}} \langle q_j(\beta) q_j(\tau_2) \rangle_B \right) \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta). \quad (4.7)$$

Diese Gleichung, und somit auch ihre Lösung, ist nicht invariant unter Energieverschiebung $H_S \rightarrow H_S + c$. Ohne Markovnäherung führt die Energieverschiebung zu einem Faktor $e^{-\tau c}$ zur unnormierten reduzierten Dichtematrix $\tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau)$. Durch die Normierung wird dieser Faktor aufgehoben. Im Fall mit Markovnäherung kann die Energieverschiebung jedoch nicht in einen Vorfaktor absorbiert werden. Somit wird auch mit dieser Markovnäherung kein sinnvolles Ergebnis für die reduzierte Dichtematrix gefunden.

In dem hier vorliegenden Fall scheint eine Markovnäherung fundamental nicht möglich zu sein. Dies ist durch die τ -Abhängigkeit des Korrelators begründet. Neben einem Abfall, der näherungsweise die Form $e^{-\tau/\tau_R}$ hat, liegt noch ein Anstieg für $\tau \rightarrow \beta$ vor (vgl. Abschnitt 3.4). Im Vergleich mit dem Keldysh-Formalismus wird außerdem deutlich, dass durch die Kontur im Zeitraum dort eine Symmetrie in den Termen vorliegt. Das Fehlen dieser Symmetrie ist bei der hermiteschen Konjugation

$$(A \cdot B)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad (4.8)$$

problematisch. Durch die Symmetrie entstehen auch Energiedifferenzen, die eine Energieverschiebung ermöglichen. Diese Gründe führen zu den oben beschriebenen Problemen bei der Durchführung einer Markovnäherung.

5 Lösung im Laplaceraum

Zur Lösung der in Kapitel 3 hergeleiteten Gleichung für die reduzierte Dichtematrix

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) = -H_S \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) + \int_0^\beta d\tau_2 \Sigma(\beta - \tau_2) \tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau_2) \quad (5.1)$$

bietet sich ein Übergang in den Laplaceraum (vgl. [BS05]) an,

$$\tilde{\rho}_S^{(u)}(\epsilon) = \int_0^\infty \tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau) e^{-\epsilon\tau} d\tau \quad , \text{ wobei } \quad \epsilon = i\omega + \eta \quad (5.2)$$

weil ein Faltungsintegral auftritt. Da die Integration bis β ausgeführt wird und nicht bis ∞ , handelt es sich nur im Kontext der Laplacetransformation um eine Faltung. Die Integration von β bis ∞ liefert in diesem Fall keinen Beitrag, da Funktionen, die in den Laplaceraum transformiert werden für negative Zeiten Null sind.

Die definierende Gleichung für die unnormierte reduzierte Dichtematrix im Laplaceraum lautet

$$\epsilon \tilde{\rho}_S^{(u)}(\epsilon) - \tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau = 0) = (-H_S + \Sigma(\epsilon)) \tilde{\rho}_S^{(u)}(\epsilon) . \quad (5.3)$$

Dabei wurde neben der Faltungsregel die Transformationsregel für Ableitungen verwendet (siehe [BS05, S.858]). Die Lösung dieser Gleichung ist gegeben durch

$$\tilde{\rho}_S^{(u)}(\epsilon) = (\epsilon + H_S - \Sigma(\epsilon))^{-1} \tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau = 0) = \frac{\tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau = 0)}{\epsilon + H_S - \Sigma(\epsilon)} \quad (5.4)$$

$\tau = 0$ entspricht einer unendlich hohen Temperatur. Im thermischen Gleichgewicht sind in diesem Fall alle Zustände gleichstark besetzt. Daher wird angenommen, dass auch mit Wechselwirkung gilt, dass $\tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau = 0) \propto \mathbb{1}$.

5.1 Bedingungen

Aufgrund der Definition der Laplacetransformation (siehe Gleichung (5.2)) und da die Dichtematrix im Realraum hermitesch ist, muss gelten

$$\left(\tilde{\rho}_S^{(u)}(\epsilon)\right)^\dagger = \tilde{\rho}_S^{(u)}(\epsilon^*) . \quad (5.5)$$

Gleichung (5.3) erfüllt dies, wenn zusätzlich zwei Bedingungen erfüllt sind:

$$1) \quad \Sigma^\dagger(\epsilon) = \Sigma(\epsilon^*) \Rightarrow \Sigma^\dagger(\tau) = \Sigma(\tau) \quad (5.6)$$

$$2) \quad [\tilde{\rho}_S^{(u)}(\epsilon), -H_S + \Sigma(\epsilon)] = 0 \quad (5.7)$$

Bedingung 2) wird von der Lösung (Gleichung (5.4)) immer erfüllt, wenn für die Anfangsbedingung gilt, dass $[\tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau = 0), -H_S + \Sigma(\epsilon)] = 0$. Dies ist für die Annahme $\tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau = 0) \propto \mathbb{1}$ gegeben.

