Ausbildung des Gleichgewichts in offenen Systemen

Dissertation

ULRICH NÖGEL

D 386

Vom Fachbereich Physik der Universität Kaiserslautern zur Verleihung des akademischen Grades „Doktor der Naturwissenschaften“ genehmigte Dissertation

Betreuer: Prof. Dr. J. Kupsch
Zweitgutachter: Prof. Dr. M. Fleischhauer

Datum der wissenschaftlichen Aussprache: 21. Dezember 2001

„Der Kampf gegen Gipfel vermag ein Menschenherz auszufüllen. Wir müssen uns Sisyphos als einen glücklichen Menschen vorstellen.“

A. Camus

Berichte aus der Physik

Ulrich Nögel

Ausbildung des Gleichgewichts in offenen Systemen

D 386 (Diss. Universität Kaiserslautern)

Shaker Verlag
Aachen 2002

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

Nögel, Ulrich:
Ausbildung des Gleichgewichts in offenen Systemen / Ulrich Nögel.
Aachen : Shaker, 2002
(Berichte aus der Physik)
Zugl.: Kaiserslautern, Univ., Diss., 2001
ISBN 3-8322-0107-6

Copyright Shaker Verlag 2002
Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 3-8322-0107-6
ISSN 0945-0963

Shaker Verlag GmbH • Postfach 1290 • 52013 Aachen
Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9
Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Inhaltsverzeichnis

Abstract **v**

Zusammenfassung **vii**

1 Einleitung **1**

2 Kinematik instabiler Quantensysteme **5**
2.1 Exponentieller Zerfall und Halbgruppe 5
2.2 Instabile Systeme 6
2.3 Gültigkeit des exponentiellen Zerfalls 8
2.3.1 Zerfallsrate 8
2.3.2 Halbgruppe und Zeitevolution 9
2.4 Das inverse Zerfallsproblem 10
2.4.1 Minimale unitäre Dilatation 10
2.4.2 Eigenschaft des Energiespektrums 12

3 Das Friedrichs-Modell **15**
3.1 Das Modell 17
3.2 Die Resolvente 18
3.3 Reduzierte Resolvente und Pol-Näherung 20
3.4 Das Spektrum 22
3.5 Lösung der Schrödingergleichung 25
3.6 Numerische Auswertung 27
3.6.1 Spezifizierung des Modells 27
3.6.2 Analyse des Spektrums 28
3.6.3 Einfluß der Parameter auf die Dynamik 29

4 Fockraum und zweite Quantisierung **35**
4.1 Der Fockraum 35
4.1.1 Tensorräume 35
4.1.2 Symmetrische Tensoren 37
4.2 Operatoren auf dem Fockraum 39
4.2.1 Tensorprodukte von Operatoren 39

4.2.2 Zweite Quantisierung 40
4.2.3 Kontraktionen 42
4.2.4 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren 43
4.2.5 Dynamik freier Teilchen 45
4.3 Exponentialzustände und Weyl Operatoren 46
4.3.1 Exponential- und kohärente Zustände 46
4.3.2 Weyl-Operatoren 48
4.3.3 Freie Dynamik eines Weyl-Operators 50

5 Dynamik offener Systeme **53**
5.1 Dynamische Abbildungen 54
5.2 Relaxation ins thermische Gleichgwicht 56
5.2.1 Die Entropie 56
5.2.2 Das verallgemeinerte H-Theorem 57
5.2.3 Die kanonische Gesamtheit 57
5.2.4 Die KMS-Bedingung 58
5.2.5 Quasifreie dynamische Abbildungen 60
5.3 Reduzierte Dynamik und vollständige Positivität 60
5.4 Halbgruppendynamik 62
5.4.1 Dynamische Halbgruppen und ihre Erzeuger 62
5.4.2 Relaxierende Halbgruppen 64
5.4.3 QDB-Bedingung 65
5.5 Markov-Näherung 66
5.5.1 Verallgemeinerte Mastergleichung 67
5.5.2 Zweite Bornsche Näherung 68
5.5.3 Weak coupling limit 69
5.6 Mastergleichungen in der Quantenoptik 71

