

Bachelorarbeit

# Modellierung von offenen Quantensystemen mit kohärenten Zuständen

Paul Menczel

Eingereicht am 10. Oktober 2012

Prüfer (Mathematik): Prof. Dr. Marcel Griesemer  
Prüfer (Physik): Prof. Dr. Udo Seifert  
Betreuer: Dipl.-Phys. Kay Brandner



**Universität Stuttgart**

II. Institut für Theoretische Physik  
Institut für Analysis, Dynamik und Modellierung

Pfaffenwaldring 57  
D-70569 Stuttgart



## **Erklärung**

Hiermit bestätige ich, dass die vorliegende Arbeit von mir selbstständig verfasst wurde, keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet wurden. Die Arbeit war weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens und wurde weder vollständig noch in Teilen bereits veröffentlicht. Ich versichere, dass der Inhalt des elektronischen Exemplars mit dem des Druckexemplars übereinstimmt.

Stuttgart, den 10. Oktober 2012



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Motivation</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators</b>	<b>3</b>
2.1	Grundlegende Definitionen . . . . .	3
2.2	Kohärente Zustände . . . . .	4
2.3	Phasenraumdarstellungen des Dichteoperators . . . . .	8
2.4	Beispiele . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Dissipative Dynamik</b>	<b>15</b>
3.1	Fokker-Planck-Gleichung für $\mathcal{P}$ . . . . .	15
3.2	Lösung der Fokker-Planck-Gleichung . . . . .	17
3.3	Verbindung von $\mathcal{P}$ und $\mathcal{Q}$ . . . . .	19
3.4	Zeitentwicklung der Beispiele aus Abschnitt 2.4 . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Ensemble-Thermodynamik</b>	<b>25</b>
4.1	Identifikation der Wärme . . . . .	25
4.2	Entropiebegriffe . . . . .	26
4.3	Inkonsistenz der Wehrl-Entropie . . . . .	31
4.4	Konsistenz der klassischen Entropie . . . . .	33
4.5	Einführung einer effektiven Badtemperatur . . . . .	35
4.6	Verwendung von $\mathcal{P}$ anstatt $\mathcal{Q}$ . . . . .	36
<b>5</b>	<b>Thermodynamik auf Trajektorienebene</b>	<b>39</b>
5.1	Stochastische Thermodynamik . . . . .	39
5.2	R-Größe und Fluktuationstheorem . . . . .	41
<b>6</b>	<b>Ausblick: Generalisierte kohärente Zustände</b>	<b>44</b>
6.1	Allgemeine Konstruktion . . . . .	44
6.2	Beispiel: Spinsysteme . . . . .	46
6.3	Zukünftige Fragestellungen . . . . .	47
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>48</b>
<b>A</b>	<b>Rechnungen und Beweise</b>	<b>50</b>
A.1	Existenz eines $\mathcal{P}$ -Symbols . . . . .	50
A.2	Zeitentwicklung von $\mathcal{P}^{(\text{sup})}$ . . . . .	53
A.3	Limes von Wehrl- und von-Neumann-Entropie . . . . .	54
A.4	Zweiter Term in der Änderung der Systementropie . . . . .	55
A.5	Pfadgewichte . . . . .	56
A.6	Konditionierte Mittelwerte . . . . .	57
<b>B</b>	<b>Notationen und Definitionen</b>	<b>59</b>
B.1	Fouriertransformation einer komplexen Variablen . . . . .	59
B.2	Distributionsräume . . . . .	59
B.3	Positivität und vollständige Positivität . . . . .	60
B.4	Glossar mit verwendeten Symbolen . . . . .	61
<b>C</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>64</b>

# Kapitel 1

## Motivation

Bereits seit den Anfängen der Quantenmechanik gab es Bestrebungen, diejenigen quantenmechanischen Zustände zu finden, die dem klassischen Bild des jeweiligen Systems möglichst nahe kommen. Dadurch versucht man, eine Anschauung für die zunächst abstrakt mathematische „Wellenfunktion“ zu gewinnen, die nach den Postulaten der Quantenmechanik unsere Realität beschreibt. In seinem Aufsatz „Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik“ betrachtete Erwin Schrödinger im Jahr 1926 zunächst die quantenmechanischen Eigenschwingungen (heute Anzahlzustände genannt) eines Punktteilchens im harmonischen Oszillator und schrieb dann [1]:

Ich möchte hier [...] den Übergang zur makroskopischen Mechanik in concreto demonstrieren, indem ich zeige, daß eine *Gruppe* von Eigenschwingungen mit *hoher* Ordnungszahl  $n$  („Quantenzahl“) und relativ kleinen Ordnungszahldifferenzen („Quantenzahldifferenzen“) einen „Massenpunkt“ darzustellen vermag, welcher die nach der gewöhnlichen Mechanik zu erwartende „Bewegung“ ausführt, d.h. mit der Frequenz  $\nu_0$  oszilliert.

Es gibt also eine gewisse Klasse von Wellenfunktionen, die sich wie ein Punktteilchen der klassischen Mechanik durch nichts weiter als ihren Ort  $q$  und ihren Impuls  $p$  charakterisieren lassen. Die komplizierte Dynamik der Schrödingergleichung reduziert sich auf die Beschreibung von Trajektorien im von  $q$  und  $p$  aufgespannten Raum, und diese Trajektorien sehen genauso aus wie die der analogen klassischen Teilchen im Phasenraum. Diese Klasse von Wellenfunktionen nennen wir heute die „kanonischen kohärenten Zustände“ des harmonischen Oszillators. Auch für sehr viele andere Systeme existieren solche Zustände, die dem klassischen Bild möglichst nahe kommen: 1963 gab Askold Perelomov für Systeme, deren Dynamik durch eine beliebige Lie-Gruppe beschrieben wird, eine Konstruktionsvorschrift für solche Zustände an, sie werden „generalisierte kohärente Zustände“ genannt [2].

Im Abschnitt 2.1 dieser Arbeit werden grundlegende Definitionen des harmonischen Oszillators wiederholt und darauf aufbauend dann in Abschnitt 2.2 die kohärenten Zustände des harmonischen Oszillators konstruiert. Zudem werden einige ihrer mathematischen Eigenschaften angegeben und bewiesen.

In der Realität können Quantensysteme aber nie unabhängig von ihrer Umgebung betrachtet werden, da es praktisch unmöglich ist, derart kleine Systeme perfekt zu isolieren. Dieser Umstand wird durch das Konzept eines offenen Quantensystems beschrieben: Wie bei gewöhnlichen offenen Systemen in der klassischen statistischen Physik betrachten wir ein kleines System, das mit seiner Umgebung interagiert, und möchten eine Beschreibung für die resultierende Dynamik des kleinen Systems finden, in die von der Umgebung nur intensive makroskopische Größen wie Temperatur oder Druck eingehen. Es genügt dann aber nicht mehr, das kleine System durch einen einzelnen quantenmechanischen Zustand zu beschreiben, vielmehr muss für ihn eine klassische Mischung aus quantenmechanischen Zuständen angenommen werden, die durch eine Dichtematrix beschrieben wird. Im Prinzip wäre es nun möglich, generalisierte kohärente Zustände in dem Raum der Dichtematrizen (sogenannte „Liouville Coherent States“) einzuführen, und so auf eine quasiklassische Beschreibung zu kommen [3]. In dieser Arbeit soll aber ein anderer Ansatz verfolgt werden: Aufgrund der Resultate von Glauber [4], Sudarshan [5] und Klauder [6] ist es mittels der kohärenten Zustände im ursprünglichen Zustandsraum möglich, die Dichtematrix durch eine

---

(Pseudo-)Wahrscheinlichkeitsverteilung im von  $q$  und  $p$  aufgespannten Raum darzustellen. Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung besitzt eine Zeitevolutionsgleichung vom Fokker-Planck-Typ [7]; aus der Beschreibung von klassischen diffusiven Prozessen sind Gleichungen von diesem Typ wohlbekannt (siehe zum Beispiel [8]).

In Abschnitt 2.3 wird diese Darstellung der Dichtematrix erklärt, Abschnitt 2.4 gibt zudem einige Beispiele für solche Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Mit der Zeitentwicklung beschäftigt sich dagegen Kapitel 3, die Zeitevolutionsgleichung selbst wird in Abschnitt 3.1 hergeleitet. Am Ende des Kapitels über die Dynamik sollen zudem noch einige Plots der Zeitentwicklungen der eben genannten Beispiele ein anschauliches Gefühl für die Gleichung vermitteln (Abschnitt 3.4).

Der Vorteil dieser Beschreibung mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung ist, dass sie einen exzellenten Ausgangspunkt für quasiklassische thermodynamische Rechnungen bietet. Eine häufig untersuchte Größe ist beispielsweise die Informationsentropie dieser Wahrscheinlichkeitsverteilung [9–11]. Nach Alfred Wehrl, der sie 1978 als Erster untersucht hat [12], nennt man sie Wehrl-Entropie. Die kohärenten Zustände helfen uns also nicht nur dabei, eine bessere Anschauung der Quantenmechanik zu erhalten, sondern ermöglichen uns auch gänzlich neue Definitionen und damit Betrachtungsweisen.

Trotz der häufigen Verwendung der Wehrl-Entropie ist dem Autor dieses Textes aber keine frühere Arbeit bekannt, die die thermodynamische Konsistenz dieser Entropiedefinition untersucht. Das heißt der Frage nachgeht, ob bei der oben schon betrachteten Dynamik die Änderung der Gesamtentropie, welche sich aus der Wehrl-Entropie und der Entropie der Umgebung zusammensetzt, niemals negativ ist. Diese Untersuchung wird deshalb hier in Kapitel 4 gründlich durchgeführt.

Die schon erwähnte Beschreibung der Dynamik von kohärenten Zuständen mit kohärenten Trajektorien im von  $q$  und  $p$  aufgespannten Raum erlaubt es uns zudem, ein weiteres Werkzeug zur Untersuchung des Systems zu verwenden: Die stochastische Thermodynamik versucht, thermodynamische Größen wie Arbeit, Wärme oder Entropie nicht nur für ein gesamtes Ensemble von Teilchen, sondern bereits für einzelne Trajektorien zu definieren [13]. 2005 wurde gezeigt, dass man mit diesem Zugang eine Konstruktionsvorschrift für sogenannte R-Größen angeben kann, die nach Definition ein integrales Fluktuationstheorem erfüllen [14]. Im Beispiel von klassischen Teilchen, die eine Brownsche Bewegung ausführen, sind diese integralen Fluktuationstheoreme eine Vereinfachung und Präzisierung vieler bekannter Relationen wie der Jarzynski-Relation [15] oder des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik.

In Kapitel 5 wird das Konzept der stochastischen Thermodynamik noch einmal genauer erklärt und untersucht, ob es möglich ist, dieses Konzept auf das vorliegende offene Quantensystem zu verallgemeinern und ein integrales Fluktuationstheorem zu finden.

Die erwähnte Verallgemeinerung des Konzepts der kohärenten Zustände wird dann in Kapitel 6 noch kurz vorgestellt, damit zukünftige Arbeiten daran anknüpfen und andere Systeme als den harmonischen Oszillator untersuchen können.

# Kapitel 2

## Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

Wir werden uns hier großteils auf die Betrachtung eines harmonischen Oszillators beschränken, dessen kohärente Zustände bereits von Schrödinger untersucht wurden. Die Konstruktion von generalisierten kohärenten Zuständen werden wir erst in Kapitel 6 kurz ansprechen. Die Eigenfrequenz dieses harmonischen Oszillators bezeichnen wir wie üblich mit  $\omega$  und seine Masse sei  $m$ . In diesem Abschnitt werden wir ihn zunächst unabhängig von der Umgebung, dem Wärmebad mit Temperatur  $T$ , betrachten – letzteres kommt erst in Abschnitt 3 dazu.

Der harmonische Oszillator zeichnet sich aber nicht nur durch die Einfachheit seiner kohärenten Zustände aus, er ist auch ein sehr gutes Modell für eine Vielzahl von Systemen, die in der Realität vorkommen. Insbesondere auf dem Gebiet der Quantenoptik findet das Modell häufig Anwendung: Wird das elektromagnetische Feld quantisiert, so kann jede Mode des Felds durch einen harmonischen Oszillator beschrieben werden. Unter dem hier beschriebenen System können wir uns also eine einzelne Lichtmode vorstellen, beispielsweise in einem Laser. In der Realität werden die Spiegel des Lasers nicht perfekt sein, weshalb die Dynamik, die wir später in Kapitel 3 einführen werden, einen dissipativen Anteil besitzen wird.

### 2.1 Grundlegende Definitionen

Um den harmonischen Oszillator zu beschreiben, betrachten wir in der Ortsdarstellung den Hilbertraum  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$  mit dem Skalarprodukt  $\langle \cdot | \cdot \rangle$ . Seien  $\hat{q}$  der Ortsoperator, d.h.  $(\hat{q}\psi)(x) = x \cdot \psi(x)$ , und  $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$  der Impulsoperator. Diese sind auf dem Schwartzraum  $\mathcal{S}$  wesentlich selbstadjungiert [16, Kap. 8.1] und erfüllen die kanonische Vertauschungsrelation  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ . Der Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators ist

$$H := \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2. \quad (2.1)$$

Nach [16, Thm. 8.5] ist auch dieser wesentlich selbstadjungiert auf  $\mathcal{S}$ .<sup>1</sup>

**Leiteroperatoren und Anzahlzustände.** Zur Herleitung der folgenden grundlegenden Relationen siehe [16, Kap. 8.3] oder [17, Kap. 12].

Durch die Einführung von Leiteroperatoren

$$a := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p} \quad \text{bzw.} \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} - \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p} \quad (2.2)$$

mit der Vertauschungsrelation  $[a, a^\dagger] = 1$  erhält der Hamiltonoperator die Form

$$H = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (2.3)$$

---

<sup>1</sup> Im zitierten Theorem wird die wesentliche Selbstadjungiertheit auf dem Definitionsbereich  $\text{span}\{x^n \cdot e^{-x^2/2} \mid n \in \mathbb{N}\}$  gezeigt. Da  $H$  aber auch auf der größeren Menge  $\mathcal{S}$  symmetrisch ist, lässt sich der Beweis dort analog führen.

Als Definitionsgebiete von  $a$  und  $a^\dagger$  verwenden wir wiederum den Schwartz-Raum  $\mathcal{S}$ .  $a^\dagger$  ist dann die Einschränkung des adjungierten Operators zu  $a$  auf  $\mathcal{S}$  (und umgekehrt).

Weiterhin gibt es eine Eigenbasis des Hamiltonoperators aus Anzahlzuständen  $|n\rangle \in \mathcal{S}$  ( $n \in \mathbb{N}$ ) mit  $a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle$ , das heißt  $H |n\rangle = \hbar\omega (n + \frac{1}{2}) |n\rangle$ . Eine Anwendung der Leiteroperatoren erniedrigt bzw. erhöht  $n$ ,

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad \text{bzw.} \quad a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (2.4)$$

deshalb werden die Operatoren  $a$  und  $a^\dagger$  auch Auf- bzw. Aufsteigeoperator genannt. Die Anzahlzustände  $|n\rangle$  kann man durch

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (2.5)$$

aus dem Vakuum  $|0\rangle$  erzeugen, das in Ortsdarstellung die Wellenfunktion

$$\varphi_0(x) := \langle x | 0 \rangle = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (2.6)$$

besitzt.

## 2.2 Kohärente Zustände

Zu den folgenden grundlegenden Eigenschaften der kohärenten Zustände siehe auch [18, Kap. 1], [19, Kap. 4.3] oder [20, Seite 45 ff.].

### 2.2.1 Definition

Wir betrachten für eine beliebige komplexe Zahl

$$\alpha =: \alpha_1 + i\alpha_2 =: \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} p \right) \quad (2.7)$$

(der Grund für diese Schreibweise wird in Gleichung (2.12) deutlich) den Verschiebungsoperator

$$D(\alpha) := e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} = e^{i(p\hat{q} - q\hat{p})/\hbar}. \quad (2.8)$$

Der Operator ist zunächst nur durch die Exponentialreihe auf  $\mathcal{S}$  definiert. Dort können wir ihn aber mit der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel  $e^{X+Y} = e^X e^Y e^{[Y,X]/2}$ , welche gilt falls  $[Y, X]$  mit  $X$  und  $Y$  kommutiert [21, Thm. 13.9], umschreiben zu

$$D(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a} \quad \text{bzw.} \quad D(\alpha) = e^{-\frac{i pq}{2\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p \hat{q}} e^{-\frac{i}{\hbar} q \hat{p}}. \quad (2.9)$$

Den letzten Ausdruck können wir nun über das Funktionalkalkül aus dem Spektralsatz als unitären Operator auf  $\mathcal{H}$  verstehen.

Die kanonischen kohärenten Zustände des harmonischen Oszillators sind definiert als die Vektoren

$$|\alpha\rangle := D(\alpha) |0\rangle = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} |0\rangle, \quad (2.10)$$

die durch Anwendung des Verschiebungsoperators auf das Vakuum entstehen.

Da der Operator  $D(\alpha)$  unitär ist, sind die kohärenten Zustände  $|\alpha\rangle$  wieder normiert. Außerdem ist  $|\alpha\rangle \in \mathcal{S}$  da die Ortsdarstellung

$$\langle x | \alpha \rangle = \langle x | D(\alpha) | 0 \rangle = \int \delta(\xi - x) e^{-\frac{i pq}{2\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p \xi} \varphi_0(\xi - q) d\xi = e^{-\frac{i pq}{2\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x} \varphi_0(x - q)$$

ist, wobei für  $D(\alpha)$  der Ausdruck (2.9) verwendet wurde und die Tatsache, dass  $e^{-\frac{i}{\hbar} q \hat{p}}$  ein Translationsoperator ist. Mit  $\varphi_0$  aus Gleichung (2.6) sieht man sofort, dass der Ausdruck als Funktion von  $x$  Element der Schwartzraums ist.

### Alternative Charakterisierungen

Verwenden wir in der Definition (2.10) den ersten Ausdruck aus (2.9) und dass  $a|0\rangle = 0$  (d.h.  $\exp(-\alpha^* a)|0\rangle = |0\rangle$ ), erhalten wir eine Darstellung von  $|\alpha\rangle$  in der Basis der Anszahlzustände:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle \quad (2.11a)$$

$$= e^{-|\alpha|^2/2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (a^\dagger)^n |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle . \quad (2.11b)$$

Eine weitere äquivalente Definition der kohärenten Zustände ist, dass sie die Eigenzustände des Absteigeoperators  $a$  sind. Unter Verwendung von Gleichung (2.4) ist nämlich

$$a|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{(n-1)!}} |n-1\rangle = \alpha|\alpha\rangle , \quad (2.12)$$

andererseits ist jeder Eigenzustand des Absteigeoperators ein solcher kohärenter Zustand. Denn wenn  $|\psi\rangle := \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n |n\rangle$  ein Eigenzustand zum Eigenwert  $\alpha$  ist, dann muss  $\sqrt{n} \cdot \psi_n = \alpha \cdot \psi_{n-1}$  sein.

### 2.2.2 Lokalisierung im Phasenraum

Im Folgenden sollen die Erwartungswerte und Varianzen der Operatoren  $\hat{q}$  und  $\hat{p}$  für die kohärenten Zustände ausgerechnet werden. Da  $\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$  und  $\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^\dagger - a)$  ist, sind die Erwartungswerte

$$\langle \hat{q} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle \alpha | a | \alpha \rangle + \langle \alpha | a^\dagger | \alpha \rangle) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha + \alpha^*) = q \quad \text{und} \quad (2.13a)$$

$$\langle \hat{p} \rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\langle \alpha | a^\dagger | \alpha \rangle - \langle \alpha | a | \alpha \rangle) = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\alpha^* - \alpha) = p . \quad (2.13b)$$

Unter Verwendung von  $\hat{q}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (a^2 + (a^\dagger)^2 + 2a^\dagger a + 1)$  bzw.  $\hat{p}^2 = \frac{m\omega\hbar}{2} (2a^\dagger a - a^2 - (a^\dagger)^2 + 1)$  erhalten wir analog

$$(\Delta \hat{q})^2 = \langle \hat{q}^2 \rangle - \langle \hat{q} \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad \text{und} \quad (2.14a)$$

$$(\Delta \hat{p})^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \frac{m\omega\hbar}{2} . \quad (2.14b)$$

Man sieht, dass die kohärenten Zustände die Unschärferelation  $\Delta \hat{q} \cdot \Delta \hat{p} \geq \frac{\hbar}{2}$  minimieren. Das bedeutet, der Zustand  $|\alpha\rangle$  ist im von  $q$  und  $p$  aufgespannten Raum (den wir im Folgenden aus Gründen der Einfachheit in Analogie zum klassischen Fall quantenmechanischen Phasenraum oder einfach Phasenraum nennen werden) maximal lokalisiert. Diese Eigenschaft macht die kohärenten Zustände so interessant: Sie sind – wie ja bereits Schrödinger feststellte (siehe Kapitel 1) – diejenigen quantenmechanischen Zustände, die einem Punktteilchen mit scharf festgelegtem Ort  $q$  und Impuls  $p$  am nächsten kommen. Wir wollen dies verwenden, um eine quasiklassische Beschreibung des Systems zu erhalten.

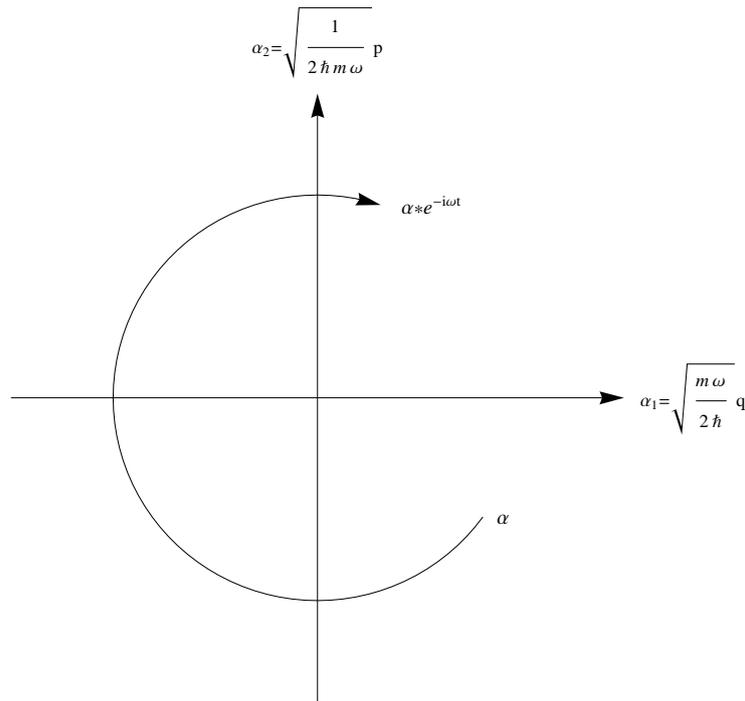
All dies motiviert die Schreibweise  $\alpha = \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} p \right)$  aus Gleichung (2.7) und wir definieren

$$|q, p\rangle := |\alpha\rangle . \quad (2.15)$$

### 2.2.3 Stabilität unter Zeitentwicklung

Die Zeitentwicklung eines Zustands  $|\psi_0\rangle$  ist bekanntlich [17, Kap. 8.2.1] durch

$$|\psi_t\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |\psi_0\rangle =: U(t_0, t) |\psi_0\rangle . \quad (2.16)$$



**Abbildung 2.1:** Trajektorie im Phasenraum eines kohärenten Zustands  $|\alpha\rangle$  unter der Zeitentwicklung aus Gleichung (2.17).

gegeben. Unter dieser Dynamik gehen kohärente Zustände nur wieder in andere kohärente Zustände über.