Bedingung 1) wird für die erste Ordnung der Selbstenergie erfüllt. Dies wird in Abschnitt 5.1.1 gezeigt.

5.1.1 Eigenschaften der Diagramme

Wie in Kapitel 4 dargestellt ist, ist es nicht trivial eine Lösung für die reduzierte Dichtematrix zu erhalten, die hermitesch ist. Für die Lösung im Laplaceraum ergibt sich die Bedingung, dass die Selbstenergie im Realraum hermitesch sein muss. Aus diesen

Gründen beschäftigt sich dieser Abschnitt mit der Frage, welche Diagramme hermitesch sind.

Zuerst wird betrachtet, ob alle Diagramme der Entwicklung der reduzierten Dichtematrix (siehe Abbildung 3.3 auf Seite 20) hermitesch sind. Das Diagramm in nullter Ordnung ist offensichtlich hermitesch. Für das Diagramm in erster Ordnung kann dies durch Substitution in den Integralen leicht gezeigt werden:

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \sum_j e^{-(\beta-\tau_1)H_S} \mathcal{O} e^{-(\tau_1-\tau_2)H_S} \mathcal{O} e^{-\tau_2 H_S} \langle q_j(\tau_1) q_j(\tau_2) \rangle_B \quad (5.8) \\
 &= \int_\beta^0 d\tau_4 \int_\beta^{\tau_4} d\tau_3 \sum_j e^{-\tau_4 H_S} \mathcal{O} e^{-(\tau_3-\tau_4)H_S} \mathcal{O} e^{-(\beta-\tau_3)H_S} \langle q_j(\tau_3 - \tau_4) q_j(0) \rangle_B \\
 &= \int_0^\beta d\tau_3 \int_0^{\tau_3} d\tau_4 \sum_j e^{-\tau_4 H_S} \mathcal{O} e^{-(\tau_3-\tau_4)H_S} \mathcal{O} e^{-(\beta-\tau_3)H_S} \langle q_j(\tau_3 - \tau_4) q_j(0) \rangle_B
 \end{aligned}$$

die letzte Zeile entspricht dem hermitesch adjungierten der ersten Zeile, da \mathcal{O} hermitesch

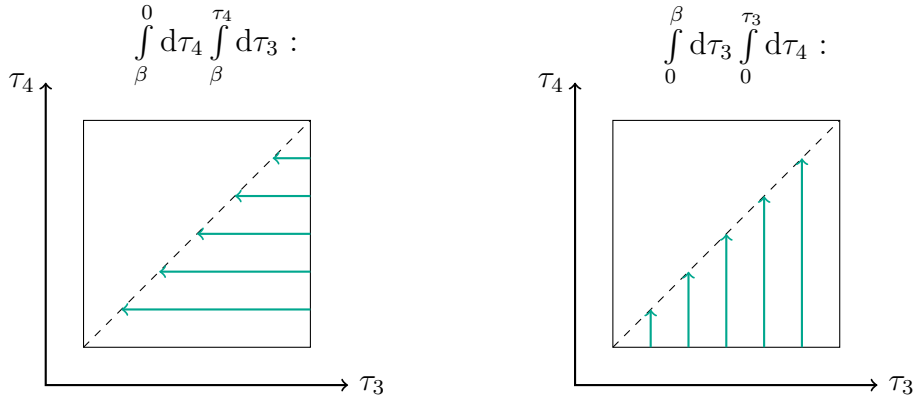


Abbildung 5.1: Diese Abbildungen verdeutlichen, dass zwei Möglichkeiten zur Wahl der Integrationsgrenzen identisch sind. Es werden die gleichen Kombinationen der Zahlen τ_3 und τ_4 im Integral abgedeckt.

ist und der Korrelator reell ist. Abbildung 5.1 verdeutlicht, warum die neue Wahl der Integralgrenzen korrekt ist.

Für die Diagramme der zweiten Ordnung zeigt eine ähnliche Rechnung, dass sie nicht hermitesch sind. Dieser Umstand muss bei der Durchführung der Näherung berücksichtigt werden. Da nicht alle Diagramme hermitesch sind, kann ein Vernachlässigen bestimmter Terme der Entwicklung dazu führen, dass die reduzierte Dichtematrix nicht hermitesch ist.