6 Die Bargmann-Fock-Darstellung **73**
6.1 Die Bargmann-Fock-Darstellung der Quantenmechanik 74
6.1.1 Der Raum $\mathcal{B}_1$ 74
6.1.2 Der harmonische Oszillator 77
6.1.3 Kanonische Transformationen 78
6.2 Der Bargmann-Fock-Raum $\mathcal{B}_\nu(\mathcal{H})$ 81
6.2.1 Analytische Funktionen über einem Hilbertraum 81
6.2.2 Isometrie zum Fockraum 83
6.2.3 Der reproduzierende Kern 83
6.3 Das $\mathcal{L}^2$-Bild der Bargmann-Fock-Darstellung 84
6.3.1 Gauß-Maße auf komplexen Hilberträumen 84
6.3.2 Der $\mathcal{L}^2$-Raum der analytischen Funktionen 85
6.4 Thermische Erwartungswerte 86
6.4.1 Weyl-Operator 87
6.4.2 Korrelationsfunktionen 88

6.5 Die R-Darstellung 90
6.5.1 Q- und R-Funktion 90
6.5.2 Kanonische Gesamtheit 91
6.5.3 Zustände des harmonischen Oszillators 92

7 Der gedämpfte harmonische Oszillator 97
7.1 Quasifreie dynamische Halbgruppen auf dem Fockraum 98
7.2 Halbgruppendynamik von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren 99
7.3 Halbgruppendynamik eines Weyl-Operators 102
7.3.1 Bargmann-Fock-Darstellung 102
7.3.2 Relaxation ins Gleichgewicht 104
7.3.3 Erzeugungs und Vernichtungsoperatoren als Momente des Weyl-Operators 106
7.4 Korrelationsfunkionen und das Quanten-Regressionstheorem . . . 107
7.4.1 Spektren des elekromagnetischen Feldes 108
7.4.2 Exakte Korrelationsfunktionen 108
7.4.3 Das Quanten-Regressionstheorem 109
7.4.4 Die Korrelationsfunktionen des gedämpfen harmonischen Oszillators 111

8 Der RWA-Oszillator 113
8.1 Das Modell 114
8.2 Spektralanalyse 116
8.3 Reduzierte Dynamik eines Weyl-Operators 117
8.3.1 Anforderungen an das Spektrum 118
8.3.2 Dynamische Eigenschaften des Friedrichs-Modells 118
8.3.3 Reduzierte Dynamik 119
8.3.4 Verschiedene Referenzzustände 120
8.4 Dynamik der Besetzungszahl 122
8.5 Zeitliche Asymptotik 126
8.5.1 Reduzierte Dynamik eines Weyl-Operators 126
8.5.2 Auswertung für ein thermisches Bose-Feld 130
8.5.3 Thermische Besetzungszahl 134
8.5.4 Gleichgewichtszustände 137
8.6 Korrelationsfunktion und Spektrum 138
8.6.1 Thermische Korrelationsfunktion 138
8.6.2 Das Fluktuationsspektrum 142

A Operatoren auf dem Hilbertraum 145
A.1 Der Hilbertraum $\mathcal{H}$ 145
A.2 Räume von Operatoren 147

B Fourier-Transformation von Maßen 151

C Die Baker-Campell-Hausdorf Relation **153**

D Sätze über symmetrische Matrizen **157**

E Normalordnungstechniken für Operatoren **159**
E.1 Mastergleichung in Normalordnung 159
E.2 Halbgruppendynamik eines Weyl-Operators in Bargmann-Fock-Darstellung 161

F Störung von Operatoren **163**
F.1 Störung selbstadjungierter Operatoren 163
F.2 Störung des wesentlichen Spektrums 165
F.3 Das Fehlen des singulär stetigen Spektrums 166

G Die Møller-Operatoren **169**

H Störungstheoretische Entwicklung **175**

I Asymptotik der reduzierten Dynamik **179**
I.1 Irreduzibilität der Weyl-Operatoren 179
I.2 Gleichgewichtszustände 181

Abstract

Stricly speaking, a quantum mechanical system can never be regarded as isolated; it is always part of a larger one. The following thesis deals with the subdynamic of such open systems and the enviromentaly induced formation of the equilibrium state. Moreover, a simple model of quantum optics will help to give a clear picture of the effects of the *Markov approximation* which plays an important role for a simplified description of open systems.