Um dies zu sehen betrachten wir die aus (2.16) folgende Differentialgleichung  $\frac{d}{dt}(UaU^\dagger) = U[-\frac{i}{\hbar}H, a]U^\dagger = i\omega(UaU^\dagger)$ . Unter Beachtung der Anfangsbedingung  $UaU^\dagger|_{t=t_0} = a$  wird sie gelöst von

$$UaU^\dagger = a e^{i\omega(t-t_0)},$$

daraus folgt

$$aU|\alpha\rangle = e^{-i\omega(t-t_0)}UaU^\dagger U|\alpha\rangle = \alpha e^{-i\omega(t-t_0)}U|\alpha\rangle.$$

Da oben gezeigt wurde, dass die kohärenten Zustände genau die Eigenzustände des Absteigeoperators  $a$  sind, ist das äquivalent zu

$$\boxed{U|\alpha\rangle \propto |\alpha e^{-i\omega(t-t_0)}\rangle}. \quad (2.17)$$

Damit haben wir nun eine wesentliche Eigenschaft der kohärenten Zustände gezeigt: Ein kohärenter Zustand bleibt unter dieser Zeitentwicklung kohärent, und kann damit durch eine Trajektorie im Phasenraum beschrieben werden:  $\alpha(t) = \alpha(t_0) e^{-i\omega(t-t_0)}$ . Durch ein Umschreiben in die Variablen  $q$  und  $p$  sieht man leicht, dass diese Trajektorie auch noch die klassischen kanonischen Bewegungsgleichungen des harmonischen Oszillators erfüllt. Um die Bedeutung dieser Aussage zu unterstreichen, ist in Abbildung 2.1 noch ein Bild dieser Trajektorie gezeigt. Die Trajektorie sieht exakt so aus wie die eines Teilchens der klassischen Mechanik – es handelt sich aber tatsächlich um eine nicht genäherte quantenmechanische Dynamik. Dieser Trajektorienbegriff wird es uns später ermöglichen, unser Modell mit Hilfe der stochastischen Thermodynamik zu untersuchen.

### 2.2.4 Übervollständigkeit

Unterschiedliche kohärente Zustände sind nicht orthogonal: Aus der Darstellung (2.11a) sieht man sofort

$$\langle \beta | \alpha \rangle = e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} \langle 0 | e^{\beta^* a} e^{\alpha a^\dagger} | 0 \rangle = e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2 - 2\beta^* \alpha)} \underbrace{\langle 0 | e^{\beta^* a + \alpha a^\dagger} | 0 \rangle}_1, \quad (2.18)$$

beziehungsweise in  $q$  und  $p$  ausgedrückt

$$\langle q', p' | q, p \rangle = e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{m\omega}{2\hbar} (q-q')^2 + \frac{1}{2\hbar m\omega} (p-p')^2 + \frac{i}{\hbar} (qp' - pq') \right)}. \quad (2.19)$$

Aufgrund dessen kann die Menge der kohärenten Zustände keine Orthonormalbasis des Hilbertraums sein. Sie kann auch schon alleine deshalb keine Basis sein, da sie überabzählbar viele Elemente enthält, und der Hilbertraum separabel ist.

Es gilt aber dennoch die Vollständigkeitsrelation<sup>2</sup>

$$1 = \int |\alpha\rangle\langle\alpha| \frac{d^2\alpha}{\pi} = \int |q, p\rangle\langle q, p| \frac{dqdp}{2\pi\hbar}, \quad (2.20)$$

wegen welcher man von einer übervollständigen Menge von Zuständen spricht („übervollständig“, da man offenbar Elemente aus der Menge entfernen kann, und immernoch eine vollständige Menge behält).

Diese Relation soll hier direkt bewiesen werden, indem wir im Integral die Entwicklung (2.11b) von  $|\alpha\rangle$  beziehungsweise  $\langle\alpha|$  in der Basis der Anzahlzustände einsetzen. In Kapitel 6 werden wir aber sehen, dass diese Vollständigkeitsrelation eine allgemeine Eigenschaft von kohärenten Zuständen ist, die man elegant mit dem Lemma von Schur beweisen kann.

Wenn wir nun also Gleichung (2.11b) einsetzen, und noch Polarkoordinaten  $\alpha = r e^{i\varphi}$  einführen, können wir das Integral zu

$$\int \frac{d^2\alpha}{\pi} e^{-|\alpha|^2} \sum_{n,m} \frac{\alpha^n (\alpha^*)^m}{\sqrt{n!m!}} |m\rangle\langle n| = \frac{1}{\pi} \int dr r e^{-r^2} \int d\varphi \sum_{n,m} \frac{r^{n+m}}{\sqrt{n!m!}} |m\rangle\langle n| e^{i\varphi(n-m)}.$$

umformen. Da die Reihe  $\sum_{n,m} \frac{r^{n+m}}{\sqrt{n!m!}}$  konvergiert, kann die  $\varphi$ -Integration nach dem Satz von Fubini [22, Thm. I.21] mit der Reihe vertauscht werden. Das Integral  $\int e^{i\varphi(n-m)} d\varphi$  liefert 0 für  $n \neq m$  und sonst  $2\pi$ , demnach ist der Ausdruck

$$2 \int dr r e^{-r^2} \sum_n \frac{r^{2n}}{n!} |n\rangle\langle n| = 2 \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{r^{2n+1}}{n!} e^{-r^2} dr}_{1/2} = 1.$$

Hier wurde erneut der Satz von Fubini verwendet, die Vollständigkeitsrelation (2.20) ist damit bewiesen.

Diese Vollständigkeitsrelation erlaubt es uns, jeden Zustand  $|\psi\rangle$  in eine Linearkombination von kohärenten Zuständen  $\int \psi(\alpha, \alpha^*) |\alpha\rangle \frac{d^2\alpha}{\pi}$  zu entwickeln, wobei  $\psi(\alpha, \alpha^*) = \langle\alpha| \psi\rangle$  ist.<sup>3</sup> Diese Funktion ist offenbar  $L^2(\mathbb{R}^2)$ -integrierbar mit Norm

$$\|\psi(\cdot, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 = \int \langle\psi| \alpha\rangle \langle\alpha| \psi\rangle \frac{d^2\alpha}{\pi} = \langle\psi| \psi\rangle \quad (2.21)$$

<sup>2</sup> Das operatorwertige Integral auf der rechten Seite von Gleichung (2.20) ist so zu verstehen, dass durch das Integral ein Operator  $T$  definiert wird, dessen Matrixelemente durch  $\langle\omega| T |\eta\rangle = \int \langle\omega| \alpha\rangle \langle\alpha| \eta\rangle \frac{d^2\alpha}{\pi}$  gegeben sind. Insbesondere ist  $|\alpha\rangle\langle\alpha| \frac{d^2\alpha}{\pi}$  kein Spektralmaß, da  $\langle\alpha| \beta\rangle \neq 0$  auch für  $\alpha \neq \beta$ .

<sup>3</sup>Die Schreibweise  $\psi(\alpha, \alpha^*)$  soll andeuten, dass  $\psi$  im Allgemeinen keine holomorphe Funktion ist: Betrachtet man  $\alpha$  und  $\alpha^*$  als unabhängige Variablen, so hängt  $\psi$  möglicherweise explizit von beiden ab.

und gibt uns eine Darstellung des Zustands  $|\psi\rangle$  in der komplexen Ebene, also dem von  $q$  und  $p$  aufgespannten Phasenraum. Aufgrund der Übervollständigkeit der kohärenten Zustände ist diese Entwicklung aber nicht eindeutig (zum Beispiel ist  $\int \alpha |\alpha\rangle \frac{d^2\alpha}{\pi} = 0$  [23, Gl. 14]).

Eine weitere nützliche Eigenschaft der kohärenten Zustände ist, dass man mit ihnen genauso die Spur eines Operators berechnen kann, wie man es auch mit einer Orthonormalbasis machen würde. Betrachten wir einen Operator  $T$  der Spurklasse. Ein solcher Operator ist kompakt, daher gibt es für ihn eine Schmidt-Zerlegung

$$T = \sum_{j=1}^{\infty} t_j |\psi_j\rangle\langle\chi_j|, \quad (2.22)$$

wobei die  $\{\psi_j\}$  und  $\{\chi_j\}$  orthonormale Systeme sind und  $t_j \geq 0$  [24, Kap. 11]. Da  $T$  in der Spurklasse ist, ist zudem  $\sum_{j=1}^{\infty} t_j < \infty$ .

Bekanntlich gilt  $\text{tr} T = \sum_{j=1}^{\infty} t_j \langle\chi_j|\psi_j\rangle$ , damit können wir nun die Spur berechnen:

$$\begin{aligned} \text{tr} T &= \sum_{j=1}^{\infty} t_j \int \langle\chi_j|\alpha\rangle \langle\alpha|\psi_j\rangle \frac{d^2\alpha}{\pi} \\ &= \int \langle\alpha| \left( \sum_{j=1}^{\infty} t_j |\chi_j\rangle\langle\psi_j| \right) |\alpha\rangle \frac{d^2\alpha}{\pi} = \int \langle\alpha| T |\alpha\rangle \frac{d^2\alpha}{\pi}. \end{aligned}$$

Das Vertauschen der Integration mit der Reihe am Anfang der zweiten Zeile ist nach dem Satz von Fubini erlaubt, da nach der Cauchy-Schwarz-Ungleichung [22, Thm. II.1]

$$\sum_{j=1}^{\infty} \int |t_j \langle\chi_j|\alpha\rangle \langle\alpha|\psi_j\rangle| \frac{d^2\alpha}{\pi} \leq \sum_{j=1}^{\infty} t_j \cdot \underbrace{\|\chi_j(\cdot, \cdot)\|_{L^2} \cdot \|\psi_j(\cdot, \cdot)\|_{L^2}}_1$$

ist und die Reihe über die  $t_j$  konvergiert.

Zusammenfassend haben wir soeben gezeigt, dass für Operatoren  $T$  der Spurklasse die Formel

$$\boxed{\text{tr} T = \int \langle\alpha| T |\alpha\rangle \frac{d^2\alpha}{\pi}} \quad (2.23)$$

gilt.

Zu Bemerkem ist noch Folgendes: Der Ausgangspunkt für unsere Betrachtungen war das nicht verschwindende Matrixelement  $\langle\beta|\alpha\rangle$  aus Gleichung (2.19), wegen dem die kohärenten Zustände kein orthonormiertes System bilden.

Im klassischen Limes  $\hbar \rightarrow 0$  geht das Matrixelement aber für  $\alpha \neq \beta$  gegen Null, das heißt, die kohärenten Zustände werden im klassischen Limes orthogonal. Das ist trotz der Separabilität von  $\mathcal{H}$  möglich, da die kohärenten Zustände dabei zu Deltafunktionen werden, die nicht mehr im Hilbertraum liegen. Diese Orthogonalität wird später der Grund dafür sein, dass alle betrachteten Entropiebegriffe im klassischen Limes in die klassische Phasenraum-Entropie übergehen (siehe Abschnitt 4.2). Dass die kohärenten Zustände für  $\hbar > 0$  aber nicht orthogonal sind, wird der Grund dafür sein, dass die klassische Phasenraum-Entropie für  $\hbar > 0$  nicht mehr thermodynamisch konsistent ist (siehe Abschnitt 4.3).

## 2.3 Phasenraumdarstellungen des Dichteoperators

In der statistischen Physik genügt es nicht, nur reine Zustände  $|\psi\rangle$  zu betrachten. Stattdessen werden Dichtematrizen  $\rho$  betrachtet, die Informationen über ein Ensemble von Zuständen tragen. Ein Operator  $\rho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  ist eine Dichtematrix, wenn er folgende Eigenschaften besitzt [17, Kap. 8.4.4]:

- $\rho$  ist in der Spurklasse mit Spur  $\text{tr } \rho = 1$  (d.h.  $\rho$  ist auch kompakt und beschränkt).
- $\rho$  ist positiv definit, d.h.  $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0$  für alle  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  ( $\rho$  ist insbesondere selbstadjungiert).

Der Erwartungswert einer Observable  $O$  ist in diesem Formalismus

$$\langle O \rangle = \text{tr}(O\rho) . \quad (2.24)$$

Man sieht nun sofort, dass es möglich ist, die Dichtematrix als

$$\rho = \iint \rho(\alpha, \alpha^*, \beta, \beta^*) |\alpha\rangle\langle\beta| \frac{d^2\alpha}{\pi} \frac{d^2\beta}{\pi} , \quad \rho(\alpha, \alpha^*, \beta, \beta^*) = \langle \alpha | \rho | \beta \rangle \quad (2.25)$$

zu schreiben. Diese Darstellung als Funktion zweier komplexer Variablen ist aber wiederum nicht eindeutig, genau wie die Darstellung  $|\psi\rangle = \int \psi(\alpha, \alpha^*) |\alpha\rangle \frac{d^2\alpha}{\pi}$  nicht eindeutig war. Es gibt verschiedene Möglichkeiten, die Dichtematrix durch eine Funktion  $f(\alpha, \alpha^*)$ , die von nur noch einer (komplexen) Variablen abhängt, zu beschreiben. Im Folgenden sollen zwei der Wichtigsten davon vorgestellt werden, auf welche die restliche Arbeit aufbauen wird. Die vorgestellten Definitionen und Eigenschaften finden sich zum Beispiel auch in [19, Kap. 4.4].

### 2.3.1 Die Husimi- $\mathcal{Q}$ -Funktion

Das  $\mathcal{Q}$ -Symbol (auch „lower symbol“ oder, nach Kôdi Husimi [25], Husimi-Funktion) der Dichtematrix ist definiert als

$$\boxed{\mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) := \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle} . \quad (2.26)$$

Aus der positiven Definitheit der Dichtematrix folgt sofort, dass sie für alle  $\alpha$  reell und nicht negativ ist, das  $\mathcal{Q}$ -Symbol ist außerdem eine stetige Funktion. Zudem ist nach Gleichung (2.23)

$$\int \mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2\alpha}{\pi} = \int \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle \frac{d^2\alpha}{\pi} = \text{tr } \rho = 1 , \quad (2.27)$$

damit können wir  $\mathcal{Q}$  als eine Art Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum verstehen.

### 2.3.2 Die Glauber- $\mathcal{P}$ -Funktion

Das  $\mathcal{Q}$ -Symbol enthält nur die Diagonalelemente der Dichtematrix bezüglich der kohärenten Zustände. Wäre die Menge der kohärenten Zustände eine Basis, würde das bedeuten, dass das  $\mathcal{Q}$ -Symbol nicht alle Informationen über die Dichtematrix enthält. Dem ist aber nicht so: In Satz A.1 im Anhang wird gezeigt, dass die Freiheit in der Darstellung (2.25) eine Wahl zulässt, bei der der Integrand diagonal in den kohärenten Zuständen ist:

$$\boxed{\rho = \int \mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) |\alpha\rangle\langle\alpha| \frac{d^2\alpha}{\pi}} . \quad (2.28)$$

Gleichzeitig wird gezeigt, dass sich die Funktion  $\mathcal{P}$  durch Fouriertransformation aus  $\mathcal{Q}$  berechnen lässt (siehe Gleichungen (A.1) und (A.2)), und damit dass auch  $\mathcal{Q}$  noch sämtliche Informationen über die Dichtematrix enthält.

Die in (2.28) auftretende Funktion  $\mathcal{P}(\alpha, \alpha^*)$  heißt  $\mathcal{P}$ -Symbol (auch „upper symbol“). Aufgrund der Arbeit [4] von Roy Glauber wird diese Funktion häufig auch Glauber-Funktion genannt. Glauber erhielt 2005 für seine Forschung auf dem Gebiet der Quantenoptik, also insbesondere auch für diese Arbeit, den Nobelpreis. Diese Vergabe ist aber umstritten, da George Sudarshan seine Arbeit [5] zu dem selben Thema etwas früher veröffentlichte [23]. Deshalb wird die Funktion in der Literatur auch Sudarshan- $\mathcal{P}$ -Darstellung, Sudarshan-Glauber- $\mathcal{P}$ -Darstellung oder ähnlich genannt.

Korrekterweise ist über dieses  $\mathcal{P}$ -Symbol zu sagen, dass es im Allgemeinen keine Funktion im üblichen Sinn ist. Um alle Dichtematrizen durch ein  $\mathcal{P}$ -Symbol darstellen zu können, muss der

Funktionsbegriff auf Distributionen ausgeweitet werden. Es lässt sich leicht ein Beispiel finden, welches zeigt, dass dies nötig ist [6, Anhang B]: Sei  $|\psi_\Omega\rangle$  der Grundzustand eines harmonischen Oszillators mit Frequenz  $\Omega \neq \omega$ . Für die Dichtematrix  $\rho_\Omega := |\psi_\Omega\rangle\langle\psi_\Omega|$  kann man leicht die im Anhang (Gleichung (A.1)) definierte Funktion  $f_{\text{crit}}$  berechnen<sup>4</sup>:

$$f_{\text{crit}}(\beta, \beta^*) = \exp\left(-\frac{\Omega - \omega}{2\omega}\beta_1^2 - \frac{\omega - \Omega}{2\Omega}\beta_2^2\right).$$

Das  $\mathcal{P}$ -Symbol berechnet sich als Fouriertransformation dieser Funktion. Für  $\Omega \neq \omega$  wächst sie aber in eine Richtung exponentiell – ist also im üblichen Sinn nicht fouriertransformierbar. Dieses Beispiel zeigt auch, dass selbst der Raum der temperierten Distributionen  $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$  nicht ausreicht, um alle Dichtematrizen mit einem  $\mathcal{P}$ -Symbol darzustellen. Im Anhang A.1 ist aber erläutert, dass in einem anderen Distributionenraum  $E'$  (definiert im Anhang B.2) tatsächlich immer ein  $\mathcal{P}$ -Symbol existiert.

### Interpretation

In dem Fall, dass  $\mathcal{P} \in L^2(\mathbb{R}^2)$  ist, ist auch  $\mathcal{P}$  normiert. Denn dann ist

$$\begin{aligned} 1 = \text{tr } \rho &= \int \langle\alpha|\rho|\alpha\rangle \frac{d^2\alpha}{\pi} = \iint \mathcal{P}(\beta, \beta^*) \langle\alpha|\beta\rangle \langle\beta|\alpha\rangle \frac{d^2\beta}{\pi} \frac{d^2\alpha}{\pi} \\ &= \int \mathcal{P}(\beta, \beta^*) \int \langle\beta|\alpha\rangle \langle\alpha|\beta\rangle \frac{d^2\alpha}{\pi} \frac{d^2\beta}{\pi} = \int \mathcal{P}(\beta, \beta^*) \frac{d^2\beta}{\pi}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Das Vertauschen der Integrationsreihenfolge von der ersten zur zweiten Zeile ist für  $\mathcal{P} \in L^2(\mathbb{R}^2)$  nach dem Satz von Fubini möglich – der Integrand ist  $L^1(\mathbb{R}^2)$ -integrierbar nach der Cauchy-Schwarz-Ungleichung für die Faktoren  $\mathcal{P}(\beta, \beta^*) \langle\alpha|\beta\rangle$  und  $\langle\beta|\alpha\rangle$ . Ist  $\mathcal{P}$  dagegen eine Distribution, sind die Ausdrücke in der zweiten Zeile nicht definiert. Es gibt aber dennoch eine Darstellung der Dichtematrix als Grenzwert von Dichtematrizen  $\rho_k$ , die  $L^2$ - $\mathcal{P}$ -Symbole  $\mathcal{P}_k$  besitzen (siehe Anhang A.1, Gleichung (A.3)), und unter Verwendung obiger Rechnung gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \int \mathcal{P}_k(\beta, \beta^*) \frac{d^2\beta}{\pi} = \lim_{k \rightarrow \infty} \text{tr} \left( \overbrace{\int \mathcal{P}_k(\alpha, \alpha^*) |\alpha\rangle\langle\alpha| \frac{d^2\alpha}{\pi}}^{\rho_k} \right) = \text{tr } \rho = 1. \quad (2.30)$$

Man könnte aufgrund dessen versucht sein, auch  $\mathcal{P}$  als Wahrscheinlichkeitsverteilung im Phasenraum zu betrachten. Das ist aber deshalb problematisch, da es keinen Grund gibt, weshalb  $\mathcal{P}$  nicht negativ sein sollte (in Abschnitt 3.4 sind auch tatsächlich Beispiele zu sehen, in denen das  $\mathcal{P}$ -Symbol negativ wird). Dennoch werden wir in Abschnitt 4.6 noch genauer beleuchten, was bei dem Versuch passiert,  $\mathcal{P}$  als Wahrscheinlichkeitsverteilung ernst zu nehmen.

### Berechnung

Für die praktische Anwendung ist noch eine weitere Formel nützlich, die es erlaubt, das  $\mathcal{P}$ -Symbol aus den Matrixelementen der Dichtematrix zu berechnen. Im Gegensatz zum oben beschriebenen Weg, der das  $\mathcal{Q}$ -Symbol, also die Matrixelemente  $\langle\gamma|\rho|\gamma\rangle$  verwendet, benötigt diese Formel die Matrixelemente  $\langle-\gamma|\rho|\gamma\rangle$ . Man kommt dafür aber mit nur einer (inversen) Fouriertransformation aus.

Die Formel lautet

$$\mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) = e^{|\alpha|^2} \mathcal{F}_{\gamma \rightarrow \alpha}^{-1} \left[ \langle-\gamma|\rho|\gamma\rangle e^{|\gamma|^2} \right] (\alpha, \alpha^*), \quad (2.31)$$

wobei die Fouriertransformation  $\mathcal{F}$  in Anhang B.1 definiert ist. Falls nötig ist sie im distributiven Sinn zu verstehen. Für den Beweis sei verwiesen auf [26].

Diese Formel ist aufgrund des ausgeklammerten  $e^{|\alpha|^2}$  besonders hilfreich, wenn  $\mathcal{P}$  nur als Distribution verstanden werden kann.