Bei der Betrachtung der Diagramme der Selbstenergie ist ersichtlich, dass die erste Ordnung der Selbstenergie (siehe Gleichung (3.24) auf Seite 21) hermitesch ist. Eine Untersuchung der Gleichungen (3.51) und (3.52) auf Seite 27 zeigt, dass die Diagramme der zweiten Ordnung der Selbstenergie nicht hermitesch sind.

Da die erste Ordnung der Selbstenergie hermitesch ist, gibt es für diese Näherung eine korrekte Lösung im Laplaceraum. Somit existiert in dieser Näherung (siehe Abbildung 5.2) eine hermitesche Lösung für die reduzierte Dichtematrix.

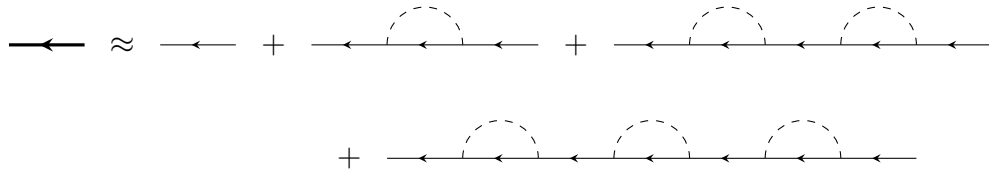


Abbildung 5.2: Diese Diagramme werden in der Näherung aufsummiert in der die Selbstenergie nach der ersten Ordnung abgebrochen wird.

5.2 Analyse der Lösung

Wie gerade gezeigt wurde, ergibt sich eine sinnvolle Lösung für die reduzierte Dichtematrix, wenn die Selbstenergie nach der ersten Ordnung abgebrochen wird,

$$\tilde{\rho}_S^{(u)}(\epsilon) = \frac{\rho_o}{\epsilon + H_S - \Sigma^{(1)}(\epsilon)} \quad , \text{ wobei } \rho_o \propto \mathbf{1} \quad (5.9)$$

da die reduzierte Dichtematrix im Realraum hermitesch ist. Um die Lösung im Realraum zu erhalten ist eine Rücktransformation (vgl. [BS05]) nötig.

$$\tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\eta-i\infty}^{\eta+i\infty} \tilde{\rho}_S^{(u)}(\epsilon) e^{\epsilon\tau} d\epsilon \quad (5.10)$$

Dabei muss η so gewählt werden, dass das Integral im Konvergenzbereich der Laplace-transformierten verläuft. Die Rücktransformation durchzuführen ist im Allgemeinen schwierig. Im Sinne einer Störtheorie sind jedoch zentrale Aussagen über die reduzierte Dichtematrix im Realraum im Limes kleiner Kopplungsstärken möglich.

5.2.1 Renormierung der Energien

Die Selbstenergie in erster Ordnung hängt von der Spektralen Dichte ab. Diese ist ein Maß für die Stärke der Kopplung des Bades an das System. Im Limes sehr kleiner Kopplungen liefert $\Sigma^{(1)}(\epsilon)$ somit nur sehr geringe Beiträge, sodass die Matrix $(\mathbf{1}\epsilon + H_S - \Sigma^{(1)}(\epsilon))$ näherungsweise in der Basis von H_S diagonal ist. Eine Approximation für die reduzierte Dichtematrix im Laplaceraum ist daher durch folgende Gleichung gegeben

$$\tilde{\rho}_S^{(u)}(\epsilon) \approx \rho_o \begin{pmatrix} \frac{1}{\epsilon + E_0 - \Sigma_{00}^{(1)}(\epsilon)} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{1}{\epsilon + E_1 - \Sigma_{11}^{(1)}(\epsilon)} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{1}{\epsilon + E_2 - \Sigma_{22}^{(1)}(\epsilon)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Eine Rücktransformation könnte mit Hilfe der folgenden Korrespondenz

$$\frac{1}{\epsilon + a} \bullet \text{---} \circ \quad e^{-a\tau} \quad , \text{ wobei } \operatorname{Re}(\epsilon) > -a \quad (5.12)$$

durchgeführt werden, wenn die Selbstenergie im Laplaceraum von ϵ unabhängig wäre. Wie in Gleichung (5.10) deutlich wird, wird bei der Rücktransformation über den Imaginärteil von ϵ integriert. Die Wahl des Realteils hat keinen Einfluss auf das Ergebnis, solange er in den Konvergenzbereich fällt. Im Limes sehr kleiner Kopplungsstärken ist der Beitrag der Selbstenergie

$$\Sigma^{(1)}(\epsilon) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s}} \mathbb{O} |\bar{s}\rangle \langle \bar{s}| \mathbb{O} \frac{S(\omega)}{E_{\bar{s}} + \epsilon + \omega} \quad (5.13)$$