The thesis is prefaced by a short survey of the *kinematics of unstable systems.* At this point the Hilber space of the total system is the direkt sum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ of the Hilbert spaces of the system and its enviroment. On the basis of the *inverse decay problem* it is shown, that the decay law can never be a semigroup as long as a unique ground state of the total system exists. The deviation from the exponential decay will be illustrated by developing exact numerical solutions of the *Friedrichs model.* For that purpuse, a detailed study of the spectrum of the model is given. It turns out, that if the system is strongly coupled to the enviroment, additional oscillations in the decay law appear as a sign of a partial regeneration of the system. The dependence of the oscillating behavior on the coupling strength is investigated. Additionally, the so called *pole-approximation* is introduced. Within this approximation, an exponential decay can be derived by means of the reduced resolvent.

To suitablely describe the relaxation of an *open quantum system* it is necessary to extend the usual unitary dynamics to more general *dynamical maps* on the space of statistical operators. The requirements imposed on such maps are briefly outlined. Important for the further considerations is the *reduced dynamics* of a system S which interacts with an enviroment B such that the total system satisfies a Hamiltonian dynamics. The Hilbert space of the total system is the tensorproduct $\mathcal{H}_{S+B} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$ of the Hilbert spaces of the system and of the enviroment. The reduced dynamics of the systems S forms a *completely positive dynamical map.*

In most applications the reduced dynamics can not be calculated exactly, therefore in the literature usually simplifed descriptions by *completely positive dynamical semigroups* are derived through various kinds of *Markov approximations.* Although some of these approximations violate the complete positivity and even the positivity of the reduced dynamics, a rigorous derivation is possible by means of the *weak coupling limit* (*Van Hove limit*). It can be shown that within this limit the generator of the semigroup satisfies a *quantum detailed balance (QDB) condition* with respect to a *Gibbs state* with (inverse) temperatur β if and only if the enviroment is given by a *KMS state* with the same temperature. Still, little is known about the outcome of this limiting procedure.

The main objective of this thesis is to reveal the consequences of the weak

coupling limit. This is done by comparing the exact reduced dynamics of the *RWA oscillator* before and after the limit is taken. This model consists of a quantum harmonic oscillator in interaction with a scalar Boson field, while only resonant processes are taken into account (*rotating wave approximation*). By applying the weak coupling limit to the RWA oscillator one obtains the semigroup dynamics of the well known *damped harmonic oscillator*. This model is a basic building block for describing the dissipation of a damped laser mode. With the help of the *Bargmann-Fock representation* the dynamics of a *Weyl operator* and the *occupation number* are calculated. Assuming the QDB condition is satisfied, it is verified that for any initial state the systems approaches the Gibbs state. Using the *quantum regression theorem* the *thermal correlation functions* and the *fluctuation spectrum* are obtained.

On the other hand the procedure of the *second quantization* allows to apply the numerical solutions of the Friedrichs model in order to calculate the exact reduced dynamics of the RWA oscillator without any further approximations. Thus, a direct comparison of the results with the semigroup dynamics of the damped harmonic oscillator is possible. To evaluate the case of a thermal Boson field the KMS state of a Weyl operator and of the occupation number operator is explicitly calculated using the Bargmann-Fock representation. In addition a timelike asymptotic expression of these operators is derived in the limit $t \to \pm\infty$ with the help of the general scattering theory. An expansion of these results in terms of a perturbation series quantifies the deviation of the expection of these operators from the expection with respect to the Gibbs state. It turns out, that the lowest correction term is of second order in the coupling constant.