<sup>4</sup>In Abschnitt 2.4 folgen detailliertere Beispiele zur Berechnung von  $\mathcal{Q}$ - und  $\mathcal{P}$ -Symbolen

### 2.3.3 Eigenschaften

#### Berechnung von Erwartungswerten

Das  $\mathcal{Q}$ -Symbol erlaubt es, Erwartungswerte von antinormal geordneten Operatoren einfach zu berechnen: Seien  $r, s \in \mathbb{N}$  und

$$O_1 := a^r (a^\dagger)^s,$$

ein antinormal geordneter Operator, dann ist [19, Kap. 4.4.1]

$$\langle O_1 \rangle = \text{tr} \left( (a^\dagger)^s \rho a^r \right) = \int \alpha^r (\alpha^*)^s \mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2\alpha}{\pi}. \quad (2.32)$$

Die Formel ist folgendermaßen zu verstehen: Falls  $O_1 \rho$  Element der Spurklasse ist, also falls der Erwartungswert existiert, dann ist das Integral endlich und gleich dem Erwartungswert.

Mit dem  $\mathcal{P}$ -Symbol kann dagegen der Erwartungswert eines normal geordneten Operators berechnet werden: Für

$$O_2 := (a^\dagger)^r a^s$$

( $r, s \in \mathbb{N}$ ) gilt [19, Kap. 4.4.3]

$$\langle O_2 \rangle = \text{tr} \left( a^s \rho (a^\dagger)^r \right) = \int (\alpha^*)^r \alpha^s \mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2\alpha}{\pi}. \quad (2.33)$$

Es gilt die gleiche Anmerkung wie bei Gleichung (2.32), zusätzlich muss die rechte Seite der Gleichung (wie bei der Rechnung für die Normiertheit von  $\mathcal{P}$ , Gleichung (2.30)) als Grenzwert

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \int (\alpha^*)^r \alpha^s \mathcal{P}_k(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2\alpha}{\pi}$$

verstanden werden, falls  $\mathcal{P}$  singulär ist.

#### Berechnung von $\mathcal{Q}$ aus $\mathcal{P}$

Durch Einsetzen der Gleichung (2.28) in die Definition des  $\mathcal{Q}$ -Symbols sieht man sofort die wichtige Formel:

$$\mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) = \int \mathcal{P}(\beta, \beta^*) \cdot |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \frac{d^2\beta}{\pi} = \int \mathcal{P}(\beta, \beta^*) \cdot e^{-|\alpha - \beta|^2} \frac{d^2\beta}{\pi} \quad (2.34)$$

$$\mathcal{Q}(q, p) = \int \mathcal{P}(q', p') \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} \left[ (q - q')^2 + \left( \frac{p - p'}{m\omega} \right)^2 \right]} \frac{dq' dp'}{2\pi\hbar}. \quad (2.35)$$

Man erhält aus dem  $\mathcal{P}$ -Symbol also durch eine einfache Faltung mit einem Gaußkern der Breite  $\frac{2\hbar}{m\omega}$ , also durch eine Glättung, wieder das  $\mathcal{Q}$ -Symbol.

An dieser Stelle bemerken wir noch, dass man hieran sehen kann, dass das  $\mathcal{P}$ -Symbol reell ist (falls  $\mathcal{P} \in L^2(\mathbb{R}^2)$ , ansonsten ist nicht definiert, was das bedeuten soll). Die Ursache dafür ist, dass die Faltung mit einer Gaußglocke injektiv ist (was sich mit dem Faltungstheorem der Fouriertransformation sofort zeigen lässt), und das  $\mathcal{Q}$ -Symbol ist reell.

#### Notwendige Bedingungen für die Zulässigkeit

Aus der eben gezeigten Faltungseigenschaft können wir eine wichtige Einsicht gewinnen: Nicht jede beliebige normierte Funktion kann ein  $\mathcal{P}$ -Symbol einer Dichtematrix sein. Eine notwendige Bedingung dafür, dass eine Funktion ein zulässiges  $\mathcal{P}$ -Symbol ist, ist offenbar, dass bei der Faltung in Gleichung (2.34) eine Funktion entsteht, die nur Werte im Intervall  $[0, 1]$  annimmt. Aus den bisherigen Rechnungen geht aber hervor, dass für jede Dichtematrix das  $\mathcal{P}$ -Symbol auch in diesem Sinne zulässig ist – andere  $\mathcal{P}$ -Symbole gehören zu Operatoren, die nicht positiv definit sind oder deren Spur nicht 1 ist.

Das  $\mathcal{P}$ -Symbol kann also zum Beispiel nicht überall negativ sein, sondern nur immer in kleinen Bereichen, durch eine Glättung erhält man dann die nirgends negative  $\mathcal{Q}$ -Funktion. Das kann man anschaulich so verstehen, dass das  $\mathcal{P}$ -Symbol gewisse Quantenfluktuationen noch explizit enthält. Wenn man aber eine sinnvolle Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum erhalten möchte, darf man nicht „genauer hinschauen“, als es die Unschärferelation erlaubt.

Andererseits sind nicht alle Funktionen, die Werte nur im Intervall  $[0, 1]$  annehmen, zulässig für  $\mathcal{Q}$ , sondern nur solche, die die Unschärferelation respektieren: Das  $\mathcal{Q}$ -Symbol darf beispielsweise keine zu engen Peaks enthalten, sonst wäre es nicht möglich, diese Funktion durch Glättung aus dem  $\mathcal{P}$ -Symbol zu erhalten. Diese notwendige Bedingung für die Zulässigkeit einer Funktion für das  $\mathcal{Q}$ -Symbol werden wir später mit der Vermutung von Lieb konkretisieren (siehe Abschnitt 4.2.2).

### 2.3.4 Die Wigner-Funktion

An dieser Stelle sei angemerkt, dass es noch eine weitere häufig verwendete Phasenraumdarstellung des Dichteoperators gibt, die Wigner-Funktion  $W$  (so benannt aufgrund der Arbeit [27] von Wigner, für Details siehe zum Beispiel [19, Kap. 4.4.4]), die in der folgenden Arbeit aber keine wichtige Rolle spielen wird. Sie ist definiert als

$$W(q, p) := \frac{1}{\pi\hbar} \int \langle q + \xi | \rho | q - \xi \rangle e^{-2i\xi p/\hbar} d\xi. \quad (2.36)$$

Die Wigner-Funktion ist eine gemeinsame Pseudowahrscheinlichkeitsverteilung von  $q$  und  $p$ . Das heißt, dass

$$\int W(q, p) dq = \langle p | \rho | p \rangle \quad \text{und} \quad \int W(q, p) dp = \langle q | \rho | q \rangle \quad (2.37)$$

gilt, und dass  $W$  aber wie das  $\mathcal{P}$ -Symbol im Allgemeinen negative Werte annehmen kann.

Die Wigner-Funktion ist durch Faltung mit den  $\mathcal{P}$ - und  $\mathcal{Q}$ -Symbolen verbunden, es gilt:

$$W(\alpha, \alpha^*) = 2 \int \mathcal{P}(\beta, \beta^*) \cdot e^{-2|\alpha-\beta|^2} \frac{d^2\beta}{\pi}, \quad (2.38)$$

$$\mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) = 2 \int W(\beta, \beta^*) \cdot e^{-2|\alpha-\beta|^2} \frac{d^2\beta}{\pi}. \quad (2.39)$$

Daraus folgt durch die Assoziativität der Faltung auch wieder Gleichung (2.34). Das heißt, um aus dem  $\mathcal{P}$ -Symbol die Wigner-Funktion zu erhalten, muss man es mit einem Gaußkern falten, der halb so breit ist wie der, der bei der Berechnung des  $\mathcal{Q}$ -Symbols aus  $\mathcal{P}$  verwendet wird. Die Wigner-Funktion befindet sich so gesehen „in der Mitte“ zwischen  $\mathcal{Q}$  und  $\mathcal{P}$ . Mit der Wigner-Funktion können Erwartungswerte von symmetrisch geordneten Operatoren berechnet werden.

## 2.4 Beispiele

### Beispiel 1: Reiner kohärenter Zustand

Ein reiner kohärenter Zustand wird durch eine Dichtematrix

$$\rho^{(\text{pure})} := |\alpha'\rangle\langle\alpha'| = |q', p'\rangle\langle q', p'| \quad (2.40)$$

beschrieben, wobei  $|\alpha'\rangle = |q', p'\rangle$  der entsprechende (feste) kohärente Zustand ist ( $\alpha' \in \mathbb{C}$ ). Das  $\mathcal{P}$ -Symbol ist offenbar

$$\mathcal{P}^{(\text{pure})}(\alpha, \alpha^*) = \pi \cdot \delta^{(2)}(\alpha - \alpha') \quad \text{bzw.} \quad \mathcal{P}^{(\text{pure})}(q, p) = 2\pi\hbar \cdot \delta(q - q') \delta(p - p'). \quad (2.41)$$

Das  $\mathcal{Q}$ -Symbol ergibt sich entweder direkt aus Gleichung (2.18) bzw. (2.19) oder aus der Faltung (2.34) bzw. (2.35) zu

$$\mathcal{Q}^{(\text{pure})}(\alpha, \alpha^*) = e^{-|\alpha-\alpha'|^2} \quad \text{bzw.} \quad \mathcal{Q}^{(\text{pure})}(q, p) = e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} \left[ (q-q')^2 + \left(\frac{p-p'}{m\omega}\right)^2 \right]}. \quad (2.42)$$

**Beispiel 2: Klassische Mischung**

Für eine Dichtematrix, die eine klassische Mischung von Zuständen beschreibt, beispielsweise  $(\alpha', \beta' \in \mathbb{C})$

$$\rho^{(\text{mix})} := \frac{1}{2} (|\alpha'\rangle\langle\alpha'| + |\beta'\rangle\langle\beta'|) , \quad (2.43)$$

werden die  $\mathcal{P}$ - und  $\mathcal{Q}$ -Symbole einfach (mit entsprechenden Vorfaktoren) addiert.

Anders ausgedrückt: Die Zuordnungen  $\rho \mapsto \mathcal{P}$  und  $\rho \mapsto \mathcal{Q}$  sind linear.

**Beispiel 3: Reiner Anzahlzustand**

Betrachte nun die Dichtematrix

$$\rho^{(n)} := |n\rangle\langle n| . \quad (2.44)$$

Das  $\mathcal{Q}$ -Symbol kann man unter Verwendung von (2.11b) sofort ablesen:

$$\mathcal{Q}^{(n)}(\alpha, \alpha^*) = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} . \quad (2.45)$$

Da  $|\alpha = 0\rangle = |n = 0\rangle$  ist, sieht man an Beispiel 1 schon, dass das  $\mathcal{P}$ -Symbol eine Distribution sein wird. Deshalb ist es sinnvoll, Gleichung (2.31) zur Berechnung zu verwenden. Da  $\langle -\gamma | \rho | \gamma \rangle e^{|\gamma|^2} = (-1)^n \frac{|\gamma|^{2n}}{n!}$  ist, ist

$$\mathcal{P}^{(n)}(\alpha, \alpha^*) = (-1)^n \frac{e^{|\alpha|^2}}{n!} \int |\gamma|^{2n} e^{\alpha\gamma^* - \alpha^*\gamma} \frac{d^2\gamma}{\pi} ,$$

und dieses Integral kann offensichtlich nicht im üblichen Sinn verstanden werden. Wenn Distributionen zugelassen sind, kann man aber einfach die Tatsache ausnutzen, dass bei Fouriertransformation die Multiplikation mit der unabhängigen Variable zu einer Ableitung wird [28, Gl. 14.11]:

$$\mathcal{P}^{(n)}(\alpha, \alpha^*) = \frac{e^{|\alpha|^2}}{n!} \left( \frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\alpha^*} \right)^n \int e^{\alpha\gamma^* - \alpha^*\gamma} \frac{d^2\gamma}{\pi} = \frac{\pi}{n!} e^{|\alpha|^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\alpha^*} \right)^n \delta^{(2)}(\alpha) . \quad (2.46)$$

**Beispiel 4: Thermisches Gleichgewicht**

Wir betrachten nun den harmonischen Oszillator zum ersten Mal in Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur  $T$ . Mit  $\beta := \frac{1}{kT}$  bezeichnen wir die inverse Temperatur ( $k$  ist die Boltzmann-Konstante und  $T$  die Temperatur) und zudem definieren wir

$$N := \frac{1}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} \quad (2.47)$$

(siehe auch Abschnitt 3.1). Bekanntlich ist im thermischen Gleichgewicht die Dichtematrix durch

$$\rho^{(\text{eq})} := \frac{e^{-\beta H}}{\text{tr} e^{-\beta H}} . \quad (2.48)$$

gegeben [19, Gl. 2.4.14].

Man könnte das  $\mathcal{P}$ -Symbol nun wieder über Gleichung (2.31) berechnen, dies ist in [7, Kap. 3.1.2] durchgeführt. Es wäre auch möglich die Tatsache auszunutzen, dass das thermische Gleichgewicht eine klassische Mischung aus Anzahlzuständen ist. Am geschicktesten ist es aber,  $e^{-\beta H} |\alpha\rangle$  zu berechnen,

$$e^{-\beta H} |\alpha\rangle \stackrel{(2.11b)}{=} e^{-|\alpha|^2/2 - \hbar\omega\beta/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\hbar\omega\beta a^\dagger a} |n\rangle = e^{-\hbar\omega\beta/2} |\alpha \cdot e^{-\hbar\omega\beta}\rangle ,$$

und die Überevollständigkeit auszunutzen:

$$e^{-\beta H} = e^{-\hbar\omega\beta/2} \int |\alpha \cdot e^{-\hbar\omega\beta}\rangle \langle \alpha| \frac{d^2\alpha}{\pi} = e^{\hbar\omega\beta/2} \int e^{-|\beta|^2/N} |\beta\rangle \langle \beta| \frac{d^2\beta}{\pi}.$$

Die zweite Gleichheit ergibt sich durch eine geschickte Substitution,  $\beta := \alpha \cdot e^{-\hbar\omega\beta}$  und  $\beta^* := \alpha^*$  (das ist möglich, da wir  $\alpha$  und  $\alpha^*$  als unabhängige Variablen betrachten). Da

$$\text{tr}(e^{-\beta H}) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\hbar\omega\beta(n+1/2)} = N e^{\hbar\omega\beta/2}$$

nur eine Zahl ist, kann man so das  $\mathcal{P}$ -Symbol direkt ablesen:

$$\mathcal{P}^{(\text{eq})}(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{N} e^{-|\alpha|^2/N} \quad \text{bzw.} \quad \mathcal{P}^{(\text{eq})}(q, p) = \frac{1}{N} e^{-\frac{m\omega}{2N\hbar} \left[ q^2 + \left( \frac{p}{m\omega} \right)^2 \right]}. \quad (2.49)$$

Bei der Faltung von zwei Gaußfunktionen addieren sich gerade die quadrierten Breiten, deshalb ist

$$\mathcal{Q}^{(\text{eq})}(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{N+1} e^{-|\alpha|^2/(N+1)} \quad \text{bzw.} \quad \mathcal{Q}^{(\text{eq})}(q, p) = \frac{1}{N+1} e^{-\frac{m\omega}{2(N+1)\hbar} \left[ q^2 + \left( \frac{p}{m\omega} \right)^2 \right]}. \quad (2.50)$$

### Beispiel 5: Superposition von kohärenten Zuständen

Betrachten wir schließlich die Superposition  $|\psi\rangle := \frac{1}{\sqrt{\nu}} (|\alpha'\rangle + |\beta'\rangle)$ , wobei  $\alpha', \beta' \in \mathbb{C}$  sind und  $\nu = \nu(\alpha', \beta')$  eine Normierung, so gewählt dass  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ . Die Dichtematrix, die einen solchen reinen Zustand beschreibt ist

$$\rho^{(\text{sup})} := \frac{\overbrace{|\alpha'\rangle\langle\alpha'| + |\beta'\rangle\langle\beta'|}^{\rho^{(1)}} + \overbrace{|\alpha'\rangle\langle\beta'| + |\beta'\rangle\langle\alpha'|}^{\rho^{(2)}}}{\nu(\alpha', \beta')}. \quad (2.51)$$

Den  $\rho^{(1)}$ -Teil kennen wir bereits aus Beispiel 2, und aufgrund der Linearität können wir den  $\rho^{(2)}$ -Teil separat berechnen.

Das  $\mathcal{Q}$ -Symbol zu berechnen ist trivial:

$$\mathcal{Q}^{(2)}(\alpha, \alpha^*) = e^{-|\alpha|^2 - \frac{1}{2}(|\alpha'|^2 + |\beta'|^2)} \left( e^{\alpha^* \alpha' + (\beta')^* \alpha} + e^{\alpha^* \beta' + (\alpha')^* \alpha} \right). \quad (2.52)$$

Für das  $\mathcal{P}$ -Symbol wird wieder Gleichung (2.31) verwendet. Sei  $\gamma' = \frac{\alpha' + \beta'}{2}$ . Durch Einsetzen aller Größen erhält man

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(2)}(\alpha, \alpha^*) = & 2 e^{|\alpha|^2 - \frac{1}{2}(|\alpha'|^2 + |\beta'|^2)} \\ & \cdot \int \cosh(\gamma_1(\alpha'_1 - \beta'_1) + \gamma_2(\alpha'_2 - \beta'_2)) \cdot e^{2i\gamma_1(\alpha_2 - \gamma'_2) - 2i\gamma_2(\alpha_1 - \gamma'_1)} \frac{d^2\gamma}{\pi}. \end{aligned}$$

Hier kann der gleiche Trick angewandt werden wie in Beispiel 3 – nur dass hier eine Reihe von Potenzen von  $\gamma$  fouriertransformiert wird. Formal ist das Ergebnis einfach

$$\mathcal{P}^{(2)}(\alpha, \alpha^*) = 2\pi e^{|\alpha|^2 - \frac{1}{2}(|\alpha'|^2 + |\beta'|^2)} \cdot \cos\left(\frac{\alpha'_2 - \beta'_2}{2} \partial_{\alpha_1} - \frac{\alpha'_1 - \beta'_1}{2} \partial_{\alpha_2}\right) \delta^{(2)}(\alpha - \gamma'), \quad (2.53)$$

wobei der Ausdruck  $\cos(\dots)$  durch die Reihendarstellung des Cosinus verstanden werden muss.

# Kapitel 3

## Dissipative Dynamik

In diesem Abschnitt soll beschrieben werden, wie sich die (nun zeitabhängige) Dichtematrix  $\rho_t$  entwickelt, wenn das System in Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur  $T$  steht. Die Dichtematrix  $\rho_t$  beschreibt weiterhin nur den harmonischen Oszillator, enthält also nicht das Wärmebad. Wir benötigen keine detaillierte Beschreibung des Bads, sondern werden eine effektive Dynamik des Systems postulieren, in die als Eigenschaft des Wärmebads nur die Temperatur eingeht.

### 3.1 Fokker-Planck-Gleichung für $\mathcal{P}$

#### 3.1.1 Allgemeine Lindblad-Gleichung

Die Wechselwirkung zwischen dem System und dem Bad ist im Allgemeinen zu komplex, um eine Mastergleichung für die Zeitevolution der Dichtematrix aus Grundprinzipien herzuleiten. Mit einer Reihe von stark idealisierten Annahmen, die zu dem Begriff der quantendynamischen Halbgruppe („quantum dynamical semigroup“) zusammengefasst werden, ist es aber möglich, eine Aussage über die generelle Form der Evolutionsgleichung zu treffen. Die folgende kurze Zusammenfassung des Themas orientiert sich an [30], dort sind auch weitere Details zu finden.

Um den Begriff der quantendynamischen Halbgruppe spezifizieren zu können, betrachten wir die Menge  $\{U_t \mid t \geq 0\}$  der Propagatoren, die die Zeitentwicklung des Systems beschreiben, das heißt für eine gegebene Dichtematrix  $\rho_0$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  ist  $\rho_t = U_t \rho_0$ . Diese Menge heißt quantendynamische Halbgruppe, wenn folgende Bedingungen gelten:

- Die Zeitentwicklung besitzt kein Gedächtnis, ist also Markovsch. Mathematisch wird das durch die Halbgruppeneigenschaft  $U_t U_s = U_{t+s}$  ausgedrückt.
- Sie ist stetig und erhält die Spur.
- Sie ist vollständig positiv. Vollständige Positivität ist eine stärkere Voraussetzung als nur die Positivität ( $U_t \rho \geq 0$  wenn  $\rho \geq 0$ ). Warum diese stärkere Voraussetzung benötigt wird, und wie sie im Detail lautet, ist im Anhang B.3 beschrieben, siehe auch [30, Kap. 2.1].

Unter diesen Voraussetzungen kann die Evolutionsgleichung nur die Form

$$\partial_t \rho_t = -i[H, \rho_t] + \sum_j V_j \rho_t V_j^\dagger - \frac{1}{2} \left( V_j^\dagger V_j \rho_t + \rho_t V_j^\dagger V_j \right) \quad (3.1)$$

besitzen. Dies wurde von Gorini, Kossakowski und Sudarshan für endlich dimensionale Hilberträume bewiesen [31] und von Lindblad auch im Fall eines unendlich dimensional separablen Hilbertraums, unter der Zusatzvoraussetzung, dass die Operatoren  $H$  und  $V_j$  beschränkt sind [32]. Deshalb heißt diese Gleichung Lindblad-Gleichung und die Operatoren  $V_j$  heißen Lindblad-Operatoren. Die rechte Seite der Gleichung nennt man auch Lindblad-Generator  $\mathcal{L}\rho$ .

#### 3.1.2 Lindblad-Gleichung für den harmonischen Oszillator

Im hier betrachteten Fall eines harmonischen Oszillators sind diese Voraussetzungen nicht gegeben – der Hilbertraum ist nicht endlich dimensional und  $H$  ist nicht beschränkt. Betrachtet man aber

eine explizite Beschreibung mit einem Wärmebad, das wiederum aus harmonischen Oszillatoren besteht (nach [7, Kap. 9] ist dies eine gute Beschreibung beispielsweise für die eingangs erwähnte Lichtmode in einem Laser), kann man die resultierenden Gleichungen durch starke Näherungen<sup>1</sup> aber in diese Form bringen. Die Rechnung ist beispielsweise in [33, Kap. 6] zu finden, das Ergebnis lautet:

$$\partial_t \rho_t = -i\omega [a^\dagger a, \rho_t] + \frac{\gamma N}{2} (2a^\dagger \rho_t a - a a^\dagger \rho_t - \rho_t a a^\dagger) + \frac{\gamma(N+1)}{2} (2a \rho_t a^\dagger - a^\dagger a \rho_t - \rho_t a^\dagger a) . \quad (3.2)$$

Hier ist  $\gamma$  ein Maß für die Stärke der Kopplung des Systems an das Wärmebad und hat dieselben Einheiten wie  $\omega$ .  $N$  ist ein Maß für die Temperatur, es ist wie oben (Gleichung (2.47)) definiert als

$$N := \frac{1}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} .$$

Wenn man für das Wärmebad ein Strahlungsfeld wählt, hat dieses  $N$  eine anschauliche Bedeutung:  $N(\Omega) = 1/(e^{\hbar\Omega\beta} - 1)$  ist die mittlere Anzahl Photonen in der Mode  $\Omega$ . In die Zeitevolution des Systems geht aber nur  $N := N(\omega)$  ein, wobei  $\omega$  die Oszillatorfrequenz des Systems ist.