wie zuvor beschrieben nahezu vernachlässigbar, da sie von der Spektralen Dichte abhängt. In dem Fall, in dem der Integrand singulär wird, liefert das Integral den größten Beitrag. Dies geschieht nur, wenn der Imaginärteil von ϵ gerade Null ist. Unter der Annahme, dass $S(\omega)$ nicht stark variiert, liefert jede Wahl des Realteils von ϵ einen ähnlichen Wert. Die Näherung

$$(\mathbb{1}\epsilon + H_S - \Sigma^{(1)}(\epsilon))_{nn} \approx \epsilon + E_n - \Sigma_{nn}^{(1)}(-E_n) \quad (5.14)$$

erweist sich als sinnvoll. Für die Verwendung der obigen Korrespondenz muss gelten:

$$2E_n > -\Sigma_{nn}^{(1)}(-E_n). \quad (5.15)$$

Dies ist in dem hier betrachteten Limes erfüllt, da der Beitrag der Selbstenergie von der Spektralen Dichte abhängt. Die Rücktransformation liefert eine Näherung für die reduzierte Dichtematrix im Limes kleiner Kopplungsstärken.

$$\tilde{\rho}_S(\beta) \approx \frac{1}{Z_{S,ren}} \begin{pmatrix} e^{-\beta(E_0 - \Sigma_{00}^{(1)}(-E_0))} & 0 & 0 & & \\ 0 & e^{-\beta(E_1 - \Sigma_{11}^{(1)}(-E_1))} & 0 & \dots & \\ 0 & 0 & e^{-\beta(E_2 - \Sigma_{22}^{(1)}(-E_2))} & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

Im Geltungsbereich dieser Näherung findet also keine Deformation der Eigenzustände statt, da die reduzierte Dichtematrix in der Basis von H_S diagonal ist. Jedoch ist eine Renormierung der Energien zu beobachten.

5.2.2 Deformation – Korrektur der Eigenzustände

Entsprechend obiger Korrespondenz lautet die Form der Dichtematrix des Systems im thermischen Gleichgewicht im Laplaceraum

$$\rho_S(\epsilon) \propto \frac{1}{\epsilon + H_S}. \quad (5.17)$$

Im Vergleich mit der reduzierten Dichtematrix im Laplaceraum (Gleichung (5.9)) kann $\Sigma^{(1)}(\epsilon)$ als Störterm aufgefasst werden. Im vorausgehenden Abschnitt wurde die aus dieser Störung resultierende Korrektur der Eigenenergien hergeleitet. Analog zur nichtentarteten zeitunabhängigen Störungstheorie ergibt sich ein Ausdruck für die Deformation der Eigenzustände, die durch die Wechselwirkung mit dem Bad hervorgerufen wird.

$$|s^{(1)}\rangle = |s\rangle + \sum_{s' \neq s} \frac{\langle s' | \Sigma^{(1)}(-E_s) | s \rangle}{E_s - E_{s'}} |s'\rangle \quad (5.18)$$

Wie im vorherigen Abschnitt muss ein Wert für ϵ gewählt werden. Dieser muss reell sein, da nur in diesem Fall ein nicht verschwindender Beitrag entsteht. Die Wahl $\epsilon = E_s$ erscheint sinnvoll.

Dieser Ausdruck erlaubt es zu quantifizieren, wann die Wechselwirkung mit dem Bad eine Deformation der Eigenzustände hervorruft. Eine Mischung mit Zustand $|s'\rangle$ tritt auf, wenn

$$\left| \frac{\langle s' | \Sigma^{(1)}(-E_s) | s \rangle}{E_s - E_{s'}} \right| = \left| \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\bar{s}} \langle s' | \mathcal{O} | \bar{s} \rangle \langle \bar{s} | \mathcal{O} | s \rangle \frac{S(\omega)}{(E_s - E_{s'})(E_{\bar{s}} - E_s + \omega)} \right| \gtrsim 1 \quad (5.19)$$

Der wesentliche Beitrag des Integrals entsteht an der Singularität des Integranden. Daher kann die Bedingung vereinfacht werden. Eine Mischung der Zustände $|s\rangle$ und $|s'\rangle$ tritt auf, wenn ein \bar{s} existiert, für das gilt

$$\langle s'|\mathbb{O}|\bar{s}\rangle \langle \bar{s}|\mathbb{O}|s\rangle \neq 0 \quad \text{und} \quad \left| \frac{S(E_s - E_{\bar{s}})}{E_s - E_{s'}} \right| \gtrsim 1. \quad (5.20)$$

Der Vergleich der Spektralen Dichte, welche die Stärke des Rauschens charakterisiert, zu den Energiedifferenzen im System stellt somit ein Maß für die Deformation dar.