Furthermore a proof is given, that the RWA oscillator for all initial state approaches the ground states if the surrounding Boson field is represented by a normal state. If the Boson field is represented by a KMS state with the inverse temperatur β the RWA oscillator approaches a Gibbs state with a temperatur that may be different from β.

Finally the first order thermal correlation function and the fluctuation spectrum of the RWA oscillator are calculated and compared to the respective results of the damped harmonic oscillator. It turns out that in contrast to the damped oscillator the lineshape of the RWA-oscillator splits into a doublett if the coupling strength is increased.

In addition to the above considerations it is shown how the Bargmann-Fock representation can be used to implement canonical transformations into the quantum optics *R represention*.

Zusammenfassung

Ein quantenmechanisches System kann streng genommen nie als isoliert betrachtet werden; es bildet immer einen Teil eines größeren Systems. Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der Subdynamik eines solchen offenen Systems und der Ausbildung des Gleichgewichts durch den Einfluß der Umgebung. Dabei wird die Auswirkung der sogenannten *Markov-Näherung*, die eine wichtige Rolle bei der vereinfachten Beschreibung offener Systeme spielt, anhand eines grundlegenden Modells aus der Quantenoptik untersucht.

Zunächst wird ein kurzer Überblick über die *Kinematik instabiler Systeme* gegeben. Der Hilbertraum des Gesamtsystems ist hierbei die direkte Summe $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ der Hilberträume des Systems und der Umgebung. Anhand des *inversen Zerfallsproblems* wird gezeigt, daß das Zerfallsgesetz nie exakt eine Halbgruppe bilden kann, solange das Gesamtsystem einen eindeutigen Grundzustand besitzt. Um die Abweichungen vom exponentiellen Zerfall deutlich zu machen, werden exakte numerische Lösungen des *Friedrichs-Modells* entwickelt. Dazu werden zunächst die spektralen Eigenschaften des Modells ausführlich analysiert. Es zeigt sich, daß bei einer starken Kopplung zwischen System und Umgebung zusätzliche Oszillationen im Zerfallsgesetz auftauchen. Diese deuten auf eine teilweise Regeneration des Systems hin. Die Abhängigkeit der Oszillationen von der Kopplungsstärke wird untersucht. Zusätzlich wird die *Pol-Näherung* vorgestellt. Mit ihrer Hilfe kann aus der reduzierten Resolvente ein exponentielles Zerfallsgesetz näherungsweise abgeleitet werden.

Um die Relaxation eines offenen Quantensystems $\mathcal{H}_S$ sinnvoll beschreiben zu können, ist es notwendig, die unitäre Dynamik zu einer allgemeineren *dynamischen Abbildung* auf dem Raum der statistischen Operatoren zu erweitern. Die Anforderungen an eine solche Abbildung werden kurz formuliert. Wichtig für die weiteren Überlegungen ist die *reduzierte Dynamik* eines Systems S, das in Wechselwirkung mit einer Umgebung B steht, so daß das Gesamtsystem eine hamiltonsche Dynamik erfüllt. Der Hilbertraum des Gesamtsystems ist hierbei das Tensorprodukt $\mathcal{H}_{S+B} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$ aus den Hilberträumen des Systems und der Umgebung. Die reduzierte Dynamik des Systems S bildet hierbei eine *vollständig positive dynamische Abbildung.*

In den meisten Anwendungen kann die reduzierte Dynamik nicht exakt berechnet werden. Deshalb wird in der Literatur üblicherweise mit Hilfe verschiedener *Markov-Näherungen* eine vereinfachte Beschreibung durch *vollständig positive dynamische Halbgruppen* abgeleitet. Obwohl manche dieser Näherungen die vollständige Positivität, oder sogar die Positivität der reduzierten Dynamik verletzen, ist eine mathematisch strenge Ableitung mit Hilfe des *weak coupling limit* (*Van-Hove-Limes*) möglich. Man kann zeigen, daß in diesem Limes der Erzeuger der Halbgruppen genau dann eine *QDB-Bedingung* (*quantum detailed balance*)

bzgl. der *kanonischen Gesamtheit* bei einer (inversen) Temperatur β erfüllt, wenn sich die Umgebung in einem *KMS-Zustand* mit gleicher Temperatur befindet. Darüberhinaus ist über die Auswirkungen des Limes wenig bekannt.