Trotz allen Näherungen ist es oft gerechtfertigt, diese Gleichung zu verwenden, da sie sich in der Praxis bewährt hat [7, 11, 19, 29].

### 3.1.3 Evolution des $\mathcal{P}$ -Symbols

Die Lindblad-Gleichung (3.2) kann in eine Differentialgleichung für das  $\mathcal{P}$ -Symbol umgeschrieben werden, indem Gleichung (2.28) eingesetzt wird [7, Kap. 8.4]. Es müssen dann Terme berechnet werden, bei denen  $a$  und  $a^\dagger$  in verschiedenen Reihenfolgen von links oder rechts auf  $|\alpha\rangle\langle\alpha|$  wirken. Offenbar ist

$$a |\alpha\rangle\langle\alpha| = \alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad \text{und} \quad |\alpha\rangle\langle\alpha| a^\dagger = \alpha^* |\alpha\rangle\langle\alpha| .$$

Mit der Entwicklung von  $|\alpha\rangle$  in den Anzahlzuständen (Gleichung (2.11b)) kann man außerdem

$$a^\dagger |\alpha\rangle\langle\alpha| = (\alpha^* + \partial_\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad \text{und} \quad |\alpha\rangle\langle\alpha| a = (\alpha + \partial_{\alpha^*}) |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

sehen. Aus einer Kombination dieser Identitäten können wir alle Terme der Lindblad-Gleichung berechnen. Dafür müssen die Terme zuerst mit der Kommutatorrelation  $[a, a^\dagger] = 1$  so umsortiert werden, dass von links zuerst  $a$  und von rechts zuerst  $a^\dagger$  wirkt. Beispielsweise ist

$$a a^\dagger |\alpha\rangle\langle\alpha| = a^\dagger a |\alpha\rangle\langle\alpha| + |\alpha\rangle\langle\alpha| = \alpha (\alpha^* + \partial_\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| + |\alpha\rangle\langle\alpha| .$$

Es muss dann noch partiell integriert werden (was nach Definition der Ableitung der Distribution  $\mathcal{P}$  ohne ein Auftreten von Randtermen möglich ist). Dabei ändern die Ableitungen ihr Vorzeichen. Aus dem in unserem Beispiel auftauchenden Term

$$\mathcal{P}_t(\alpha, \alpha^*) [\alpha (\alpha^* + \partial_\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| + |\alpha\rangle\langle\alpha|]$$

entsteht durch die partielle Integration der Term

$$[(\alpha^* - \partial_\alpha) \alpha + 1] \mathcal{P}_t(\alpha, \alpha^*) \cdot |\alpha\rangle\langle\alpha| .$$

Die anderen Terme können analog gerechnet werden. Fassen wir sämtliche Terme wieder zusammen, erhalten wir die Differentialgleichung

$$\partial_t \mathcal{P}_t(\alpha, \alpha^*) = \left[ \frac{\gamma}{2} (\partial_{\alpha^*} \alpha^* + \partial_\alpha \alpha) - i\omega (\partial_{\alpha^*} \alpha^* - \partial_\alpha \alpha) + \gamma N \partial_\alpha \partial_{\alpha^*} \right] \mathcal{P}_t . \quad (3.3)$$

<sup>1</sup>Unter anderem: Rotating Wave Approximation, schwache Kopplung ans Bad und verschiedene Annahmen über die Spektraldichte des Bads

(siehe [29, Gl. 3.335]).

Die Differentialgleichung kann auch in den Variablen  $q$  und  $p$  geschrieben werden. Aus Gleichung (2.7) übernehmen wir die Definition  $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}p$  für  $q$  und  $p$ . Diese Koordinatentransformation hat folgende Auswirkungen auf die Ableitungen:

$$\partial_\alpha = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \partial_q - i\sqrt{2m\omega\hbar} \partial_p \right) \quad \text{bzw.} \quad \partial_{\alpha^*} = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \partial_q + i\sqrt{2m\omega\hbar} \partial_p \right).$$

Daraus kann man direkt  $\partial_\alpha \partial_{\alpha^*} = \frac{\hbar}{2m\omega} (\partial_q^2 + m^2 \omega^2 \partial_p^2)$  berechnen und

$$\partial_\alpha \alpha + \partial_{\alpha^*} \alpha^* = \partial_q q + \partial_p p \quad \text{bzw.} \quad \partial_\alpha \alpha - \partial_{\alpha^*} \alpha^* = i \left( \frac{1}{m\omega} \partial_q p - m\omega \partial_p q \right).$$

Eingesetzt in (3.3) haben wir damit die Gleichung

$$\partial_t \mathcal{P}_t(q, p) = \left[ \frac{\gamma}{2} (\partial_q q + \partial_p p) + \omega \left( m\omega \partial_p q - \frac{1}{m\omega} \partial_q p \right) + \frac{\gamma N \hbar}{2m\omega} (\partial_q^2 + m^2 \omega^2 \partial_p^2) \right] \mathcal{P}_t(q, p) \quad (3.4)$$

hergeleitet. Diese Differentialgleichung hat mathematisch die Form einer Fokker-Planck-Gleichung (siehe z.B. [8]); solche Gleichungen werden unter anderem verwendet, um Diffusion zu beschreiben. Die hier gefundene Gleichung beschreibt aber sowohl für die  $q$ - als auch für die  $p$ -Koordinate ein diffusives Verhalten, dies ist bei klassischen mechanischen Systemen, in denen  $p$  den Impuls beschreibt, nicht üblich. Dies werden wir in Kapitel 5 noch deutlicher an den Langevin-Gleichungen sehen.

## 3.2 Lösung der Fokker-Planck-Gleichung

### Ansatz: Zeitlich veränderliche Gaußfunktion

Um Gleichung (3.3) zu lösen, zeigen wir in einem ersten Schritt, dass eine Gaußglocke, deren Zentrum und Varianz mit der Zeit variieren, eine mögliche Lösung der Gleichung ist. Wir betrachten also den Ansatz

$$\mathcal{P}_t(\alpha, \alpha^*) = \mathcal{N}_t \exp \left[ -\frac{|\alpha - \beta_t|^2}{\Delta\alpha_t} \right], \quad (3.5)$$

wobei der Vorfaktor  $\mathcal{N}_t$  die Normierung von  $\mathcal{P}_t$  sicherstellen muss, deshalb ist

$$\mathcal{N}_t := \frac{1}{\Delta\alpha_t}. \quad (3.6)$$

Der Ansatz (3.5) muss nun in die Differentialgleichung (3.3) eingesetzt werden. Die auftretenden Terme werden nach Potenzen von  $\alpha$  und  $\alpha^*$  sortiert, der Koeffizientenvergleich gibt Differentialgleichungen für die Funktionen  $\beta_t$  und  $\Delta\alpha_t$ .

- Für die Koeffizienten bei  $|\alpha|^2 \mathcal{P}_t(\alpha, \alpha^*)$  muss folgende Gleichung gelten:

$$\frac{\partial_t \Delta\alpha_t}{\Delta\alpha_t^2} = -\frac{\gamma}{\Delta\alpha_t} + \frac{\gamma N}{\Delta\alpha_t^2}.$$

Für eine Anfangsbedingung  $\Delta\alpha_0 =: b$  wird sie gelöst von

$$\Delta\alpha_t = N + (b - N) e^{-\gamma t}. \quad (3.7)$$

- Die Koeffizienten vor den Termen  $\alpha \mathcal{P}_t(\alpha, \alpha^*)$  und  $\alpha^* \mathcal{P}_t(\alpha, \alpha^*)$  führen, wenn man die nun bekannte Lösung (3.7) einsetzt, beide auf die Gleichung

$$\partial_t \beta_t = -\frac{\gamma}{2} \beta_t - i\omega \beta_t .$$

Unter der Annahme  $\beta_0 =: \alpha'$  lautet die Lösung

$$\beta(t) = \alpha' \cdot e^{-i\omega t - \gamma t/2} . \quad (3.8)$$

- Die Koeffizienten vor dem Term  $\mathcal{P}_t(\alpha, \alpha^*)$  geben eine weitere Gleichung,

$$-\frac{\partial_t \Delta \alpha_t}{\Delta \alpha_t} - \frac{(\partial_t \beta_t) \beta_t^* + (\partial_t \beta_t^*) \beta_t}{\Delta \alpha_t} + \frac{\partial_t \Delta \alpha_t}{\Delta \alpha_t^2} |\beta|^2 = \gamma - \frac{\gamma N}{\Delta \alpha_t} + \frac{\gamma N |\beta|^2}{\Delta \alpha_t^2} .$$

Diese Gleichung wird auch von den Lösungen (3.7) und (3.8) erfüllt.

Wir wissen also nun, dass der Ansatz (3.5) zusammen mit den Definitionen (3.7) und (3.8) die gegebene Gleichung (3.3) erfüllt.

### Folgerung: Greensche Funktion

Es ist sinnvoll, die Fokker-Planck-Gleichung für die Anfangsbedingung  $\mathcal{P}_0^{(\text{green})}(\alpha, \alpha^*; \alpha', (\alpha')^*) = \pi \cdot \delta^{(2)}(\alpha - \alpha')$  eines reinen kohärenten Zustands aus Beispiel 1 (Abschnitt 2.4) zu lösen. Diese Lösung stellt einen Propagator bzw. eine Greensche Funktion für die Gleichung dar, denn mit der Kenntnis der Zeitevolution  $\mathcal{P}_t^{(\text{green})}(\alpha, \alpha^*; \alpha', (\alpha')^*)$  könnte man für eine beliebige Anfangsbedingung  $\mathcal{P}_0(\alpha, \alpha^*)$  die zeitabhängige Lösung berechnen:

$$\mathcal{P}_t(\alpha, \alpha^*) = \int \mathcal{P}_0(\alpha', (\alpha')^*) \cdot \mathcal{P}_t^{(\text{green})}(\alpha, \alpha^*; \alpha', (\alpha')^*) \frac{d^2 \alpha'}{\pi} . \quad (3.9)$$

Um diese Greensche Funktion zu erhalten, genügt es, die Anfangsbreite  $b$  in der eben berechneten Lösung gegen 0 gehen zu lassen. Denn die Gaußglocke in Gleichung (3.5) konvergiert für  $\Delta \alpha \rightarrow 0$  im distributiven Sinn gegen die Delta-Distribution. Bei dem Grenzübergang verändert sich nur die Breite der Gaußglocke aus Gleichung (3.7), sie wird zu:

$$\Delta \alpha_t = N (1 - e^{-\gamma t}) . \quad (3.10)$$

Für die Greensche Funktion haben wir insgesamt

$$\boxed{\mathcal{P}_t^{(\text{green})}(\alpha, \alpha^*; \alpha', (\alpha')^*) = \mathcal{N}_t \exp \left[ -\frac{|\alpha - \alpha' \cdot e^{-i\omega t - \gamma t/2}|^2}{\Delta \alpha_t} \right]} . \quad (3.11)$$

### In Variablen $q$ und $p$

Für die bessere Anschauung soll die Greensche Funktion noch in den Variablen  $q$  und  $p$  angegeben werden. Wie auch in Abschnitt 2.4 gelte für die Anfangsbedingung:  $\alpha' = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q' + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} p'$ . Mit den Definitionen

$$\Delta q_t := \frac{2N\hbar}{m\omega} (1 - e^{-\gamma t}) , \quad (3.12)$$

$$\Delta p_t := 2N\hbar m\omega (1 - e^{-\gamma t}) , \quad (3.13)$$

$$\mathcal{N}_t := \frac{2\hbar}{\sqrt{\Delta q_t \Delta p_t}} , \quad (3.14)$$

$$Q_t := e^{-\gamma t/2} \left( q' \cos(\omega t) + \frac{p'}{m\omega} \sin(\omega t) \right) \quad \text{und} \quad (3.15)$$

$$P_t := e^{-\gamma t/2} (p' \cos(\omega t) - m\omega q' \sin(\omega t)) \quad (3.16)$$

lautet das umgeschriebene Ergebnis

$$\mathcal{P}_t^{(\text{green})}(q, p; q', p') = \mathcal{N}_t \exp \left[ -\frac{(q - Q_t)^2}{\Delta q_t} - \frac{(p - P_t)^2}{\Delta p_t} \right]. \quad (3.17)$$

In Abbildung 3.1 ist die Greensche Funktion grafisch dargestellt. Die Zeitevolution enthält drei Komponenten: Die erste ist eine Drehbewegung in der komplexen Ebene gegen den Uhrzeigersinn; Gleichungen (3.15) und (3.16) zeigen, dass es sich genau um die in Abbildung 2.1 dargestellte ungedämpfte Bewegung handelt (das war auch zu erwarten, da die Fokker-Planck-Gleichung für  $\gamma \rightarrow 0$  genau in die klassische Liouville-Gleichung des harmonischen Oszillators [34, Anhang III, Gl. 26] übergeht). Durch die Kopplung an das Wärmebad wird eine Skalierung mit  $e^{-\gamma t/2}$  hinzugefügt. Das heißt, bei  $N = 0$  (das heißt  $T = 0$  oder  $\hbar = 0$ ) würde ein anfänglicher kohärenter Zustand weiterhin immer ein reiner kohärenter Zustand bleiben, dessen Ort im Phasenraum sich spiralförmig zum Ursprung bewegt. Sind schließlich Temperatur und  $\hbar$  beide endlich, gibt es eine sich verbreiternde Gaußglocke nach Gleichung (3.10), deren Breite gegen  $N$  geht. Für große Zeiten wird also das thermische Gleichgewicht (siehe Beispiel 2, Abschnitt 2.4) erreicht.

### 3.3 Verbindung von $\mathcal{P}$ und $\mathcal{Q}$

Zu dieser Greenschen  $\mathcal{P}$ -Funktion kann, durch eine Faltung mit einer Gaußfunktion der Breite 1, noch das  $\mathcal{Q}$ -Symbol berechnet werden. Das Ergebnis ist natürlich wieder eine Gaußfunktion, deren Breite um 1 erhöht ist. Mit der Definition

$$\widetilde{\Delta\alpha_t} := N(1 - e^{-\gamma t}) + 1 \quad (3.18)$$

kann man folglich schreiben:

$$\mathcal{Q}_t^{(\text{green})}(\alpha, \alpha^*; \alpha', (\alpha')^*) = \frac{1}{\widetilde{\Delta\alpha_t}} \exp \left[ -\frac{|\alpha - \alpha' \cdot e^{-i\omega t - \gamma t/2}|^2}{\widetilde{\Delta\alpha_t}} \right]. \quad (3.19)$$

Aufgrund der Assoziativität der Faltung gilt offenbar analog zu Gleichung (3.9):

$$\mathcal{Q}_t(\alpha, \alpha^*) = \int \mathcal{P}_0(\alpha', (\alpha')^*) \cdot \mathcal{Q}_t^{(\text{green})}(\alpha, \alpha^*; \alpha', (\alpha')^*) \frac{d^2\alpha'}{\pi}. \quad (3.20)$$

Es gibt nun einen interessanten Zusammenhang zwischen  $\mathcal{Q}$  und  $\mathcal{P}$ , der es uns ermöglichen wird, die Evolutionsgleichung für  $\mathcal{Q}$  ohne weiteren Aufwand zu erhalten. Um diesen Zusammenhang zu sehen, bemerken wir, dass sowohl ein Übergang vom  $\mathcal{P}$ -Symbol zu dem  $\mathcal{Q}$ -Symbol als auch eine Evolution des  $\mathcal{P}$ -Symbols zu späteren Zeiten durch eine Faltung mit einer Gaußfunktion erreicht wird (Gleichungen (2.34) bzw. (3.9)). Deshalb gibt es eine Zeit  $\tau_D$ , für die folgendes gilt: Unterwirft man  $\mathcal{P}_t$  für die Zeit  $\tau_D$  der Zeitevolution aus der Bewegungsgleichung (3.3), erhält man ein Ergebnis, das aussieht wie das (gedrehte und gestauchte)  $\mathcal{Q}_t$ -Symbol zum Ausgangszeitpunkt. Zu diesem Zeitpunkt kann das  $\mathcal{P}$ -Symbol folglich nicht mehr negativ sein – die Quantenkorrelationen, die zu einem negativen  $\mathcal{P}$ -Symbol geführt haben<sup>2</sup>, sind abgeklungen. Deshalb wird diese Zeit  $\tau_D$  im Folgenden als Dekohärenzzeit bezeichnet.

Für diese Dekohärenzzeit können wir die explizite Formel

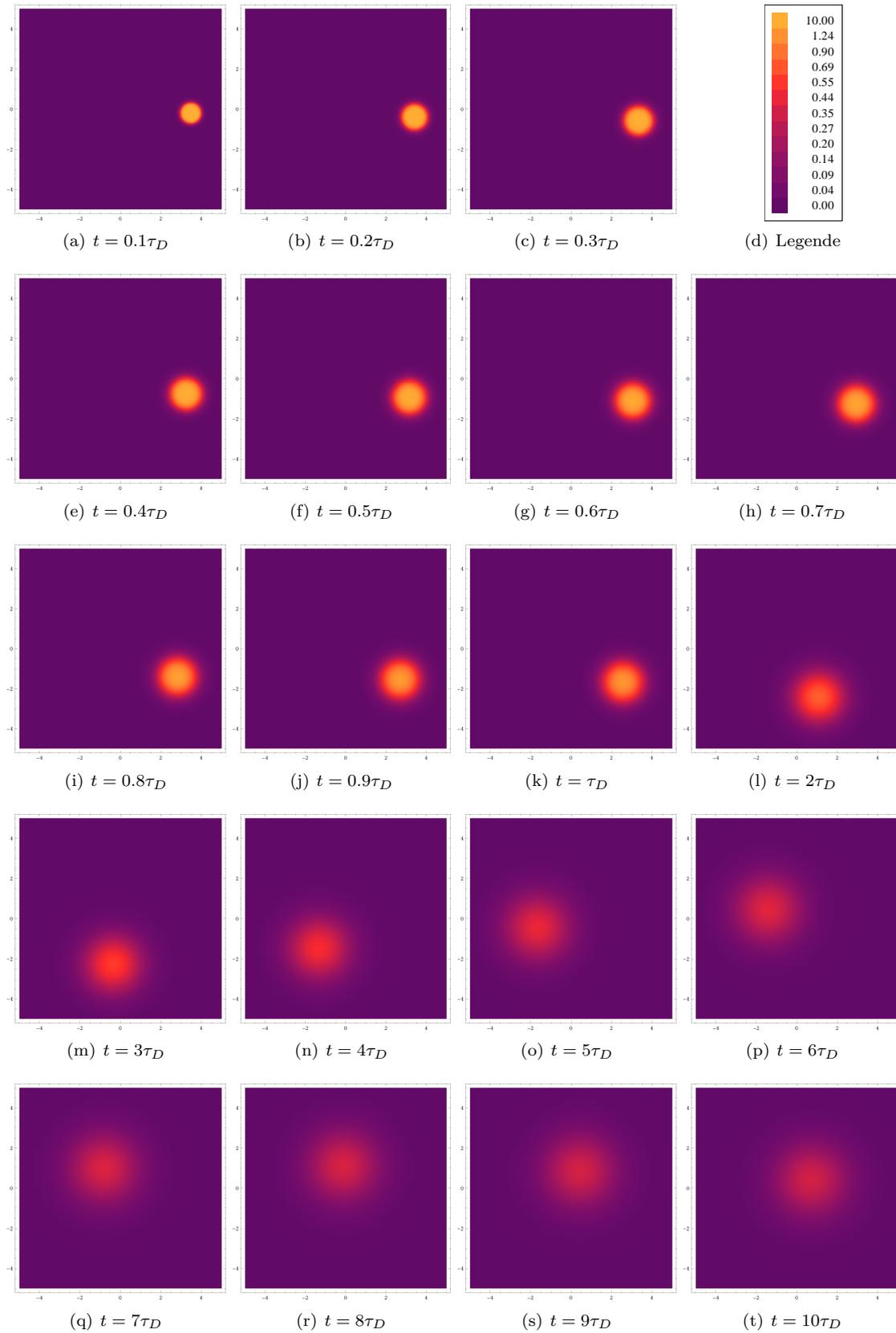
$$\tau_D := \frac{1}{\gamma} \cdot \ln \frac{N+1}{N} = \frac{\hbar\omega\beta}{\gamma} \quad (3.21)$$

angeben, denn mit dieser Definition gilt

$$\mathcal{Q}_t(\alpha, \alpha^*) = e^{\gamma\tau_D} \cdot \mathcal{P}_{t+\tau_D}(\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}^*). \quad (3.22)$$

---

<sup>2</sup> Genaueres dazu werden wir noch in den Beispielen in Abschnitt 3.4 sehen.



**Abbildung 3.1:** Plot der Zeitentwicklung des  $\mathcal{P}$ -Symbols aus Beispiel 1 (Gleichung (3.11)). Die Bilder zeigen das  $\mathcal{P}$ -Symbol in der komplexen Ebene, d.h. die  $x$ -Achse ist  $\alpha_1$  und die  $y$ -Achse ist  $\alpha_2$ . Der Wert des  $\mathcal{P}$ -Symbols ist farbkodiert (siehe Legende). Die Konstanten wurden festgesetzt auf  $\omega = \hbar = m = 1$ ,  $\gamma = \frac{1}{2}$  und  $N = 3$ ,  $\tau_D$  ist die (später in Gleichung (3.21) eingeführte) Dekohärenzzeit  $\tau_D \approx 0.58$ . Als Anfangsbedingung wurde  $\alpha' = 5\sqrt{2}$  (d.h.  $q' = 5$ ,  $p' = 0$ ) verwendet.

Dabei sind  $\tilde{\alpha}$  und  $\tilde{\alpha}^*$  transformierte Koordinaten:  $\tilde{\alpha} := \alpha \cdot e^{-i\omega\tau_D - \gamma\tau_D/2}$  beziehungsweise  $\tilde{\alpha}^* := \alpha^* \cdot e^{+i\omega\tau_D - \gamma\tau_D/2}$ .

Um diese Tatsache zu beweisen, betrachten wir zunächst nur die Greenschen Funktionen  $\mathcal{P}^{(\text{green})}$  und  $\mathcal{Q}^{(\text{green})}$  (Gleichungen (3.11), (3.19)). Für diese können wir die Formel leicht durch Einsetzen zeigen. Da alle anderen Lösungen nach Gleichungen (3.9) bzw. (3.20) durch eine Faltung aus den Greenschen Funktionen hervorgehen, überträgt sich die Formel in den allgemeinen Fall.