Für den Spezialfall $J(\omega) = \eta\omega$, der im Zusammenhang mit dem Abbruch der Reihe für die Selbstenergie in Abschnitt 3.4 betrachtet wurde, ergibt sich folgende Bedingung:

$$\left| \frac{\eta k_B T}{E_s - E_{s'}} \right| \gtrsim 1 \quad \text{für} \quad E_s - E_{\bar{s}} \ll k_B T. \quad (5.21)$$

Abhängig von der Temperatur T kann somit auch im Regime $\eta < 1$ in dem die Gleichungen gültig sind, Deformation auftreten.

Im Spezialfall in dem die Basis des Systems und des Wechselwirkungsoperators gleich sind ($[H_S, H_I] = 0$), tritt auch bei sehr starker Kopplung keine Deformation auf, da in jedem Term eines der Matrixelemente des Operators \mathbb{O} Null ergibt. Das Ergebnis stimmt somit mit den in Kapitel 3 formulierten Erwartungen überein.

6 Dekohärenz im Quantenemulator

Im vorhergehenden Kapitel wurde gezeigt, dass der minimale Energielevelabstand des Systems die Skala ist, anhand welcher beurteilt wird, ob die Wechselwirkung mit der Umgebung zu einer Deformation führt. Die Zuverlässigkeit eines Quantensimulators ist nicht mehr gegeben, wenn eine signifikante Deformation der Eigenzustände des Systems vorliegt. In diesem Fall entspricht das im Quantenemulator beobachtete System nicht dem zu untersuchenden System, welches durch H_S modelliert wird.

Dies begrenzt im Allgemeinen die Skalierbarkeit von Quantenemulatoren. Mit einer zunehmenden Anzahl von Qubits und somit einem exponentiellen Anwachsen der Zahl der Zustände sinkt der typische Energielevelabstand im System. Wie schon in Abschnitt 3.1 erläutert, ist der Quantensimulator zwangsläufig an seine Umgebung gekoppelt. Selbst wenn diese Kopplung gering ist, kann keine unbegrenzte Skalierung vorgenommen werden. Der zuverlässigen Simulation von quantenmechanischen Vielteilchenproblemen mit Hilfe von Quantenemulatoren scheint eine fundamentale Grenze gesetzt.

6.1 Rekonstruktion des Ergebnisses

Mit Hilfe einer diagrammatischen Theorie wurde in Kapitel 3 eine Gleichung hergeleitet, die die reduzierte Dichtematrix des Quantenemulators bestimmt und somit den Einfluss der Umgebung theoretisch beschreibt. Die experimentell am Quantenemulator bestimmte Dichtematrix $\tilde{\rho}_S$ liefert auf Grund der Deformation nicht das gewünschte Ergebnis. Eine Charakterisierung des Rauschens durch die Bestimmung der Spektralen Dichte $S(\omega)$ und des Operators \mathcal{O} eröffnet die Möglichkeit eines iterativen Rückschlusses

von der experimentell bestimmten Dichtematrix $\tilde{\rho}_S$ auf die Eigenbasis und Eigenzustände des Systems ohne Rauschen. Eine Umformung von Gleichung (3.27), welche aus der diagrammatischen Theorie hervorging lautet folgendermaßen:

$$H_S = \left(\int_0^\beta d\tau \Sigma(\beta - \tau) \tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau) - \frac{\partial}{\partial \beta} \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) \right) (\tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta))^{-1} \quad (6.1)$$

Die gemessene Dichtematrix ist normiert. Da mit der inversen Dichtematrix multipliziert wird, hebt sich dieser Faktor auf. Durch die Charakterisierung des Rauschens kann die Selbstenergie in erster Ordnung

$$\Sigma^{(1)}(\beta - \tau) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{O} e^{-(\beta-\tau)H_S} \mathcal{O} S(\omega) e^{-\omega(\beta-\tau)}. \quad (6.2)$$

berechnet werden. Dazu muss H_S bekannt sein. Ausgehend von einem Ansatz für H_S , der für die Berechnung der Selbstenergie verwendet wird, kann die rechte Seite von Gleichung (6.1) berechnet werden, da auch \mathcal{O} in der Eigenbasis des Ansatzes ausgedrückt werden kann. Dies liefert eine verbesserte Annahme für H_S . Somit kann in einem iterativen Verfahren H_S angenähert werden. Dadurch sind die Eigenenergien und Eigenzustände des emulierten Systems bestimmt.

Ein möglicher Ansatz für H_S , folgt aus der Annahme, dass die Deformation nicht stark ist und somit der Ansatz für H_S diagonal ist, in der Eigenbasis der gemessenen reduzierten Dichtematrix. Damit ist nur noch eine Annahme für die Eigenenergien nötig.