Das Hauptziel dieser Arbeit besteht darin, die Folgen des *weak coupling limit* deutlich zu machen. Die geschieht durch Vergleich der reduzierten Dynamik des RWA-Oszillators vor und nach der Durchführung des Limes. Das Modell besteht aus einem harmonischen Oszillator in Wechselwirkung mit einem skalaren Bose-Feld, wobei nur resonante Prozesse berücksichtigt werden (*rotating wave approximation*). Wendet man den *weak coupling limit* auf den RWA-Oszillator an, so erhält man die Halbgruppendynamik des bekannten *gedämpften harmonischen Oszillators.* Dieses Modell stellt ein elementares System zur Beschreibung der Dissipation einer verlustbehafteten Lasermode da. Mit Hilfe der *Bargmann-Fock-Darstellung* wird die Dynamik eines *Weyl-Operators* und der *Besetzungszahl* bestimmt. Es wird verifiziert, daß das System für jeden Anfangszustand in die kanonische Gesamtheit relaxiert, falls der Erzeuger die QDB-Bedingung erfüllt. Durch Anwendung des *Quanten-Regressionstheorems* werden die *thermischen Korrelationsfunktionen* und das *Fluktuationsspektrum* berechnet.

Andererseits ist es möglich, mit Hilfe der *zweiten Quantisierung* die numerischen Ergebnisse des Friedrichs-Modells zu benutzen, um die reduzierte Dynamik des RWA-Oszillators ohne weitere Näherungen zu berechnen und somit die Ergebnisse direkt mit der Halbgruppendynamik des gedämpften harmonischen Oszillators zu vergleichen. Für den Fall eines thermischen Bose-Feldes wird die Bargmann-Fock-Darstellung benutzt, um den KMS-Zustand eines Weyl-Operators und des Besetzungszahl-Operators explizit zu berechnen. Zusätzlich werden für diese Operatoren mit Hilfe der Streutheorie asymptotische Ausdrücke im zeitlichen Limes $t \to \infty$ abgeleitet. Mit Hilfe der Entwicklung dieser Ergebnisse in einer Störungsreihe werden die Abweichungen der Erwartungswerte dieser Operatoren von den Erwartungswerten bzgl. der kanonischen Gesamtheit quantifiziert. Man erhält als kleinste Korrektur Terme in quadratischer Ordnung der Kopplungskonstante.

Weiterhin wird bewiesen, daß der RWA-Oszillator immer in den Grundzustand relaxiert, wenn sich das umgebende Bose-Feld in einem normalen Zustand befindet. Befindet sich das Feld in einem KMS-Zustand mit der inversen Temperatur β, so relaxiert der Oszillator in eine kanonische Gesamtheit mit einer Temperatur, die im allgemeinen von β verschieden sein kann.

Schließlich werden die thermische Korrelationsfunktion erster Ordnung und das Fluktuationsspektrum des RWA-Oszillators bestimmt und mit den entsprechenden Ergebnissen des gedämpften harmonischen Oszillators verglichen. Dabei zeigt der RWA-Oszillators im Gegensatz zum gedämpften Oszillator bei wachsender Kopplungsstärke eine Aufspaltung der Spektrallinie in ein Dublett.

Unabhängig von den bisherigen Überlegungen wird gezeigt, wie die Bargmann-Fock-Darstellung benutzt werden kann, um kanonische Transformationen in die *R-Darstellung* der Quantenoptik zu implementieren.