Aus dieser Formel erhält man nun leicht eine Evolutionsgleichung für  $\mathcal{Q}$  aus der schon berechneten Fokker-Planck-Gleichung (3.3), man muss nur die Koordinatentransformation zu  $\tilde{\alpha}$  durchführen. Es gilt  $(\partial_{\tilde{\alpha}^*} \tilde{\alpha}^* \pm \partial_{\tilde{\alpha}} \tilde{\alpha}) = (\partial_{\alpha^*} \alpha^* \pm \partial_{\alpha} \alpha)$ , die ersten beiden Terme verändern sich also überhaupt nicht. Außerdem gilt  $\partial_{\tilde{\alpha}} \partial_{\tilde{\alpha}^*} = e^{\gamma\tau_D} \partial_{\alpha} \partial_{\alpha^*}$ . Da  $Ne^{\gamma\tau_D}$  nach der Definition (3.21) gleich  $N + 1$  ist, ist der einzige Unterschied zwischen der  $\mathcal{P}$ - und der  $\mathcal{Q}$ -Gleichung der Faktor  $N$  im dritten Term auf der rechten Seite, der durch ein  $N + 1$  ersetzt wird:

$$\partial_t \mathcal{Q}_t(\alpha, \alpha^*) = \left[ \frac{\gamma}{2} (\partial_{\alpha^*} \alpha^* + \partial_{\alpha} \alpha) - i\omega (\partial_{\alpha^*} \alpha^* - \partial_{\alpha} \alpha) + \gamma(N + 1) \partial_{\alpha} \partial_{\alpha^*} \right] \mathcal{Q}_t(\alpha, \alpha^*) \quad \text{bzw.} \quad (3.23)$$

$$\partial_t \mathcal{Q}_t(q, p) = \left[ \frac{\gamma}{2} (\partial_q q + \partial_p p) + \omega \left( m\omega \partial_p q - \frac{1}{m\omega} \partial_q p \right) + \frac{\gamma(N + 1)\hbar}{2m\omega} (\partial_q^2 + m^2 \omega^2 \partial_p^2) \right] \mathcal{Q}_t(q, p). \quad (3.24)$$

Diese Gleichungen hätte man natürlich auch direkt erhalten können, indem man die Erwartungswerte der Lindblad-Gleichung (3.2) in den kohärenten Zuständen nimmt.

### 3.4 Zeitentwicklung der Beispiele aus Abschnitt 2.4

Wir betrachten erneut die Beispiele aus Abschnitt 2.4 und deren Zeitentwicklung nach Gleichung (3.2). Aufgrund von Gleichung (3.22) genügt es, das  $\mathcal{P}$ -Symbol zu untersuchen.

#### Beispiel 3: Reiner Anzahlzustand

Aus der Anfangsbedingung (2.46) kann nun mit Gleichung (3.9) sofort die zeitabhängige Lösung berechnet werden. Nach Definition der Ableitung der  $\delta$ -Distribution ist sie gegeben durch

$$\mathcal{P}_t^{(n)}(\alpha, \alpha^*) = \mathcal{N}(t) \cdot \left( \frac{\partial^2}{\partial \beta \partial \beta^*} \right)^n \exp \left[ - \frac{|\alpha - \beta e^{-i\omega t - \gamma t/2}|^2}{\Delta \alpha(t)} \right] \Big|_{\beta = \beta^* = 0}.$$

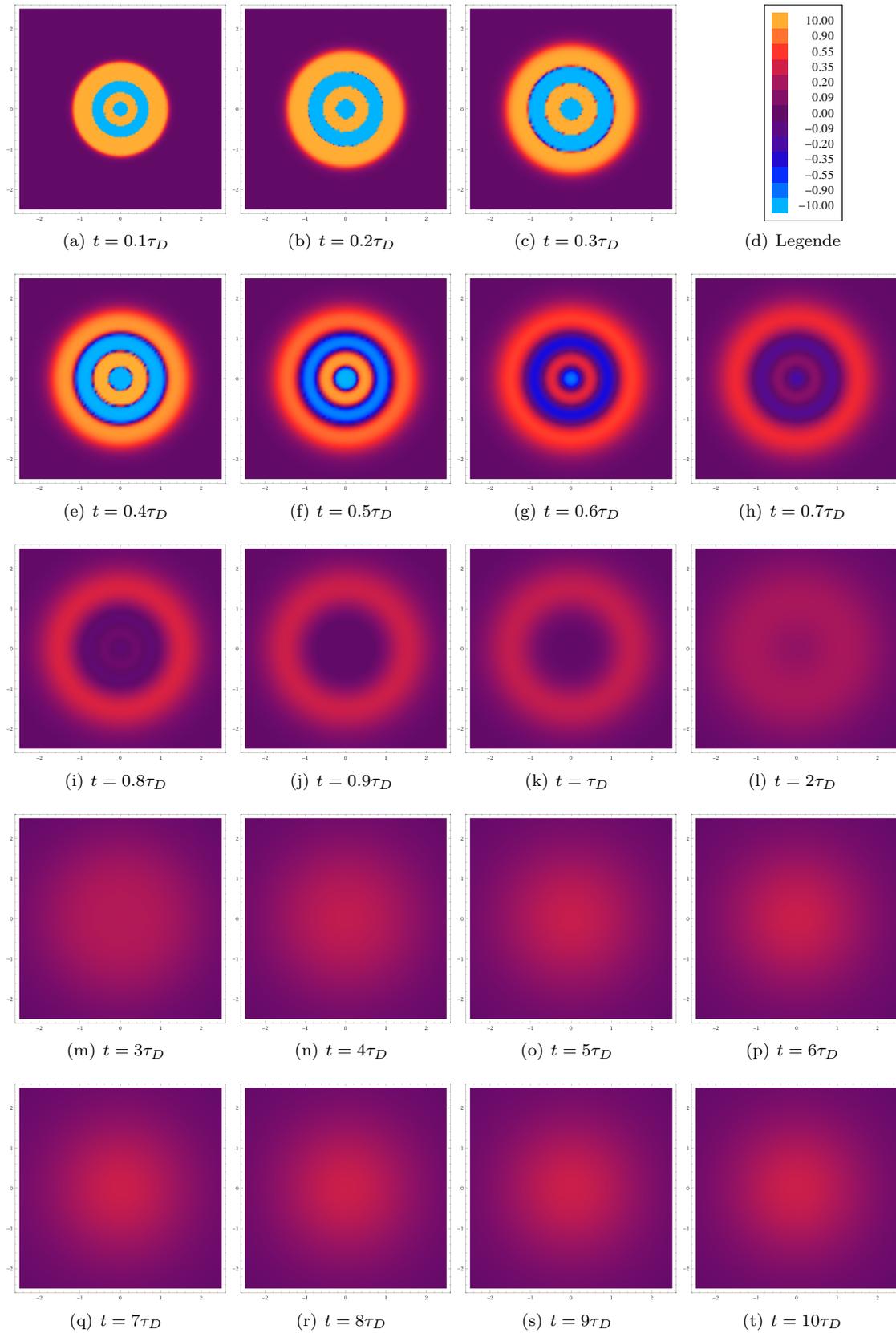
Die auftretenden Ableitungen können mit der Leibniz-Regel berechnet werden. Nach Vereinfachung lautet das Ergebnis

$$\mathcal{P}_t^{(n)}(\alpha, \alpha^*) = \mathcal{N}(t) \cdot \sum_{k=0}^n \left[ \frac{1}{(n-k)!} \binom{n}{k} \left( \frac{|\alpha|^2}{\Delta \alpha(t)^2} e^{-\gamma t} \right)^{n-k} \left( 1 - \frac{e^{-\gamma t}}{\Delta \alpha(t)} \right)^k \right] \cdot e^{-\frac{|\alpha|^2}{\Delta \alpha(t)}}. \quad (3.25)$$

An dieser Formel sieht man zunächst nur, dass die Funktion in der komplexen Ebene symmetrisch ist. Man kann sie aber nutzen, um das Ergebnis grafisch darzustellen. In Abbildung 3.2 wurde dies für den Fall  $n = 3$  getan. Dort sieht man, dass das  $\mathcal{P}$ -Symbol aus ringförmigen Strukturen (mit  $n$  Nulldurchgängen) besteht, die um den Ursprung angeordnet sind und insbesondere auch negativ werden können. Zudem sieht man, dass die negativen Bereiche bis  $t = \tau_D$  verschwunden sind.

#### Beispiel 4: Thermisches Gleichgewicht

Aus Gründen der thermodynamischen Konsistenz sollte das thermische Gleichgewicht aus Gleichung (2.49) eine stationäre Lösung der Fokker-Planck-Gleichung (3.3) sein. Durch Einsetzen sieht man sofort, dass dies auch der Fall ist.



**Abbildung 3.2:** Plot der Zeitentwicklung des  $\mathcal{P}$ -Symbols aus Beispiel 3 (Gleichung (3.25)). Die Bilder zeigen das  $\mathcal{P}$ -Symbol in der komplexen Ebene, d.h. die  $x$ -Achse ist  $\alpha_1$  und die  $y$ -Achse ist  $\alpha_2$ . Der Wert des  $\mathcal{P}$ -Symbols ist farbkodiert (siehe Legende). Die Konstanten wurden festgesetzt auf  $\omega = \hbar = m = 1$ ,  $\gamma = \frac{1}{2}$  und  $N = 3$ , d.h. die Dekohärenzzeit ist nach Gleichung (3.21)  $\tau_D \approx 0.58$ . Als Anfangsbedingung wurde der Anzahlzustand mit  $n = 3$  verwendet.

Das thermische Gleichgewicht ist außerdem die einzige stationäre Lösung der Fokker-Planck-Gleichung. Der Grund dafür ist, dass sich für große Zeiten alle Lösungen in folgendem Sinn annähern: Seien  $\mathcal{P}_t^{(1)}(\alpha, \alpha^*)$  und  $\mathcal{P}_t^{(2)}(\alpha, \alpha^*)$  Lösungen von (3.3). Dann ist

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int \mathcal{P}_t^{(1)}(\alpha, \alpha^*) \cdot \ln \left( \frac{\mathcal{P}_t^{(1)}(\alpha, \alpha^*)}{\mathcal{P}_t^{(2)}(\alpha, \alpha^*)} \right) \frac{d^2\alpha}{\pi} = 0. \quad (3.26)$$

Insbesondere geht daher jede Lösung für große Zeiten in diesem Sinn gegen das thermische Gleichgewicht (2.49), das heißt, dass andere Lösungen keine stationären Lösungen sein können.

All dies wird bewiesen in [8, Kap. 6.1]. Der dort geführte Beweis ist hier gültig, da die Koeffizienten auf der rechten Seite von (3.3) nicht von der Zeit abhängen und da  $\mathcal{P}_t$  für  $t > 0$  nicht singulär ist.

### Beispiel 5: Superposition von kohärenten Zuständen

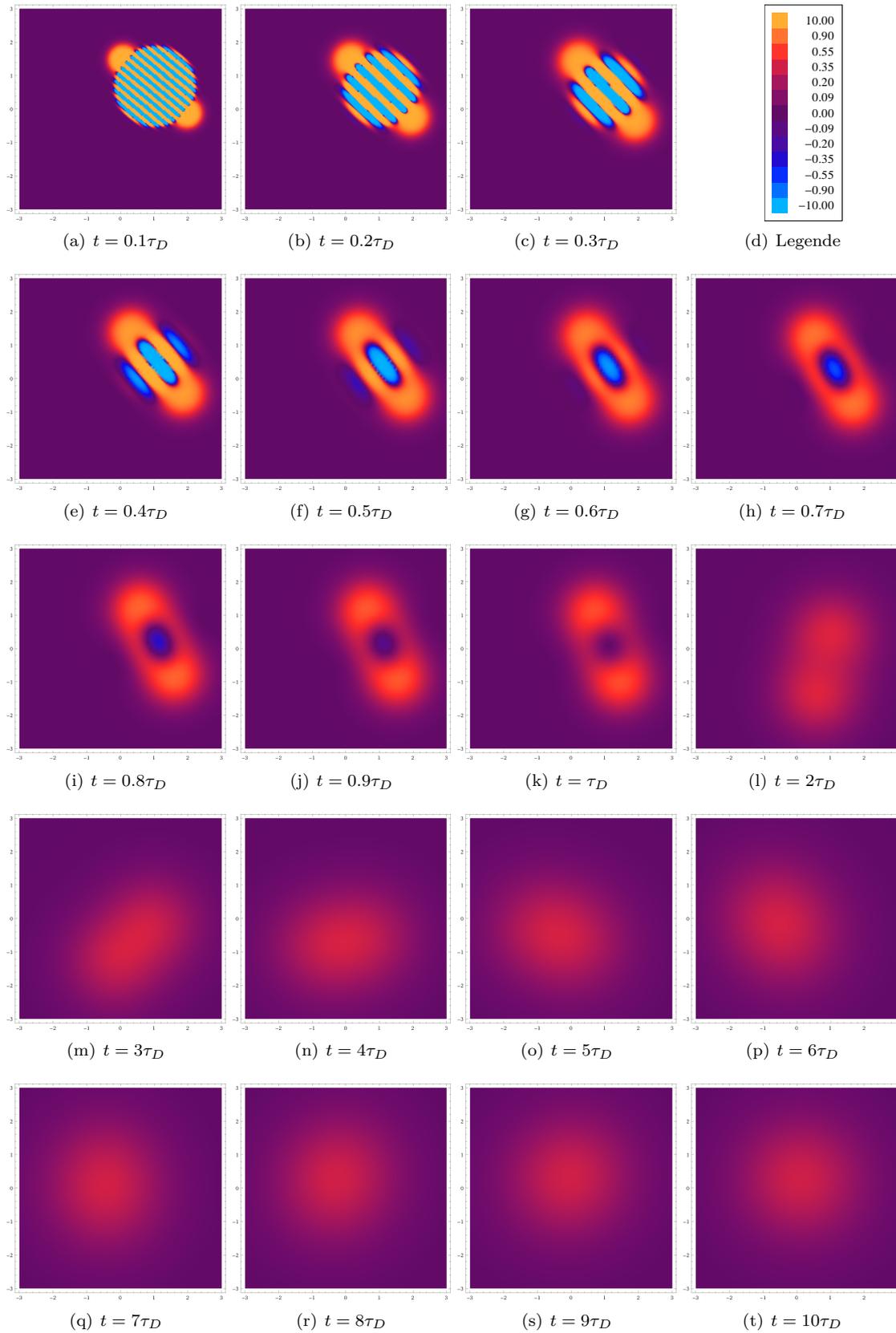
Die Berechnung der Zeitabhängigkeit des  $\mathcal{P}$ -Symbols ist etwas aufwändiger und wird im Anhang A.2 durchgeführt. Das Ergebnis lautet

$$\mathcal{P}_t^{(2)}(\alpha, \alpha^*) = \mathcal{C}_t \cdot e^{-|\kappa|^2 g_t} \cdot \cos[\kappa f_t(\alpha^*, (\gamma')^*) + \kappa^* f_t^*(\alpha, \gamma')] \cdot \mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \gamma', (\gamma')^*). \quad (3.27)$$

Dabei ist wieder  $\gamma' = \frac{\alpha' + \beta'}{2}$  der Punkt in der Mitte der beiden Gaußlocken in  $\mathcal{P}_0^{(1)}$  und  $\kappa = -i \frac{\alpha' - \beta'}{2}$  gibt die Richtung senkrecht zur Verbindungsstrecke zwischen diesen an. Die Funktionen  $\mathcal{C}_t$ ,  $f_t$ ,  $g_t$  und  $\mathcal{G}_t$  werden im Anhang in den Gleichungen (A.11), (A.13), (A.14) beziehungsweise (A.12) definiert.

$\mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \gamma', (\gamma')^*)$  beschreibt eine Gaußlocke, die immer um den Mittelpunkt zwischen den beiden Gaußlocken zentriert ist, und der Cosinus-Term ist eine Modulation, die immer senkrecht auf der Verbindungsgeraden zwischen diesen steht. Die restlichen Terme dienen nur der Normierung. Im Phasenraum wirkt sich die Superposition also als wellenförmige Struktur aus, die sich gerade zwischen den beiden Peaks der unverschränkten Zustände befindet.

In Abbildung 3.3 ist diese Zeitentwicklung geplottet. Man sieht dort genau das beschriebene Verhalten: Zwei Gaußlocken, die in das thermische Gleichgewicht relaxieren, und eine starke Modulation in deren Mitte. Wiederum wird das  $\mathcal{P}$ -Symbol hier negativ – die Negativität scheint also mit Zuständen, die weit von den quasiklassischen, reinen kohärenten Zuständen entfernt sind und quantenmechanische Superpositionen enthalten, in Zusammenhang zu stehen. Aber auch hier verschwinden die negativen Bereiche auf eine kürzeren Zeitskala (Dekohärenzzeit  $\tau_D$ ) als der Zeit, die das System für die Relaxation ins Gleichgewicht benötigt (Relaxationszeit  $\frac{1}{\gamma}$ ).



**Abbildung 3.3:** Plot der Zeitentwicklung des  $\mathcal{P}$ -Symbols aus Beispiel 5 (Gleichung (3.27)). Die Bilder zeigen das  $\mathcal{P}$ -Symbol in der komplexen Ebene, d.h. die  $x$ -Achse ist  $\alpha_1$  und die  $y$ -Achse ist  $\alpha_2$ . Der Wert des  $\mathcal{P}$ -Symbols ist farbkodiert (siehe Legende). Die Konstanten wurden festgesetzt auf  $\omega = \hbar = m = 1$ ,  $\gamma = \frac{1}{2}$  und  $N = 3$ , d.h. die Dekohärenzzeit ist nach Gleichung (3.21)  $\tau_D \approx 0.58$ . Als Anfangsbedingung wurden  $\alpha' = 2$  und  $\beta' = 1.5i$  verwendet.

# Kapitel 4

## Ensemble-Thermodynamik

### 4.1 Identifikation der Wärme

Da wir nun die Thermodynamik des Systems verstehen wollen, muss zunächst eine grundlegende Frage geklärt werden: Wie groß ist der Wärmestrom aus dem System in das Wärmebad?

Da der harmonische Oszillator mit keinen anderen Systemen als dem Wärmebad in Kontakt steht, kann er keine Arbeit verrichten. Der erste Hauptsatz der Thermodynamik lautet [34, Gl. II.D.52]

$$dE^{(\text{sys})} = dW^{(\text{sys})} - dQ^{(\text{sys})}, \quad (4.1)$$

wobei nach Konvention  $dW^{(\text{sys})}$  die am System verrichtete Arbeit und  $dQ^{(\text{sys})}$  die vom System abgegebene Wärme ist. Daraus folgt sofort, dass die abgegebene Wärme (die ja in das Wärmebad fließen muss) die negative Änderung der Energie des Systems ist.

Die Energie, die sich zum Zeitpunkt  $t$  im System befindet, ist nach Gleichung (2.24) einfach  $E_t^{(\text{sys})} = \text{tr}(H\rho_t)$ . Nach [29, Gl. 3.84] kann die Zeitableitung von  $E_t^{(\text{sys})}$  über die Formel

$$\frac{d}{dt} \text{tr}(H\rho_t) = \text{tr}((\mathcal{L}^\dagger H)\rho_t)$$

berechnet werden, wobei der adjungierte Lindblad-Generator  $\mathcal{L}^\dagger$  im Fall des gedämpften harmonischen Oszillators

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^\dagger H &= i\omega [a^\dagger a, H] + \frac{\gamma(N+1)}{2} (2a^\dagger H a - a^\dagger a H - H a^\dagger a) \\ &\quad + \frac{\gamma N}{2} (2a H a^\dagger - a a^\dagger H - H a a) \end{aligned}$$

ist [29, Gl. 3.314]. Durch Einsetzen des Hamiltonoperators aus Gleichung (2.3) und der Kommutatorrelation  $[a, a^\dagger] = 1$  vereinfacht sich der Ausdruck zu  $\mathcal{L}^\dagger H = \hbar\omega\gamma (N - a^\dagger a)$ .

Damit ist insgesamt

$$\dot{E}_t^{(\text{sys})} = \hbar\omega\gamma \text{tr}((N - a^\dagger a)\rho_t). \quad (4.2)$$

#### 4.1.1 Entropieproduktion im Wärmebad

Bekanntlich ist ein Wärmestrom in ein Wärmebad mit einer Entropieänderung verbunden, es gilt [34, Gl. III.L.2]

$$dS^{(\text{med})} = k\beta dQ^{(\text{sys})} = -k\beta dE^{(\text{sys})},$$

beziehungsweise mit Gleichung (4.2)

$$\begin{aligned} \frac{\dot{S}_t^{(\text{med})}}{k\gamma} &= -\frac{\beta}{\gamma} \dot{E}_t^{(\text{sys})} = -\hbar\omega\beta N + \hbar\omega\beta \text{tr}(a^\dagger a \rho_t) \\ &= -\hbar\omega\beta N + \hbar\omega\beta \left( E_t^{(\text{sys})} - \frac{\hbar\omega}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Die zweite Zeile folgt direkt aus der Definition  $E_t^{(\text{sys})} := \text{tr}(H\rho_t)$ . Wenn wir uns an die Formel (2.32) zur Berechnung des Erwartungswerts eines antinormal geordneten Operators erinnern, können wir den Ausdruck  $\text{tr}(a^\dagger a \rho_t)$  aber auch noch anders schreiben:

$$\text{tr}(a^\dagger a \rho_t) = \text{tr}(a a^\dagger \rho_t) - 1 = \text{tr}(a^\dagger \rho_t a) - 1 = \int |\alpha|^2 \mathcal{Q}_t(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2\alpha}{\pi} - 1,$$

demnach ist

$$\boxed{\frac{\dot{S}_t^{(\text{med})}}{k\gamma} = -\hbar\omega\beta(N+1) + \hbar\omega\beta \int |\alpha|^2 \mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2\alpha}{\pi}}. \quad (4.4)$$

Dabei nehmen wir an, dass  $a^\dagger a \rho_t$  ein Operator der Spurklasse ist, was aus physikalischen Gründen der Fall sein sollte.

## 4.2 Entropiebegriffe

### 4.2.1 Die von-Neumann-Entropie

Wir wollen nun auch für das System ein Entropiefunktional  $S_t^{(\text{sys})}$  angeben. Dieses sollte thermodynamisch konsistent sein, das heißt, dass der zweite Hauptsatz der Thermodynamik gelten sollte. Die Gesamtentropie von System und Wärmebad darf also nur zunehmen:

$$\dot{S}_t^{(\text{tot})} = \dot{S}_t^{(\text{sys})} + \dot{S}_t^{(\text{med})} \stackrel{!}{\geq} 0. \quad (4.5)$$

Die einfachst mögliche Definition ist die von-Neumann-Entropie

$$\boxed{S_t^{(\text{vN})} := -k \text{tr}(\rho_t \cdot \ln \rho_t)}, \quad (4.6)$$

wobei der Logarithmus  $\ln \rho_t$  folgendermaßen zu verstehen ist: Nach dem Spektralsatz für kompakte Operatoren kann man  $\rho_t$  schreiben als  $\rho_t = \sum_j \rho_{j,t} |\psi_{j,t}\rangle\langle\psi_{j,t}|$ , wobei die  $\rho_{j,t} > 0$  sind, da die Dichtematrix positiv definit ist. Dann ist  $\ln \rho_t = \sum_j \ln \rho_{j,t} |\psi_{j,t}\rangle\langle\psi_{j,t}|$  und

$$S_t^{(\text{vN})} = -k \sum_j \rho_{j,t} \ln \rho_{j,t} \quad (\rho_{j,t} > 0). \quad (4.7)$$

Diese Entropiedefinition hat zwar nützliche Eigenschaften, die in [29, Kap. 2.3.1] zusammengetragen sind, sie ist außerdem thermodynamisch konsistent (siehe [29, Kap. 3.2.5], [36]). Eine wesentliche Eigenschaft der von-Neumann-Entropie ist aber, dass sie für jeden reinen Zustand  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  gleich Null ist. Das sieht man sofort aus Gleichung (4.7).