6.2 Selbstkonsistente Überprüfung der Deformation

Im vorherigen Abschnitt wurde beschrieben, wie die Ergebnisse einer Quantenemulation verarbeitet werden können, um die durch die Wechselwirkung mit der Umgebung entstehende Deformation zu korrigieren. In diesem Abschnitt soll erläutert werden, wie überprüft werden kann, ob eine solche Korrektur notwendig ist.

Um anhand des Energielevelabstandes überprüfen zu können, ob Deformation auftritt, muss die Selbstenergie berechnet werden. Denn Deformation liegt vor, wenn für eine Wahl von s, s' gilt:

$$\left| \frac{\langle s' | \Sigma^{(1)}(-E_s) | s \rangle}{E_s - E_{s'}} \right| \gtrsim 1. \quad (6.3)$$

Die Kenntnis der Spektralen Dichte des Bades und des Operators \mathcal{O} mit dem das Bad an das System koppelt, wird vorausgesetzt. Die Quantenemulation soll durchgeführt werden, da H_S nicht diagonalisiert werden kann. Daher sind die Eigenenergien von H_S nicht bekannt. Da auch die Eigenbasis von H_S nicht bekannt ist, kann \mathcal{O} nicht in dieser Basis ausgedrückt werden, wie es für die Berechnung der Selbstenergie notwendig ist.

Um zu überprüfen, ob die Deformation für einen bestehenden Quantenemulator vernachlässigbar ist, ist eine selbstkonsistente Vorgehensweise möglich. Unter der Annahme, dass die Wechselwirkung des Quantenemulators mit seiner Umgebung vernachlässigbar ist, müssen die Eigenenergien von H_S und die Matrixelemente von \mathcal{O} bestimmt werden. Damit kann Gleichung (6.3) berechnet werden. Wenn diese Gleichung erfüllt ist, so ist die Deformation vernachlässigbar.

Die Fouriertransformierte des Korrelators $\langle \mathcal{O}(t)\mathcal{O}(0) \rangle$ beinhaltet die gewünschten Informationen. Dies wird im Folgenden erläutert.

$$\langle \mathcal{O}(t)\mathcal{O}(0) \rangle = \sum_g \langle g | \tilde{\rho} e^{i\tilde{H}t} \mathcal{O} e^{-i\tilde{H}t} \mathcal{O} | g \rangle \quad (6.4)$$

Dabei bezeichnet $|g\rangle$ die Eigenzustände von H_S . Da angenommen wird, dass die Wechselwirkung vernachlässigbar ist, wird verwendet,

$$\tilde{\rho} \approx \rho_S \rho_B \quad \text{und} \quad |g\rangle \approx |s\rangle |b\rangle \quad (6.5)$$

wobei $|b\rangle$ die Eigenzustände des Bades bezeichnet. Der Korrelator nimmt damit folgende

Form an.

$$\langle \mathcal{O}(t)\mathcal{O}(0) \rangle \approx \sum_{s_1 s_2} |\mathcal{O}_{s_1 s_2}|^2 \frac{1}{Z_S} e^{-\beta E_{s_1}} e^{i(E_{s_1} - E_{s_2})t} \quad (6.6)$$

Die Fouriertransformierte von diesem Korrelator besteht aus Deltafunktionen an den Orten der Energiedifferenzen von H_S . Durch die Abstände der Deltafunktionen kann somit auf das Energiespektrum von H_S geschlossen werden. Im Rahmen einer Messung handelt es sich um verbreiterte Funktionen, deren Höhe durch $|\mathcal{O}_{s_1 s_2}|^2 \frac{1}{Z_S} e^{-\beta E_{s_1}}$ gegeben ist. Eine Messung dieses Korrelators beinhaltet folglich alle nötigen Informationen. Er ist zugänglich im Rahmen der Linearen Antwort auf eine Störung der Form

$$H' = c \cos(\omega t) \mathcal{O} \quad (6.7)$$

bei der Messung des Erwartungswertes von \mathcal{O} . Die Veränderung des Messwertes durch die Störung ist gegeben durch

$$\delta \langle \mathcal{O}(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \langle [\mathcal{O}(t), \mathcal{O}(t')] \rangle \Theta(t - t') c \cos(\omega t'). \quad (6.8)$$

Da die Korrelatoren nur von der Zeitdifferenz abhängen, handelt es sich um ein Faltungsintegral. Die Fouriertransformierte der gemessenen Größe lautet somit

$$\delta \langle \mathcal{O} \rangle (\omega) = \mathcal{D}^R(\omega) \mathcal{F}(\omega) \quad (6.9)$$

wobei $\mathcal{F}(\omega)$ die Fouriertransformierte von $c \cos(\omega t)$ ist und \mathcal{D}^R die retardierte physikalische Antwort bezeichnet.

$$\mathcal{D}^R(t - t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') \langle [\mathcal{O}(t), \mathcal{O}(t')] \rangle \quad (6.10)$$

Analog zu Greenschen Funktionen beinhaltet $\mathcal{D}^R(\omega)$ alle Informationen und ist äquiva-

lent zur physikalischen Antwort $\mathfrak{D}(\omega)$ für positive Frequenzen, wobei

$$\mathfrak{D}(t - t') = -\frac{i}{\hbar} \langle \mathfrak{O}(t) \mathfrak{O}(t') \rangle \quad (6.11)$$

$\mathfrak{F}(\omega)$ ist durch zwei Deltafunktionen an den Frequenzen $\pm\omega$ gegeben. Durch Messung von $\delta \langle \mathfrak{O}(t) \rangle$ für verschiedene ω kann somit die Fouriertransformierte des Korrelators $\langle \mathfrak{O}(t) \mathfrak{O}(0) \rangle$ bestimmt werden. Dies erlaubt die Berechnung der Selbstenergie im Laplace-raum und damit die Analyse, ob eine Deformation der Eigenzustände des Quantenemulators vorliegt.

7 Zusammenfassung

Um die Zuverlässigkeit von Quantenemulatoren beurteilen zu können, muss die Auswirkung einer Wechselwirkung des Emulators mit seiner Umgebung untersucht werden. Dazu wurde in dieser Arbeit ein Gesamtsystem betrachtet, das aus dem (Qubit-)System (H_S), einem Bad (H_B) und einer Wechselwirkung (H_I) zwischen ihnen besteht und sich insgesamt im thermischen Gleichgewicht befindet. Mit Hilfe des Quantenemulators sollen die Eigenschaften des durch H_S beschriebenen Systems untersucht werden. Durch die Wechselwirkung mit der Umgebung kann das System jedoch nicht isoliert betrachtet werden. Es ist bekannt, dass die reduzierte Dichtematrix des Systems bei unendlich starker Wechselwirkung diagonal in der Eigenbasis von H_I wird. Bei mittlerer Kopplungsstärke tritt also eine Deformation der Eigenzustände der reduzierten Dichtematrix auf, sodass sie sich von den Eigenzuständen des ungekoppelten Systems unterscheiden. Dies bedeutet, dass im Quantenemulator durch die Wechselwirkung mit der Umgebung nicht das gewünschte System simuliert wird.

Um die Frage zu beantworten in welchem Regime eine Deformation auftritt, wurde in dieser Arbeit die reduzierte Dichtematrix des Systems untersucht. Mit Hilfe einer diagrammatischen Entwicklung wurde eine Bestimmungsgleichung für die reduzierte Dichtematrix $\tilde{\rho}_S$ hergeleitet.

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) = -H_S \tilde{\rho}_S^{(u)}(\beta) + \int_0^\beta d\tau_2 \Sigma(\beta - \tau_2) \tilde{\rho}_S^{(u)}(\tau_2) \quad (7.1)$$

Dabei bezeichnet Σ die Selbstenergie, die definiert wurde, um eine Dyson-Gleichung zu erhalten. Die Gleichung liefert die unnormierte reduzierte Dichtematrix $\tilde{\rho}_S^{(u)}$. Eine Normierung kann nachträglich leicht durchgeführt werden.

Es wurde gezeigt, dass eine Markovnäherung zur Lösung der Bestimmungsgleichung nicht verwendet werden kann. Sie führt zu Lösungen, die fundamentale Eigenschaften nicht erfüllen. Im Laplaceraum konnte die Bestimmungsgleichung gelöst werden. Eine störungstheoretische Betrachtung liefert Erkenntnisse über die Dichtematrix im Realraum. Diese erlauben eine Aussage darüber, in welchem Regime keine Deformation auftritt. Dafür muss gelten

$$\left| \frac{\langle s' | \Sigma^{(1)}(-E_s) | s \rangle}{E_s - E_{s'}} \right| \ll 1 \quad \forall (s, s'). \quad (7.2)$$

Die Selbstenergie ist ein Maß für die Stärke der Wechselwirkung, denn sie hängt von der Spektralen Dichte des Rauschens ab. Wenn die Kopplungsstärke zwischen Bad und System also kleiner ist, als der minimale Energielevelabstand im Spektrum des Systems, tritt keine Deformation auf.