Damit gehen die rein quantenmechanischen Eigenschaften des Systems überhaupt nicht in diese Definition mit ein – die von-Neumann-Entropie ist gleich der informationstheoretischen Shannon-Entropie der Wahrscheinlichkeiten  $\rho_{j,t}$ , die die Anteile verschiedener reiner Zustände in der klassischen Mischung angeben. Im Weiteren soll untersucht werden, ob es möglich ist, eine Entropiedefinition zu finden, die Quantenfluktuationen und quantenmechanische Superpositionen einbezieht. Dies scheint zunächst ein wenig erfolversprechendes Unterfangen zu sein, da es im Hilbertraum im Prinzip keine ausgezeichneten Vektoren gibt – jeder reine Zustand ist gleichwertig, so gesehen sollten sich ihre Entropien nicht unterscheiden.

Wir können aber auf den quasiklassischen Formalismus zurückgreifen, der oben entwickelt wurde. In diesem gibt es tatsächlich eine ausgezeichnete Menge von Zuständen, nämlich die kohärenten Zustände, die die Unschärferelation minimieren. Demnach ist es vorstellbar, mit diesem Formalismus beispielsweise einem reinen kohärenten Zustand eine andere Entropie zuzuordnen als einer Superposition aus zwei unterschiedlichen kohärenten Zuständen.

### 4.2.2 Die Wehrl-Entropie

Bereits in Abschnitt 2.3 wurde besprochen, dass das  $\mathcal{Q}$ -Symbol als Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum aufgefasst werden kann. Im klassischen Fall einer Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum  $\rho(q, p)$  von Teilchen, die beispielsweise eine Brownsche Bewegung ausführen, lautet die kanonische Systementropie  $-k \int \rho(q, p) \cdot \ln \rho(q, p) \frac{dqdp}{2\pi\hbar}$ .<sup>1</sup> Derartige Entropiedefinitionen von kontinuierlichen Verteilungen werden im Folgenden „differentielle Entropie“ genannt. Dies dient der Abgrenzung von der informationstheoretischen Shannon-Entropie, die für Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf diskreten Ereignismengen definiert ist. Bei einer differentiellen Entropie können grundsätzlich nur Entropiedifferenzen, nicht aber absolute Werte eine physikalische Bedeutung haben [34, Kap. I.G.III].

Diese klassische Definition motiviert die Definition der Wehrl-Entropie als differentielle Entropie der Phasenraum-Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mathcal{Q}_t$ :

$$S_t^{(W)} := -k \int \mathcal{Q}_t(q, p) \cdot \ln \mathcal{Q}_t(q, p) \frac{dqdp}{2\pi\hbar}. \quad (4.8)$$

Diese wurde erstmals 1978 von Wehrl in [12] untersucht. Heute wird diese Größe in vielen Fachgebieten verwendet, zum Beispiel in der Theorie von verallgemeinerter Verschränkung [10], zur Beschreibung von Dekohärenz [11, 37, 38] und Quantenrauschen [9], oder auch als Maß für „squeezed states“ [39] und Ionisationsgrad [40]. Mittlerweile werden auch verallgemeinerte Definitionen wie die Rényi-Wehrl-Entropien betrachtet [41], auf welche diese Arbeit aber nicht näher eingehen wird.

Als erste wichtige Eigenschaft der Wehrl-Entropie halten wir fest, dass sie immer größer ist als die von-Neumann-Entropie.

Der Beweis (nach [12, Seite 224]) ist nicht schwierig: Nach Gleichung (2.23) zur Berechnung der Spur kann auch die von-Neumann-Entropie durch ein Integral über kohärente Zustände ausgedrückt werden,  $-k \int \langle q, p | \rho \ln \rho | q, p \rangle \frac{dqdp}{2\pi\hbar}$ . Es genügt also zu zeigen, dass

$$\mathcal{Q}(q, p) \ln \mathcal{Q}(q, p) \leq \langle q, p | \rho \ln \rho | q, p \rangle \quad (4.9)$$

ist.

Wie oben erwähnt gibt es eine Orthonormalbasis  $\{|\psi_j\rangle\}$  sodass  $\rho = \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$  ist, dann ist  $\rho \ln \rho = \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \ln \rho_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$ . Um dies auszunutzen, entwickeln wir  $|q, p\rangle$  in dieser Basis:  $|q, p\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} c_j |\psi_j\rangle$ . Die Ungleichung (4.9) ist damit äquivalent zu

$$\left( \sum_{j=1}^{\infty} |c_j|^2 \rho_j \right) \cdot \ln \left( \sum_{j=1}^{\infty} |c_j|^2 \rho_j \right) \leq \sum_{j=1}^{\infty} |c_j|^2 \rho_j \ln \rho_j. \quad (4.10)$$

Da die Funktion  $x \mapsto x \ln x$  konvex ist, ist das eine Anwendung der Jensen-Ungleichung [42, Thm. 86] und damit wahr.

Aus der Definition der von-Neumann-Entropie sieht man sofort, dass diese niemals kleiner als Null werden kann. Da die Wehrl-Entropie immer größer als die von-Neumann-Entropie ist, muss dies dann auch für die Wehrl-Entropie gelten. Hier sehen wir erneut, dass nicht jede beliebige normierte Wahrscheinlichkeitsdichte ein zulässiges  $\mathcal{Q}$ -Symbol einer Dichtematrix ist (siehe auch Abschnitt 2.3.3): Die Tatsache  $S^{(W)} \geq 0$  ist eine direkte Konsequenz der in das  $\mathcal{Q}$ -Symbol eingegangenen Unschärferelation. Der Grund dafür ist, dass das  $\mathcal{Q}$ -Symbol in einem Phasenraumabschnitt größer als 1 sein müsste, um eine negative Wehrl-Entropie zu erreichen. Da  $\mathcal{Q}$  aber normiert sein soll, müsste  $\mathcal{Q}$  dort einen sehr schmalen Peak besitzen, was einer Lokalisierung im Phasenraum entspricht, die stärker ist als von der Unschärferelation erlaubt wird. Die Bedingung aus Abschnitt 2.3.3, dass  $\mathcal{Q}$

<sup>1</sup> $0 \ln 0$  ist wie üblich als Null definiert.

die Unschärferelation respektieren muss, können wir nun also durch die Formel  $S^{(W)} \geq 0$  klarer fassen.

Tatsächlich gilt sogar für alle Dichtematrizen  $\rho$  die Ungleichung

$$\boxed{S^{(W)} \geq 1}, \quad (4.11)$$

die nach [11] eine Verstärkung der Unschärferelation darstellt. Zudem ist  $S^{(W)} = 1$  genau dann, wenn die Dichtematrix einen reinen kohärenten Zustand beschreibt; genau diese Eigenschaft macht die Wehrl-Entropie interessant als Maß für Verschränkung [10].

Gleichung (4.11) ist die sogenannte Vermutung von Wehrl („Wehrl conjecture“), die von Wehrl aufgestellt [43] und 1978 von Lieb für die kohärenten Zustände des harmonischen Oszillators bewiesen wurde [44]. Der Beweis ist überraschenderweise im höchsten Grade nicht trivial und benötigt unter anderem die scharfe Konstante in der Hausdorff-Young-Ungleichung. Lieb erweiterte die Vermutung zudem auf  $SU(2)$  kohärente Zustände von Spinsystemen (siehe Abschnitt 6.2), diese erweiterte Vermutung („Lieb conjecture“) wurde 2012 von Lieb und Solovej bewiesen [45].

### 4.2.3 Vergleich anhand des thermischen Gleichgewichts

Wir wollen die von-Neumann-Entropie mit der Wehrl-Entropie des thermischen Gleichgewichts  $\rho^{(\text{eq})} = \frac{e^{-\beta H}}{\text{tr} e^{-\beta H}}$  aus Gleichung (2.48) vergleichen. Um die von-Neumann-Entropie über Gleichung (4.7) zu bestimmen, schreiben wir  $\rho^{(\text{eq})}$  als Linearkombination von Projektoren auf Anzahlzustände, offensichtlich ist

$$\rho^{(\text{eq})} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{N}{N+1}\right)^{n+1/2}}{\text{tr} e^{-\beta H}} |n\rangle\langle n| = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{N+1} \left(\frac{N}{N+1}\right)^n |n\rangle\langle n|.$$

Gleichung (4.7) liefert durch eine kurze Rechnung

$$S^{(vN)} = k \left( N \ln \left( \frac{1+N}{N} \right) + \ln(1+N) \right). \quad (4.12)$$

Zur Bestimmung der Wehrl-Entropie setzen wir das  $\mathcal{Q}$ -Symbol (2.50) in die Definition (4.8) ein und erhalten

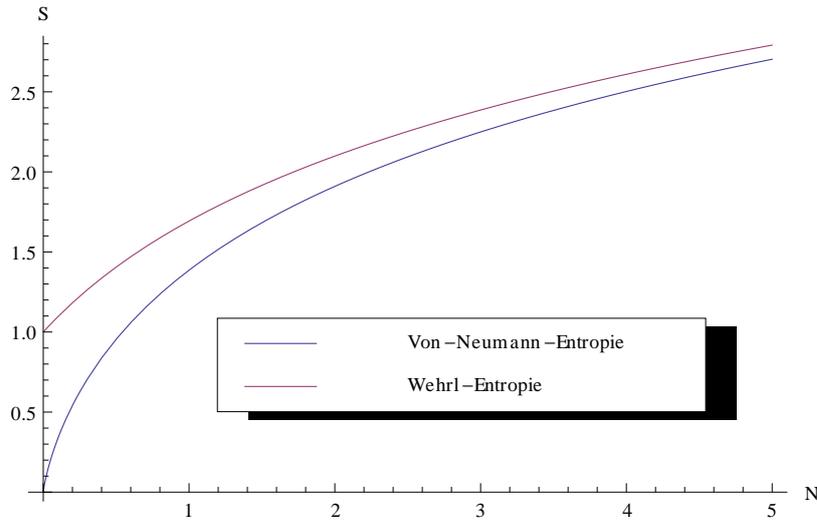
$$S^{(W)} = k (1 + \ln(1+N)). \quad (4.13)$$

Abbildung 4.1 zeigt die Abhängigkeiten der beiden Größen aus Gleichungen (4.13) und (4.12) von  $N$  bzw. von der Temperatur. Abgesehen von der Bestätigung der von oben bekannten Tatsache, dass die Wehrl-Entropie größer als die von-Neumann-Entropie ist, zeigt der Plot zwei weitere wichtige Eigenschaften. Die eine ist, dass im Grenzfall  $N \rightarrow \infty$  (d.h. bei hohen Temperaturen) die beiden Werte identisch werden. Das ist auch sinnvoll, denn für  $T \rightarrow \infty$  sollten die Auswirkungen von Quanteneffekten vernachlässigbar gering werden und nur noch die klassischen Effekte der von-Neumann-Entropie einen Einfluss besitzen. Die andere Eigenschaft ist, dass die Wehrl-Entropie für  $T \rightarrow 0$  (d.h.  $N \rightarrow 0$ ) nicht gegen Null geht (was ja schon alleine wegen der Vermutung von Lieb unmöglich wäre), das heißt, dass diese Entropiedefinition nicht das Nernst-Theorem  $\lim_{T \rightarrow 0} S = k \ln g_0$  (wobei  $g_0$  die Entartung des Grundzustands ist) [34, Gl. III.L.9] erfüllt. Das liegt daran, dass die Wehrl-Entropie wie erwähnt keine Shannon-Entropie ist, sondern eine differentielle Entropie, und somit prinzipiell nur bis auf eine additive Konstante definiert. In diesem Fall würde die Addition einer solchen Konstante aber das Verhalten im Grenzfall  $T \rightarrow \infty$  zerstören.

### 4.2.4 Der klassische Grenzfall

#### Wehrl-Entropie und von-Neumann-Entropie sind asymptotisch gleich

Den Grenzfall  $N \rightarrow \infty$  aus Abbildung 4.1 können wir auch als Grenzübergang  $\hbar \rightarrow 0$  verstehen. In der Abbildung ist zu sehen, dass die beiden Entropien des thermischen Gleichgewichts in diesem



**Abbildung 4.1:** Vergleich der von-Neumann-Entropie und der Wehrl-Entropie des thermischen Gleichgewichts bei verschiedenen Temperaturen. Die Konstante  $k$  wurde gleich 1 gesetzt. Kleine  $N$ -Werte entsprechen kleinen Temperaturen, große  $N$ -Werte entsprechen hohen Temperaturen oder dem Grenzwert  $\hbar \rightarrow 0$ .

Limes asymptotisch gleich sind. Dies ist aber nicht nur für das thermische Gleichgewicht der Fall, sondern für alle Dichtematrizen, wie in Anhang A.3 gezeigt wird.

Dass die Wehrl- und die von-Neumann-Entropie im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  gleich sind, war auch zu erwarten, da hier die Quanteneffekte verschwinden und die kohärenten Zustände orthogonal werden. Überraschend ist dagegen, dass die Entropien in diesem Grenzwert divergieren – schließlich hätten wir erwartet, dass wir im klassischen Grenzwert ein klassisches System mit einer wohldefinierten klassischen Entropie erhalten.

Das heißt, dass wir bei der Durchführung des klassischen Grenzwerts etwas falsch machen. Würden wir nur die von-Neumann-Entropie betrachten, wüssten wir aber nicht, was wir ändern sollten, um einen vernünftigen klassischen Limes zu erhalten. Ausgehend von der quasiklassischen Beschreibung des offenen Quantensystems mit kohärenten Zuständen werden wir aber sehen, wie wir den Grenzübergang modifizieren müssen: Die Größe  $\hbar$  geht auf zwei verschiedene Arten in die Wehrl-Entropie ein, einmal als Maß für die Stärke der Quanteneffekte und einmal als Normierung für das Volumen des Phasenraums. Im Folgenden wird gezeigt: Wenn wir den klassischen Grenzwert vorsichtig ausführen, und nur die Stärke der Quanteneffekte reduzieren, nicht aber die Größe der Normierungskonstante verändern, ist der Grenzwert der Wehrl-Entropie endlich und gleich der Entropie eines zugeordneten klassischen Systems.

### Definition des klassischen Systems

Unser Ausgangspunkt für die Abbildung des untersuchten offenen Quantensystems auf ein klassisches System ist dessen Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mathcal{Q}$  im (quantenmechanischen) Phasenraum. Durch den klassischen Limes werden wir ein zugeordnetes, komplett klassisches System erhalten, das durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\rho^{(cl)}(q, p)$  beschrieben wird. Es ist wichtig zu bemerken, dass die Variablen  $q$  und  $p$  dieses klassischen Systems nicht einen Ort und den konjugierten Impuls beschreiben. Insbesondere ist dieses klassische System auch kein klassischer harmonischer Oszillator.

Um den Limes ausführen zu können, müssen wir das  $\mathcal{Q}$ -Symbol neu normieren, da die Einheit

einer klassischen Wahrscheinlichkeitsdichte ein inverser Drehimpuls ist: Wir definieren also

$$\tilde{Q}(q, p) := \frac{Q(q, p)}{2\pi\hbar}, \quad (4.14)$$

sodass  $\int \tilde{Q}(q, p) dqdp = 1$  ist.<sup>2</sup> An den Beispielen in Abschnitt 2.4 sieht man, dass für diese Größe der Limes  $\hbar \rightarrow 0$  möglich ist. Da  $\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar(N+1) = \frac{1}{\omega\beta}$  ist, ist zum Beispiel für das thermische Gleichgewicht

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} Q^{(\text{eq})}(q, p) = 0 \quad \text{aber} \quad \lim_{\hbar \rightarrow 0} \tilde{Q}^{(\text{eq})}(q, p) = \frac{\omega\beta}{2\pi} e^{-\frac{m\omega^2\beta}{2} [q^2 + (\frac{p}{m\omega})^2]}, \quad (4.15)$$

das ist die klassische Boltzmann-Verteilung. Folglich definieren wir die Wahrscheinlichkeitsdichte des klassischen Systems als

$$\rho^{(\text{cl})}(q, p) := \lim_{\hbar \rightarrow 0} \tilde{Q}(q, p), \quad (4.16)$$

diese ist dann immernoch normiert:

$$\int \rho^{(\text{cl})}(q, p) dqdp = 1. \quad (4.17)$$

Auch für  $\rho^{(\text{cl})}$  gilt eine Fokker-Planck-Gleichung, die wir erhalten indem wir in der Fokker-Planck-Gleichung für  $Q$  (Gleichung (3.24)) die Größe  $(N+1)\hbar$  durch ihren Grenzwert  $\frac{1}{\omega\beta}$  ersetzen:

$$\partial_t \rho_t^{(\text{cl})}(q, p) = \left[ \frac{\gamma}{2} (\partial_q q + \partial_p p) + \omega \left( m\omega \partial_p q - \frac{1}{m\omega} \partial_q p \right) + \frac{\gamma}{2m\omega^2\beta} (\partial_q^2 + m^2\omega^2 \partial_p^2) \right] \rho_t^{(\text{cl})}(q, p). \quad (4.18)$$

### Klassische und Wehrl-Entropie

Wie bei jedem anderen klassischen System definieren wir nun die Entropie unseres zugeordneten klassischen Systems (im Weiteren als „klassische Entropie“ bezeichnet) als

$$S^{(\text{cl})} := -k \int \rho^{(\text{cl})}(q, p) \cdot \ln \left( h \rho^{(\text{cl})}(q, p) \right) dqdp. \quad (4.19)$$

Die hier auftretende Konstante  $h$ , die für solche Rechnungen immer eingeführt werden muss, dient der Normierung des Phasenraumvolumens: Wir können nur die Entropie einer dimensionslosen Funktion  $h \cdot \rho^{(\text{cl})}$  bestimmen, und zwar über die Formel  $-k \int h \rho^{(\text{cl})} \cdot \ln(h \rho^{(\text{cl})}) \frac{dqdp}{h}$  (die äquivalent zu Gleichung (4.19) ist). Üblicherweise wird diese Konstante als  $2\pi\hbar$  geschrieben. Wir wählen hier bewusst eine andere Notation, da wir  $h$  und  $\hbar$  mit verschiedenen Bedeutungen versehen: Mit der Größe  $\hbar$  beschreiben wir die Stärke der quantenmechanischen Effekte in dem System, diese lassen wir gegen Null gehen. Auch im klassischen Grenzfall müssen wir das Phasenraumvolumen aber mit einer Konstante  $h$  normieren, und diese darf nicht gegen Null gehen, da die Entropie ansonsten wie oben beschrieben divergiert. Deshalb betrachten wir an dieser Stelle  $\hbar$  und  $h$  als unabhängige Größen:  $\hbar$  beschreibt den Einfluss der Quanteneffekte und  $h$  beschreibt die Größe der diskreten Flächenstücke, aus welchen der Phasenraum aufgebaut ist.

Nach dieser Diskussion ist nun klar, dass

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} S^{(\text{W})} = S^{(\text{cl})} \quad (4.20)$$

ist, denn wir können  $S^{(\text{W})}$  als  $-k \int \tilde{Q}(q, p) \cdot \ln(h \tilde{Q}(q, p)) dqdp$  schreiben und die Größe  $h$  ist von dem Grenzwert nicht betroffen. Dieses Resultat können wir noch präzisieren: Nehmen wir an, dass sich der Grenzwert (4.16) als Entwicklung in  $\hbar$  schreiben lässt,

$$\tilde{Q}(q, p) =: \rho^{(\text{cl})}(q, p) + \hbar \rho^{(1)}(q, p) + O(\hbar^2) \quad (4.21)$$

<sup>2</sup>Es wäre auch möglich gewesen, das  $Q$ -Symbol von Anfang an mit dieser anderen Normierung zu definieren, das ist in der Literatur aber nicht üblich.

mit einer geeigneten Funktion oder Distribution  $\rho^{(1)}$ , können wir auch die Wehrl-Entropie in  $\hbar$  entwickeln:

$$\begin{aligned} S^{(W)} &= -k \int \tilde{Q}(q, p) \cdot \ln(h\tilde{Q}(q, p)) \, dqdp \\ &= -k \int \left( \rho^{(cl)}(q, p) + \hbar\rho^{(1)}(q, p) + O(\hbar^2) \right) \cdot \underbrace{\ln \left[ h\rho^{(cl)}(q, p) + \hbar \left( h\rho^{(1)}(q, p) + O(\hbar) \right) \right]}_{\ln(h\rho^{(cl)}(q, p)) + \hbar \frac{\rho^{(1)}(q, p)}{\rho^{(cl)}(q, p)} + O(\hbar^2)} \, dqdp, \end{aligned}$$

das Ergebnis lautet

$$\boxed{S^{(W)} = S^{(cl)} + \hbar \cdot \underbrace{(-k) \int \rho^{(1)}(q, p) \left( 1 + \ln \left( h\rho^{(cl)}(q, p) \right) \right) \, dqdp}_{=: S^{(1)}} + O(\hbar^2)}. \quad (4.22)$$

### Grenzwertbildung für die von-Neumann-Entropie

Durch die für die Wehrl-Entropie durchgeführte Diskussion können wir jetzt auch für die von-Neumann-Entropie einen sinnvollen Grenzwertübergang definieren. An dem Beweis für die asymptotische Gleichheit von Wehrl- und von-Neumann-Entropie in Anhang A.3 sieht man:

$$S^{(cl)} = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \text{tr} \left( \rho \cdot \ln \left( h \frac{\rho}{2\pi\hbar} \right) \right). \quad (4.23)$$

## 4.3 Inkonsistenz der Wehrl-Entropie

Wir kehren zurück zur Betrachtung der Dynamik des Systems und wollen nun die thermodynamische Konsistenz der Wehrl-Entropie untersuchen. Wir beginnen dafür mit dem einfachen Fall, dass die  $\mathcal{P}$ - und  $\mathcal{Q}$ -Symbole gaußförmig sind, d.h.  $\mathcal{P}_t(\alpha, \alpha^*) := \frac{1}{\Delta\alpha_t} e^{-|\alpha|^2/\Delta\alpha_t}$  bzw.  $\mathcal{Q}_t(\alpha, \alpha^*) := \frac{1}{\Delta\alpha_t+1} e^{-|\alpha|^2/(\Delta\alpha_t+1)}$ . Als Anfangsbedingung für die Gaußglocken verwenden wir eine Breite von  $\Delta\alpha_0 = b$ , aus Abschnitt 3.2 wissen wir, dass die Zeitentwicklung der Breite dann

$$\Delta\alpha_t = b + (N - b)(1 - e^{-\gamma t})$$

ist.

Um  $\dot{S}_t^{(\text{tot})}$  zu berechnen, müssen wir die Entropieproduktion im Wärmebad und im System ermitteln. Zur Berechnung der Entropieproduktion im Wärmebad bietet sich Gleichung (4.4) an, aus ihr folgt durch Berechnung des Integrals:

$$\frac{\dot{S}_t^{(\text{med})}}{k\gamma} = \hbar\omega\beta(\Delta\alpha_t - N) = \ln \left( \frac{N+1}{N} \right) (b - N) e^{-\gamma t}. \quad (4.24)$$

Die Wehrl-Entropie kann direkt ausgerechnet werden, sie ist  $\frac{S_t^{(W)}}{k\gamma} = \frac{1 + \ln(1 + \Delta\alpha_t)}{\gamma}$ . Die Ableitung dieses Terms ist

$$\frac{\dot{S}_t^{(W)}}{k\gamma} = \frac{(N - b)e^{-\gamma t}}{1 + \Delta\alpha_t}, \quad (4.25)$$

damit ist die gesamte Entropieproduktion

$$\frac{\dot{S}_t^{(\text{tot})}}{k\gamma} = \left[ \ln \left( \frac{N+1}{N} \right) - \frac{1}{1 + \Delta\alpha_t} \right] (b - N) e^{-\gamma t}. \quad (4.26)$$

Abbildungen 4.2 und 4.3 zeigen, dass die Wehrl-Entropie thermodynamisch nicht konsistent ist: Für bestimmte Parameterbereiche ist die Gesamtentropieproduktion negativ. Im Detail:

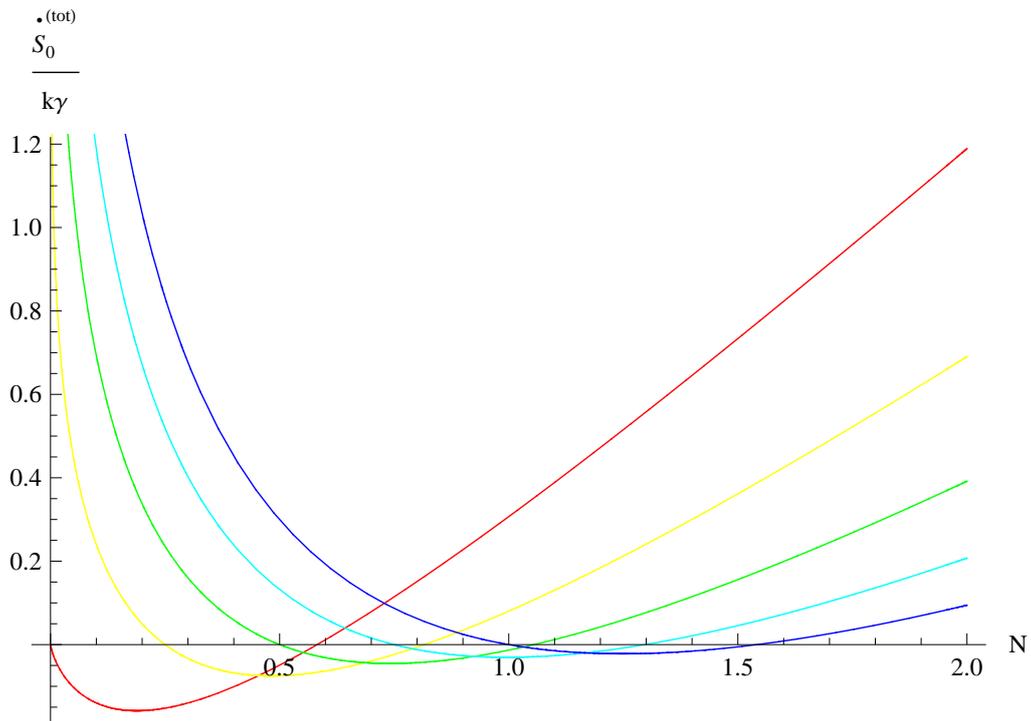


Abbildung 4.2:  $\dot{S}_0^{(\text{tot})}/(k\gamma)$  in Abhängigkeit von  $N$  bei verschiedenen Anfangsbreiten  $\delta \in [0, 1]$ .

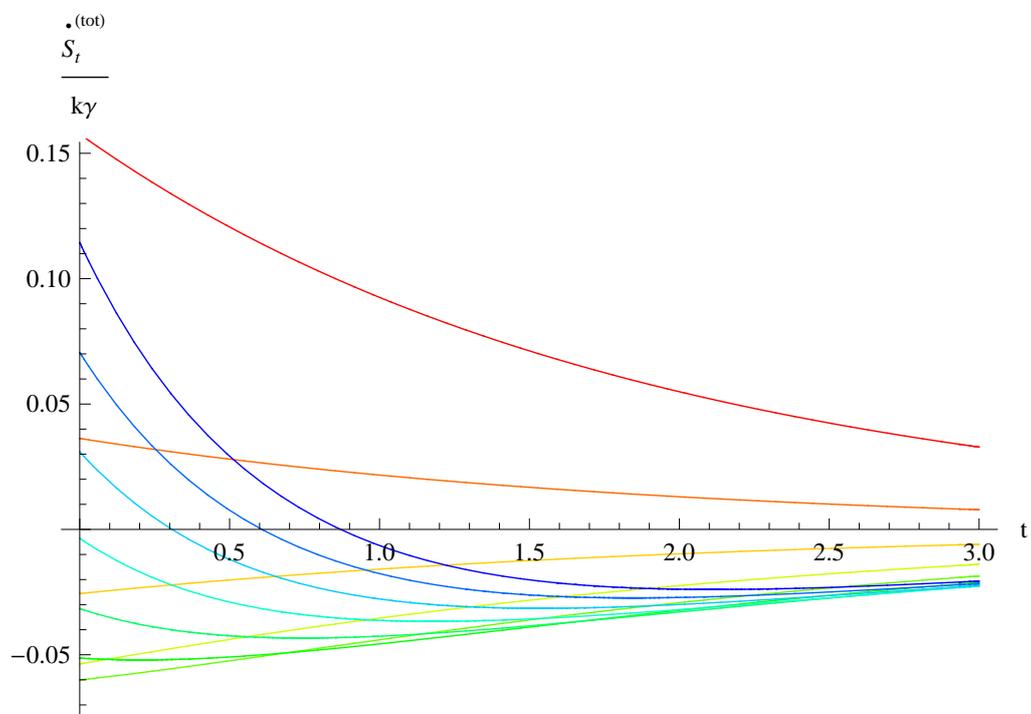


Abbildung 4.3: Zeitabhängigkeit von  $\dot{S}_t^{(\text{tot})}/(k\gamma)$  bei verschiedenen  $N \in [0.2, 1.2]$  und  $\delta = 0.35$ .

- Für eine Anfangsbreite  $b \geq N$  ist  $\dot{S}_t^{(\text{tot})}$  nicht negativ.  
Um dies zu beweisen, genügt es zu zeigen, dass der Term in eckigen Klammern nicht negativ wird. Dies ist aber offensichtlich wahr, da für diese Anfangsbedingungen die Breite  $\Delta\alpha(t)$  größer oder gleich  $N$  ist und somit<sup>3</sup>

$$\ln\left(\frac{N+1}{N}\right) > \frac{1}{1+N} \geq \frac{1}{1+\Delta\alpha(t)}.$$

- Für eine Anfangsbreite  $b < N$  gibt es einen Zeitpunkt  $t^* \geq 0$ , ab dem  $\dot{S}_t^{(\text{tot})}$  negativ ist und für alle Zeiten bleibt.  
Der Grund dafür ist, dass der Term in eckigen Klammern ab einem gewissen Zeitpunkt positiv ist, denn

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{1+\Delta\alpha(t)} = \frac{1}{1+N} < \ln\left(\frac{N+1}{N}\right).$$

Diese Inkonsistenz zeigt, dass es nicht richtig zu sein scheint, die differentielle Entropie einer Wahrscheinlichkeitsdichte im quantenmechanischen Phasenraum (also dem durch die kohärenten Zustände konstruierten Raum, aufgespannt von  $q$  und  $p$ ) zu verwenden. Dessen Unterschied zu unserem klassischen Verständnis des Phasenraums ist die Unschärferelation: Dadurch, dass man dem System prinzipiell keinen festen Punkt im Phasenraum zuordnen darf, sondern nur einen ausgedehnten Bereich, sind die grundlegenden Ereignisse des Wahrscheinlichkeitsraums („System befindet sich am Punkt  $(q_0, p_0)$ “) nicht voneinander unabhängig. Mathematisch wird dies durch die Nicht-Orthogonalität der kohärenten Zustände ausgedrückt.

Die Problematik der Unschärferelation ist zwar durch die Verwendung des  $\mathcal{Q}$ -Symbols bereits in die Definition der Wehrl-Entropie eingegangen, das reicht aber nicht aus. Vielmehr gibt es ein grundsätzliches Problem damit, eine Wahrscheinlichkeitsdichte für einen Ereignisraum zu verwenden, dessen Ereignisse nicht unabhängig sind. Um dieses Problem zu beheben, könnte man nun versuchen, diese Abhängigkeiten herauszufiltern – also gewissermaßen vor der Berechnung die Ereignisse zu entfernen, die von den anderen abhängig sind. Dabei kann man aber auf kein anderes Ergebnis kommen als auf die von-Neumann-Entropie, die ja gerade so definiert ist, dass  $\sum_n p_n \ln p_n$  berechnet wird, wobei  $p_n$  die Wahrscheinlichkeiten einer maximalen Menge von unabhängigen Ereignissen sind (was einer Orthonormalbasis des Hilbertraums entspricht).

## 4.4 Konsistenz der klassischen Entropie

Die Definition der Wehrl-Entropie (4.8) war motiviert von der quasiklassischen Beschreibung des Quantensystems durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung im Phasenraum. Betrachten wir aber beispielsweise klassische Brownsche Teilchen, deren Verteilung durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(q, p)$  beschrieben wird, so ist die Entropiedefinition  $-k \int \rho(q, p) \cdot \ln \rho(q, p) \frac{dq dp}{2\pi\hbar}$  aber thermodynamisch konsistent [14]. Um zu verstehen, warum die Wehrl-Entropie thermodynamisch nicht konsistent ist, betrachten wir zunächst noch einmal das klassische System aus Abschnitt 4.2.4. Wir werden im Folgenden sehen, dass dessen Entropie  $S^{(\text{cl})}$  thermodynamisch konsistent ist, und dann anschließend in Abschnitt 4.5 versuchen zu verstehen, an welchem Punkt im Fall der Wehrl-Entropie der Beweis fehlschlägt.

Um die Rechnung zu vereinfachen, schreiben wir die klassische Fokker-Planck-Gleichung (4.18) zunächst mit einigen neuen Definitionen um: Seien

$$\mu := \frac{\gamma}{2m\omega^2} \quad \text{und} \quad D^{(\text{cl})} := \frac{\gamma}{2m\omega^2\beta}, \quad (4.27)$$

in Abschnitt 5.1 werden diese Größen die Bedeutung einer Mobilität bzw. einer Diffusionskonstante erhalten. Außerdem definieren wir Kräfte

$$F_q := -m\omega^2 q \quad \text{und} \quad F_p := -m\omega^2 p \quad (4.28)$$

<sup>3</sup> Die erste Ungleichung gilt, da für  $x > 1$  die Ungleichung  $\ln x > 1 - \frac{1}{x}$  gilt.

und Ströme, die jeweils in einen reversiblen und einen dissipativen Anteil aufgeteilt werden:

$$\begin{aligned} j_q^{(\text{cl})} &:= \underbrace{\frac{p}{m} \rho_t^{(\text{cl})}}_{j_q^{(\text{cl},r)}} + \underbrace{(\mu F_q - D^{(\text{cl})} \partial_q) \rho_t^{(\text{cl})}}_{j_q^{(\text{cl},d)}} \\ j_p^{(\text{cl})} &:= \underbrace{-m\omega^2 q \rho_t^{(\text{cl})}}_{j_p^{(\text{cl},r)}} + \underbrace{(\mu F_p - m^2 \omega^2 D^{(\text{cl})} \partial_p) \rho_t^{(\text{cl})}}_{j_p^{(\text{cl},d)}}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Die dissipativen Ströme enthalten die Drehbewegung um den Ursprung (siehe Abbildung 3.1) nicht, es handelt sich also um die Ströme im Wechselwirkungsbild.

Damit kann Gleichung (4.18) neu geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_t^{(\text{cl})} &= -\partial_q j_q^{(\text{cl})} - \partial_p j_p^{(\text{cl})} \\ &= -\partial_q j_q^{(\text{cl},d)} - \partial_p j_p^{(\text{cl},d)} - \left( \frac{p}{m} \partial_q - m\omega^2 q \partial_p \right) \rho_t^{(\text{cl})}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Damit berechnen wir nun  $\dot{S}_t^{(\text{cl})}$ . Die Zeitableitung kann in das Integral aus der Definition (4.19) der klassischen Entropie gezogen werden, dort wird eine Produktregel angewandt, wodurch der Integrand zu  $(\partial_t \rho_t^{(\text{cl})}) \ln(h \rho_t^{(\text{cl})}) + \partial_t \rho_t^{(\text{cl})}$  wird. Das Integral über den zweiten Summanden verschwindet aufgrund der Normierung (4.17). In dem anderen Term wird die Fokker-Planck-Gleichung (4.30) eingesetzt, somit ist

$$\dot{S}_t^{(\text{cl})} = -k \int (\partial_t \rho_t^{(\text{cl})}) \ln(h \rho_t^{(\text{cl})}) dqdp = k \int (\partial_q j_q^{(\text{cl})} + \partial_p j_p^{(\text{cl})}) \ln(h \rho_t^{(\text{cl})}) dqdp.$$

Wenn wir beide Ableitungen partiell integrieren, erhalten wir

$$\begin{aligned} \dot{S}_t^{(\text{cl})} &= -k \int \frac{j_q^{(\text{cl})} \partial_q \rho_t^{(\text{cl})} + j_p^{(\text{cl})} \partial_p \rho_t^{(\text{cl})}}{\rho_t^{(\text{cl})}} dqdp \\ &= -k \int \frac{j_q^{(\text{cl},d)} \partial_q \rho_t^{(\text{cl})} + j_p^{(\text{cl},d)} \partial_p \rho_t^{(\text{cl})}}{\rho_t^{(\text{cl})}} dqdp - k \int \left( \frac{p}{m} \partial_q \rho_t^{(\text{cl})} - m\omega^2 q \partial_p \rho_t^{(\text{cl})} \right) dqdp. \end{aligned}$$

Das zweite Integral verschwindet, da  $\rho_t^{(\text{cl})}$  im Unendlichen verschwindet. In dem ersten Integral verwenden wir folgenden Trick: Für  $\partial_q \rho_t^{(\text{cl})}$  und  $\partial_p \rho_t^{(\text{cl})}$  werden die Definitionen von  $j_q^{(\text{cl},d)}$  beziehungsweise  $j_p^{(\text{cl},d)}$  eingesetzt. Denn dann sieht man

$$\dot{S}_t^{(\text{cl})} = \underbrace{\frac{k}{D^{(\text{cl})}} \int \frac{\left( j_q^{(\text{cl},d)} \right)^2 + \left( j_p^{(\text{cl},d)} \right)^2}{\rho_t^{(\text{cl})}} dqdp}_{=: \Lambda_t^{(\text{cl})}} - k \underbrace{\frac{\mu}{D^{(\text{cl})}} \int \left( j_q^{(\text{cl},d)} F_q + \frac{j_p^{(\text{cl},d)} F_p}{m^2 \omega^2} \right) dqdp}_{=: \dot{E}_t^{(\text{cl})}}. \quad (4.31)$$

In Anhang A.4 wird gezeigt (Gleichung (A.22)), dass das Integral im zweiten Term genau die negative Änderung der Energie des klassischen Systems  $E^{(\text{cl})} := \lim_{\hbar \rightarrow 0} E^{(\text{sys})}$  ist. Demnach können wir Gleichung (4.31) folgendermaßen umschreiben:

$$\dot{S}_t^{(\text{cl})} - k \frac{\mu}{D^{(\text{cl})}} \dot{E}_t^{(\text{cl})} = \Lambda_t^{(\text{cl})}. \quad (4.32)$$

Für das klassische System gilt nun eine Einstein-Relation:  $\frac{\mu}{D^{(\text{cl})}} = \beta$ .  $-k\beta \dot{E}_t^{(\text{cl})}$  ist aber die Entropieproduktion im Wärmebad  $\dot{S}_t^{(\text{tot})}$  (siehe Abschnitt 4.1). Folglich ist

$$\boxed{\dot{S}_t^{(\text{cl,tot})} = \dot{S}_t^{(\text{cl})} + \dot{S}_t^{(\text{med})} = \Lambda_t^{(\text{cl})} \geq 0}, \quad (4.33)$$

dass die Größe  $\Lambda_t^{(\text{cl})}$  nicht negativ ist, sieht man sofort an der Definition in Gleichung (4.31).

## 4.5 Einführung einer effektiven Badtemperatur

Wir wollen nun den Beweis von eben mit der Wehrl-Entropie wiederholen, um zu untersuchen, wieso diese thermodynamisch nicht konsistent ist. Dafür führen wir zunächst einige Definitionen, ähnlich zu Gleichungen (4.27), (4.28) und (4.29) ein: Wir haben eine neue Diffusionskonstante

$$D = \frac{\gamma(N+1)\hbar}{2m\omega} \quad (4.34)$$

und neue Ströme

$$j_q := \underbrace{\frac{p}{m} \mathcal{Q}_t}_{j_q^{(r)}} + \underbrace{(\mu F_q - D \partial_q) \mathcal{Q}_t}_{j_q^{(d)}} \quad \text{und} \quad j_p := \underbrace{-m\omega^2 q \mathcal{Q}_t}_{j_p^{(r)}} + \underbrace{(\mu F_p - m^2 \omega^2 D \partial_p) \mathcal{Q}_t}_{j_p^{(d)}}. \quad (4.35)$$

Mit diesen Definitionen lautet die Fokker-Planck-Gleichung (3.24)

$$\partial_t \mathcal{Q}_t = -\partial_q j_q - \partial_p j_p = -\partial_q j_q^{(d)} - \partial_p j_p^{(d)} - \left( \frac{p}{m} \partial_q - m\omega^2 q \partial_p \right) \mathcal{Q}_t \quad (4.36)$$

und die Rechnung kann wie in Abschnitt 4.4 geführt werden mit dem Ergebnis

$$\dot{S}_t^{(W)} = \underbrace{\frac{k}{D} \int \frac{\left(j_q^{(d)}\right)^2 + \left(j_p^{(d)}\right)^2 / (m\omega)^2}{\mathcal{Q}_t} \frac{dq dp}{2\pi\hbar}}_{=: \Lambda_t} - k \frac{\mu}{D} \underbrace{\int \left( j_q^{(d)} F_q + \frac{j_p^{(d)} F_p}{m^2 \omega^2} \right) \frac{dq dp}{2\pi\hbar}}_{=-\dot{E}_t^{(\text{sys})}}. \quad (4.37)$$

In Anhang A.4 wird auch gezeigt, dass das Integral im zweiten Term wieder  $-\dot{E}_t^{(\text{sys})}$  ist. An dieser Stelle ist es aber nicht möglich, wie oben die Einstein-Relation zu verwenden, denn der Vorfaktor

$$\beta^{(\text{eff})} := \frac{\mu}{D} = \frac{1 - e^{-\hbar\omega\beta}}{\hbar\omega} = \beta - \frac{\hbar\omega}{2} \beta^2 + \frac{\hbar^2 \omega^2}{6} \beta^3 \mp \dots \quad (4.38)$$

ist ungleich  $\beta$ . Dies ist der Grund für die thermodynamische Inkonsistenz der Wehrl-Entropie.

Die Größe  $\beta^{(\text{eff})}$  nennen wir (inverse) effektive Badtemperatur, da in der klassischen Rechnung an dieser Stelle die inverse Badtemperatur steht. In die Temperatur  $T = \frac{1}{k\beta}$  umgeschrieben lautet Gleichung (4.38):

$$T^{(\text{eff})} = T + \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{k} + \frac{1}{12T} \frac{\hbar^2 \omega^2}{k^2} \mp \dots \quad (4.39)$$

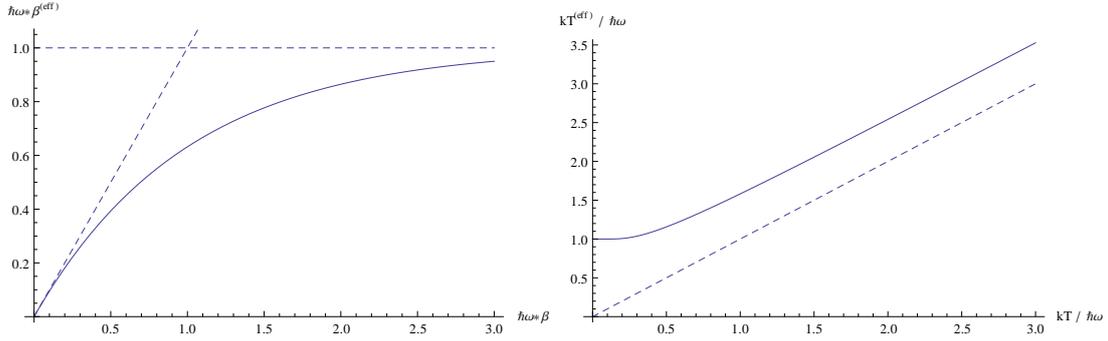
An Gleichungen (4.38) und (4.39), die in Abbildung 4.4 geplottet sind, sieht man, dass die effektive Temperatur  $T^{(\text{eff})}$  immer größer als die tatsächliche Temperatur (bzw.  $\beta^{(\text{eff})} < \beta$ ) ist, und dass die beiden Größen zudem für große Temperaturen bzw. kleine  $\beta$  (oder auch  $\hbar \rightarrow 0$ ) asymptotisch gleich sind.