Dieses Ergebnis schränkt die Skalierbarkeit von Quantenemulatoren erheblich ein. Mit steigender Größe des zu lösenden Problems wächst der Zustandsraum und somit sinken die Energielevelabstände. Unter der Voraussetzung, dass das Rauschen charakterisiert werden kann, zeigt diese Arbeit jedoch einen Weg auf, um selbstkonsistent überprüfen zu können, ob im vorliegenden Quantenemulator die Deformation vernachlässigt werden kann. Falls die Deformation nicht vernachlässigbar ist, liefert Gleichung (7.1) eine Möglichkeit aus den Messergebnissen auf das durch H_S beschriebene System schließen zu können.

Die Untersuchungen zur reduzierten Dichtematrix in den Kapiteln 3, 4 und 5 sind allgemein. Gleichung (7.1) kann zur Beschreibung aller Systeme herangezogen werden, die an bosonische Freiheitsgrade gekoppelt sind.

Abbildungsverzeichnis

3.1	System	14
3.2	Deformation	16
3.3	Diagrammatische Entwicklung	20
3.4	Selbstenergie	21
3.5	Dyson-Gleichung	21
3.6	Erste Ordnung der Selbstenergie	22
3.7	Terme der zweiten Ordnung der Selbstenergie.	28
3.8	Vergleich der Diagramme $\Sigma^{(2a)}$ und $\Sigma^{(1)}$	28
3.9	Illustration der τ -Abhängigkeit des Korrelators $\sum_j \langle q_j(\tau) q_j(0) \rangle$	29
3.10	Zwei Diagramme der Entwicklung der reduzierten Dichtematrix in zweiter Ordnung von H_I	31
5.1	Integralgrenzen	41
5.2	Diagramme bei erster Ordnung in Selbstenergie	42

Literaturverzeichnis

- [BKM⁺14] BARENDS, R ; KELLY, J ; MEGRANT, A ; VEITIA, A ; SANK, D ; JEFFREY, E ; WHITE, TC ; MUTUS, J ; FOWLER, AG ; CAMPBELL, B u. a.: Superconducting quantum circuits at the surface code threshold for fault tolerance. In: Nature 508 (2014), Nr. 7497, S. 500–503
- [BS05] BÄRWOLFF, Günter ; SEIFERT, Gottfried: Höhere Mathematik für Naturwissenschaftler und Ingenieure. Elsevier Spektrum Akad. Verlag, 2005
- [BSK⁺12] BRITTON, Joseph W. ; SAWYER, Brian C. ; KEITH, Adam C. ; WANG, C-C J. ; FREERICKS, James K. ; UYS, Hermann ; BIERCUK, Michael J. ; BOLLINGER, John J.: Engineered two-dimensional Ising interactions in a trapped-ion quantum simulator with hundreds of spins. In: Nature 484 (2012), Nr. 7395, S. 489–492
- [Car02] CARMICHAEL, Howard (Hrsg.): Statistical methods in quantum optics. Bd. 1: Master equations and Fokker-Planck equations. Berlin : Springer, 2002. – ISBN 3–540–54882–3
- [DAAS13] DENG, Qiang ; AVERIN, Dmitri V. ; AMIN, Mohammad H. ; SMITH, Peter: Decoherence induced deformation of the ground state in adiabatic quantum computation. In: Scientific reports 3 (2013)
- [FGGS00] FARHI, E. ; GOLDSTONE, J. ; GUTMANN, S. ; SIPSER, M.: Quantum Computation by Adiabatic Evolution. (2000)
- [GAN14] GEORGESCU, IM ; ASHHAB, S ; NORI, Franco: Quantum Simulation. In: Reviews of Modern Physics 86 (2014), Nr. 1, S. 153
- [Hau15] HAUCK, Melanie: Arbeitstitel: Emulation of the spin-boson model with superconducting circuits, Karlsruher Institut für Technologie, KIT, Masterarbeit, 2015
- [HCT⁺12] HAUKE, P. ; CUCCHIETTI, F. M. ; TAGLIACOZZO, L. ; DEUTSCH, I. ; LEWENSTEIN, M.: Can one trust quantum simulators? In: Reports on Progress in Physics 75 (2012), August, Nr. 8, S. 082401

- [KC05] KU, Li-Chung ; CLARE, C Y.: Decoherence of a Josephson qubit due to coupling to two-level systems. In: Physical Review B 72 (2005), Nr. 2, S. 024526
- [MSS01] MAKHLIN, Yuriy ; SCHÖN, Gerd ; SHNIRMAN, Alexander: Quantum-state engineering with Josephson-junction devices. In: Reviews of modern physics 73 (2001), Nr. 2, S. 357
- [Uhl76] UHLMANN, Armin: The “transition probability” in the state space of a *-algebra. In: Reports on Mathematical Physics 9 (1976), Nr. 2, S. 273–279
- [Zur91] ZUREK, Wojciech H.: Decoherence and the transition from quantum to classical. In: Physics Today 44 (1991), S. 36–44