Für die thermodynamische Inkonsistenz gibt es folgende Interpretationsmöglichkeiten:

**Möglichkeit 1:** Wie in Abschnitt 4.3 besprochen darf man keine Entropie einer Wahrscheinlichkeitsverteilung im quantenmechanischen Phasenraum berechnen, man muss die klassische Entropie  $S^{(\text{cl})}$  der Wehrl-Entropie  $S^{(\text{W})}$  vorziehen. Die Wehrl-Entropie ist thermodynamisch inkonsistent, denn es gilt

$$\dot{S}_t^{(\text{tot})} = \Lambda_t + k(\beta^{(\text{eff})} - \beta) \dot{E}_t^{(\text{sys})},$$

der zweite Term kann die gesamte Entropieproduktion genau dann negativ machen, wenn das System Wärme vom Bad aufnimmt. Das ist konsistent zum in Abschnitt 4.3 gefundenen Ergebnis: Nur wenn sich die Breite der Gaußglocke von unten der Breite des thermischen



**Abbildung 4.4:** Plot der effektiven Badtemperatur (für die Wehrl-Entropie) gegen die tatsächliche Temperatur (rechts für  $T$ , links für  $\beta = \frac{1}{kT}$ ).

Gleichgewichts nähert (und wenn das thermische Gleichgewicht schon fast erreicht ist sodass der Term  $\Lambda$  klein wird), dann ist  $\dot{S}_t^{(\text{tot})} < 0$ . Eine Verbreiterung der Gaußglocke entspricht einer Erhöhung der Energie des Systems, das sieht man leicht, da

$$E_t^{(\text{sys})} = \int |\alpha|^2 \mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2\alpha}{\pi} - \frac{\hbar\omega}{2}$$

ist (siehe Rechnung in Abschnitt 4.1).

**Möglichkeit 2:** Der Term  $\Lambda_t$  ist die tatsächliche gesamte Entropieänderung im System und wir haben in Abschnitt 4.1 die Wärme falsch identifiziert. Das heißt, man muss dem Wärmebad tatsächlich die effektive Badtemperatur  $\beta^{(\text{eff})}$  zusprechen; die Entropieproduktion im Wärmebad ist demnach  $\dot{S}_t^{(\text{med})} = -k\beta^{(\text{eff})}\dot{E}_t^{(\text{sys})}$  anstatt  $-k\beta\dot{E}_t^{(\text{sys})}$ . Dann ist die Wehrl-Entropie thermodynamisch konsistent. Für diese Interpretation spricht, dass auch in der  $R$ -Größe in Kapitel 5 die effektive Badtemperatur vor dem Term  $\dot{E}_t^{(\text{sys})}$  auftauchen wird.

Abschließend bemerken wir noch, dass die effektive Badtemperatur auch im Grenzwert  $\omega \rightarrow 0$  in die tatsächliche Temperatur übergeht. Bei  $\omega = 0$  erhält man anschaulich ein freies Teilchen („Quantum Brownian Motion“), dieses kann durch die gleichen kohärenten Zustände beschrieben werden wie ein Teilchen im harmonischen Oszillator. Deshalb ist es vorstellbar, dass die Entropiedefinition von Wehrl in diesem Fall thermodynamisch konsistent ist. Da man aber die Mastergleichung für Quantum Brownian Motion (siehe [29, Gl. 3.410]) nicht aus dem Limes  $\omega \rightarrow 0$  der Lindblad-Gleichung (3.2) erhält, müsste man das noch genauer untersuchen. Dies wäre möglicherweise ein interessantes Thema für zukünftige Arbeiten.

## 4.6 Verwendung von $\mathcal{P}$ anstatt $\mathcal{Q}$

Die Definition der Wehrl-Entropie ist von einem gewissen Standpunkt<sup>4</sup> aus betrachtet ein wenig willkürlich: Stellen wir uns vor, dass wir mit dem  $\mathcal{P}$ -Symbol beginnen, und dieses mit einer Gaußglocke der Breite  $\varepsilon > 0$  falten. Für sehr kleine  $\varepsilon$  erhalten wir Funktionen, die dem  $\mathcal{P}$ -Symbol stark ähneln, und sicherlich noch negative Bereiche haben können. Wird  $\varepsilon$  größer, so wird irgendwann ein Punkt  $\varepsilon_0$  erreicht, sodass für  $\varepsilon > \varepsilon_0$  die resultierenden Funktionen für keine Dichtematrix mehr negativ sein können.

Ein Kandidat für diese Grenze  $\varepsilon_0$  ist sicherlich die 1, denn bei  $\varepsilon = 1$  erhalten wir das  $\mathcal{Q}$ -Symbol. Für dieses konnten wir leicht zeigen, dass es nicht negativ sein kann, und aufgrund der

<sup>4</sup> Dies ist hauptsächlich ein mathematischer Standpunkt – eingangs wurde schließlich bereits erwähnt, dass es eine Vielzahl physikalischer Anwendungsmöglichkeiten für genau die oben verwendete Definition der Wehrl-Entropie gibt.

Assoziativität der Faltung können für  $\varepsilon \geq 1$  die resultierenden Funktionen nicht mehr negativ sein. Deshalb haben wir bisher das  $\mathcal{Q}$ -Symbol verwendet. Es ist aber nicht klar, ob es möglicherweise noch eine kleinere Schranke  $\varepsilon_0$  geben könnte, für die das Gleiche gelten würde. Insofern ist es nicht klar, weshalb das  $\mathcal{Q}$ -Symbol hier ausgezeichnet sein sollte.

Eine Funktion, die dagegen sicherlich ausgezeichnet ist, ist das  $\mathcal{P}$ -Symbol. Deshalb werden wir dieses im Folgenden noch einmal genauer betrachten. Für das  $\mathcal{P}$ -Symbol, also  $\varepsilon = 0$ , ist die Wahrscheinlichkeitsdichte zwar nicht positiv, einerseits können wir aus der folgenden Rechnung aber am Ende auf den allgemeinen Fall  $\varepsilon \in (0, 1)$  schließen, andererseits werden die Rechnungen später im Abschnitt über stochastische Thermodynamik benötigt.

Wir bemerken noch, dass wir ab diesem Punkt nur noch solche Dichtematrizen betrachten können, deren  $\mathcal{P}$ -Symbol nicht singular ist, sodass der Ausdruck  $\mathcal{P}(q, p)$  eine Bedeutung besitzt.

Die Frage, die wir nun beantworten wollen, lautet: Hat die Größe

$$Z := -k \int \mathcal{P}_t(q, p) \cdot \ln \mathcal{P}_t(q, p) \frac{dqdp}{2\pi\hbar}, \quad (4.40)$$

eine Bedeutung? Falls  $\mathcal{P}_t(q, p) < 0$  ist, müssen wir uns für einen Zweig des Logarithmus entscheiden. Wir werden später feststellen, dass die Ergebnisse der Berechnungen von physikalischen Größen nicht von dieser Wahl abhängen. Wir entscheiden uns für folgenden Zweig:  $\ln \mathcal{P}_t(q, p) = \ln |\mathcal{P}_t(q, p)| + i\pi$ . In dem Fall  $\mathcal{P}_t(q, p) = 0$  definieren wir wie üblich  $\mathcal{P}_t(q, p) \cdot \ln \mathcal{P}_t(q, p) = 0$ .

Durch eine Aufteilung des Integrationsgebiets in den Bereich, in dem  $\mathcal{P}$  positiv ist, und den Bereich, in dem  $\mathcal{P}$  negativ ist, erhält man Real- und Imaginärteil der eben definierten Größe:

$$\begin{aligned} Z &= -k \int_{\mathcal{P}>0} \mathcal{P}_t(q, p) \ln |\mathcal{P}_t(q, p)| \frac{dqdp}{2\pi\hbar} - k \int_{\mathcal{P}<0} \mathcal{P}_t(q, p) (\ln |\mathcal{P}_t(q, p)| + i\pi) \frac{dqdp}{2\pi\hbar} \\ &= -k \int \mathcal{P}_t(q, p) \ln |\mathcal{P}_t(q, p)| \frac{dqdp}{2\pi\hbar} - i\pi k \int_{\mathcal{P}<0} \mathcal{P}_t(q, p) \frac{dqdp}{2\pi\hbar}. \end{aligned}$$

Der Imaginärteil besitzt also eine ganz einfache Deutung: Er gibt gewissermaßen an, wie stark die Quanteneffekte sind, indem nur der negative Teil von  $\mathcal{P}$  gemessen wird.

Den Realteil könnte man versuchsweise als Entropiedefinition

$$\boxed{S_t^{(\mathcal{P})} := -k \int \mathcal{P}_t(q, p) \ln |\mathcal{P}_t(q, p)| \frac{dqdp}{2\pi\hbar}} \quad (4.41)$$

verwenden. Dabei stellt sich heraus, dass die Rechnung aus Abschnitt 4.5 wortwörtlich wiederverwendet werden kann, der einzige Unterschied ist ein Faktor in der Fokker-Planck-Gleichung (3.4), der einer anderen Diffusionskonstante

$$D^{(\mathcal{P})} := \frac{\gamma N \hbar}{2m\omega} \quad (4.42)$$

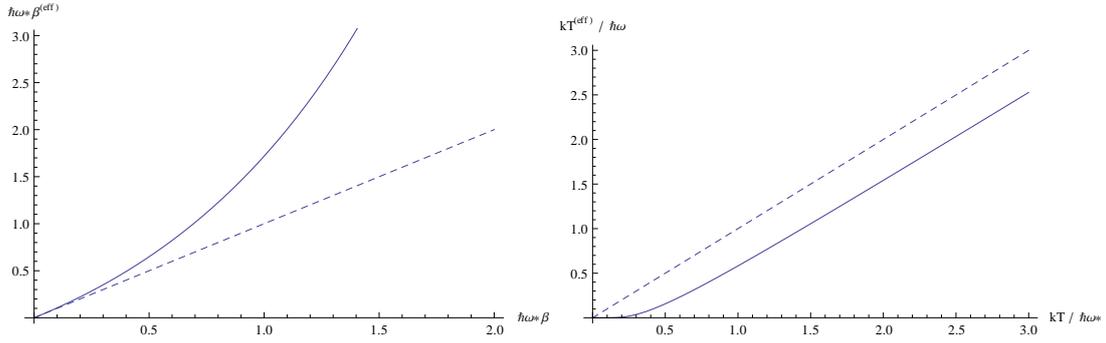
entspricht (vergleiche Gleichung (4.34)), zudem gibt es wieder neue Definitionen der Ströme:

$$j_q^{(\mathcal{P})} := \underbrace{\frac{p}{m} \mathcal{P}_t}_{j_q^{(\mathcal{P},r)}} + \underbrace{(\mu F_q - D \partial_q) \mathcal{P}_t}_{j_q^{(\mathcal{P},d)}} \quad \text{und} \quad j_p^{(\mathcal{P})} := \underbrace{-m\omega^2 q \mathcal{P}_t}_{j_p^{(\mathcal{P},r)}} + \underbrace{(\mu F_p - m^2 \omega^2 D^{(\mathcal{P})} \partial_p) \mathcal{P}_t}_{j_p^{(\mathcal{P},d)}}. \quad (4.43)$$

Deshalb ist analog zu Gleichung (4.37)

$$\dot{S}_t^{(\mathcal{P})} = \frac{k}{D^{(\mathcal{P})}} \int \frac{\left(j_q^{(\mathcal{P},d)}\right)^2 + \left(j_p^{(\mathcal{P},d)}\right)^2 / (m\omega)^2}{\mathcal{P}_t} \frac{dqdp}{2\pi\hbar} - k \frac{\mu}{D^{(\mathcal{P})}} \int \left(j_q^{(\mathcal{P},d)} F_q + \frac{j_p^{(\mathcal{P},d)} F_p}{m^2 \omega^2}\right) \frac{dqdp}{2\pi\hbar}. \quad (4.44)$$

Im Abschnitt A.4 im Anhang wird gezeigt, dass mit der neuen Diffusionskonstante  $D^{(\mathcal{P})}$  und den veränderten Strömen  $j_q, j_p$  für das zweite Integral wieder exakt derselbe Ausdruck wie in der



**Abbildung 4.5:** Plot der effektiven Badtemperatur (für die Entropie aus Gleichung (4.41) gegen die tatsächliche Temperatur (rechts für  $T$ , links für  $\beta = \frac{1}{kT}$ ).

vorherigen Rechnung mit dem  $\mathcal{Q}$ -Symbol, nämlich  $-\dot{E}_t^{(\text{sys})}$  herauskommt. In jener Rechnung oben wussten wir aber, dass der erste Term nicht negativ ist. Das ist in diesem Fall aber nur dann klar, wenn das  $\mathcal{P}$ -Symbol nicht negativ ist. Es ist schwer, aus dieser Gleichung weitere Informationen zu extrahieren; in Abschnitt 5.2 werden wir aber durch eine andere Herangehensweise genauer verstehen, was hier passiert.

An dieser Stelle soll nur noch die effektive Badtemperatur

$$\beta^{(\mathcal{P}, \text{eff})} := \frac{\mu}{D^{(\mathcal{P})}} = \frac{e^{\hbar\omega\beta} - 1}{\hbar\omega} = \beta + \frac{\hbar\omega}{2}\beta^2 + \frac{\hbar^2\omega^2}{6}\beta^3 + \dots \quad (4.45)$$

diskutiert werden, mit der der zweite Term von (4.37) zu  $-\dot{S}_t^{(\text{med})}$  wird. In die Temperatur  $T$  umgeschrieben, lautet Gleichung (4.45):

$$T^{(\mathcal{P}, \text{eff})} = T - \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{k} + \frac{1}{12T} \frac{\hbar^2\omega^2}{k^2} \mp \dots \quad (4.46)$$

In Abbildung 4.5 sind Gleichungen (4.45) und (4.46) geplottet; im Gegensatz zur effektiven Badtemperatur für die Wehrl-Entropie aus Abschnitt 4.5 ist diese neue effektive Badtemperatur nun immer kleiner als die tatsächliche Temperatur (bzw.  $\beta^{(\mathcal{P}, \text{eff})} > \beta$ ). Für große Temperaturen  $\beta \rightarrow 0$  oder auch für  $\hbar \rightarrow 0$  sind aber  $\beta^{(\mathcal{P}, \text{eff})}$  und  $\beta$  asymptotisch gleich (wie auch  $\beta^{(\text{eff})}$  und  $\beta$ ).

Da die eine effektive Badtemperatur (4.38) größer und die andere effektive Badtemperatur (4.45) kleiner als die tatsächliche Temperatur ist, stellt sich schließlich noch die Frage: Könnte man für Verteilungen, die „zwischen  $\mathcal{Q}$  und  $\mathcal{P}$ “ liegen, also für  $\varepsilon \in (0, 1)$  (wie zum Beispiel die Wigner-Funktion aus Abschnitt 2.3.4 bei  $\varepsilon = \frac{1}{2}$ ), eine effektive Badtemperatur erreichen, die exakt gleich der tatsächlichen Temperatur ist? Dies ist aber unmöglich. Bei der oben besprochenen Glättung des  $\mathcal{P}$ -Symbols mit einer Gaußglocke der Breite  $\varepsilon$  würden wir offenbar eine Diffusionskonstante  $\tilde{D} := \frac{\gamma(N+\varepsilon)\hbar}{2m\omega}$  in der resultierenden Fokker-Planck-Gleichung erhalten. Dann wäre

$$\tilde{\beta}^{(\text{eff})} = \frac{\mu}{\tilde{D}} = \beta + \frac{\hbar\omega}{2}(1 - 2\varepsilon)\beta^2 + \frac{\hbar^2\omega^2}{6}(1 - 6\varepsilon + 6\varepsilon^2)\beta^3 + \dots,$$

dies ist für alle  $\varepsilon$  nicht identisch zu  $\beta$  (denn  $\varepsilon$  müsste  $\frac{1}{2}$  sein, damit der zweite Term verschwindet, dann verschwindet aber der dritte Term nicht).

# Kapitel 5

## Thermodynamik auf Trajektorienebene

### 5.1 Stochastische Thermodynamik

Als weiterer wichtiger Punkt soll überprüft werden, ob man Konzepte der stochastischen Thermodynamik auf dieses Problem übertragen kann. Im Gegensatz zur Ensemble-Thermodynamik betrachtet die stochastische Thermodynamik nicht nur die Mittelwerte, die sich aus den vielen einzelnen Realisierungen des Ensembles ergeben, sondern auch diese einzelnen Realisierungen. Man versucht, thermodynamische Größen wie Arbeit, Wärme oder Entropie dann auf der Ebene dieser Trajektorien zu definieren. Es folgt ein kurzer Einblick in die Grundideen dieses Gebiets, Details finden sich beispielsweise in [13].

Ein paradigmatisches Beispiel der stochastischen Thermodynamik ist das eines kolloidalen Teilchens, das eine Brownsche Bewegung ausführt. Auf der Ensembleebene gibt es eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\rho_t(x)$  dafür, das Teilchen zum Zeitpunkt  $t$  am Punkt  $x$  zu finden, diese entwickelt sich nach einer Fokker-Planck-Gleichung. Betrachten wir nun ein einzelnes kolloidales Teilchen, so wird dieses durch eine stochastische Bewegungsgleichung, die sogenannte Langevin-Gleichung beschrieben. Dabei ist wichtig, dass man aus einer gegebenen Langevin-Gleichung immer wieder eindeutig die Fokker-Planck-Gleichung berechnen kann. Kennt man dagegen nur die Fokker-Planck-Gleichung, so gibt es im Allgemeinen unendlich viele zugeordnete Langevin-Gleichungen. Ist man nur an Ensemble-Größen interessiert, so ist diese Wahl aber nicht von Bedeutung. Zur Berechnung der Fokker-Planck-Gleichung aus der Langevin-Gleichung und umgekehrt siehe auch [8].

Eine andere Betrachtungsweise ist die, dass man die Menge aller möglichen Trajektorien  $x(\tau)$  des Kolloids betrachtet, und deren Wahrscheinlichkeiten  $p[x(\tau)]$  („Pfadgewichte“). Um nun Ensemble-Mittelwerte von Größen zu bestimmen, deren Werte auf Trajektorienebene bekannt sind, ist es nötig, einen Mittelwert über alle Trajektorien zu bilden. Ein solches Integral über alle möglichen Trajektorien heißt Pfadintegral, für das Integrationsmaß schreiben wir  $D[x(\tau)]$  (eine exakte Definition des Pfadintegrals findet sich beispielsweise in [46]). Für eine gegebene Größe  $\Omega(x(\tau))$  auf Trajektorienebene können wir also mit dem Pfadintegral

$$\langle \Omega \rangle = \int dx_0 \rho_0(x_0) \int D[x(\tau)] p[x(\tau)|x_0] \Omega(x(\tau)) \quad (5.1)$$

den Ensemble-Mittelwert berechnen. Dabei ist  $\rho_0(x_0)$  die Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Kolloid zum Anfangszeitpunkt und  $p[x(\tau)|x_0]$  die bedingte Wahrscheinlichkeit für die Trajektorie  $x(\tau)$  mit dem Anfangspunkt  $x_0$ . Genauso kann man mit dem Pfadintegral auch zu der gegebenen Anfangsverteilung  $\rho_0$  die Verteilung zu einem späteren Zeitpunkt  $t$  berechnen:

$$\rho_t(x') = \int dx_0 \rho_0(x_0) \int_{x(\tau)=x'} D[x(\tau)] p[x(\tau)|x_0] . \quad (5.2)$$

Auf diesem Gerüst aufbauend ist es wie erwähnt möglich, thermodynamische Größen auf der Ebene der einzelnen Trajektorien zu definieren. Sie müssen immer so definiert werden, dass ihre Ensemblemittelwerte nach Gleichung (5.1) wieder die entsprechenden Größen der Ensemble-

Thermodynamik sind. Für die Trajektorie eines einzelnen Kolloids kann man zum Beispiel angeben, wie groß die verrichtete Arbeit und die dissipierte Wärme sind. Bereits auf Trajektorienebene gilt dann der erste Hauptsatz der Thermodynamik [47]. Wichtiger für diese Arbeit ist die Definition der Entropie auf Trajektorienebene,  $s(x(\tau)) = -k \ln \rho_\tau(x(\tau))$ . Von dieser Definition ausgehend wurde in [14] gezeigt, dass nicht nur der zweite Hauptsatz der Thermodynamik  $\langle \Delta s^{(\text{tot})} \rangle \geq 0$  folgt, sondern auch ein integrales Fluktuationstheorem

$$\boxed{\langle e^{-\Delta s^{(\text{tot})}/k} \rangle = 1}. \quad (5.3)$$

Die eckigen Klammern meinen hier das Ensemblemittel über alle möglichen Anfangspunkte  $(q_0, p_0)$  und Trajektorien  $(q(\tau), p(\tau))$ .

Dieses integrale Fluktuationstheorem ist eine präzisere Formulierung des zweiten Hauptsatzes, da man daraus den zweiten Hauptsatz mit der Jensenschen Ungleichung [42, Thm. 86] folgern kann. Das Fluktuationstheorem macht aber darüber hinaus noch eine Aussage über die einzelnen Trajektorien, nämlich wie viele von ihnen durchschnittlich den Hauptsatz verletzen und wie stark [48, 49]. Fluktuationstheoreme sind also sehr wichtige Gleichungen. Es existieren außer Gleichung (5.3) noch weitere Fluktuationstheoreme, beispielsweise die Jarzynski-Relation [15]

$$\langle e^{-\beta w} \rangle = e^{-\beta \Delta F}, \quad (5.4)$$

wobei  $w$  die verrichtete Arbeit entlang einer Trajektorie und  $\Delta F$  die Differenz der freien Energie ist. Die Entdeckung dieser Relation war ein bedeutendes Ereignis in der Entwicklung der stochastischen Thermodynamik. Die Arbeit [14] zeigt zudem, wie all diese Fluktuationstheoreme verallgemeinert werden können, und dass es einen fundamentalen Zusammenhang beispielsweise zwischen dem Verhalten des Systems unter Zeitumkehr und Gleichung (5.3) gibt (siehe auch [50]). In Abschnitt 5.2 werden wir das noch genauer sehen.

### Anwendung auf das hier beschriebene Quantensystem

Wir können auch für das Quantensystem, um das es in dieser Arbeit geht, einen Trajektorienbegriff definieren: Jeder Phasenraumpunkt  $(q, p)$  entspricht der Dichtematrix eines reinen kohärenten Zustands  $|q, p\rangle\langle q, p|$ . Eine kohärente Trajektorie im Phasenraum ist also eine zeitlich veränderliche Dichtematrix, die zu jedem Zeitpunkt einen reinen kohärenten Zustand beschreibt. So wie im klassischen Fall ein einzelnes Teilchen zu jedem Zeitpunkt einen definierten Ort und Geschwindigkeit besitzt, kann man aufgrund der  $\mathcal{P}$ -Darstellung jede Dichtematrix als klassische Mischung (mit möglicherweise teilweise negativen Koeffizienten) von ausschließlich solchen Anteilen auffassen, die wohldefinierten Phasenraumpunkten entsprechen.

Damit das alles funktionieren kann, ist es aber notwendig, nicht das  $\mathcal{Q}$ -Symbol sondern das  $\mathcal{P}$ -Symbol als die (Pseudo-) Wahrscheinlichkeitsverteilung zu verwenden. Denn ein maximal lokalisierter Zustand sollte wie im klassischen Fall einer  $\delta$ -Funktion in der Wahrscheinlichkeitsverteilung entsprechen. Dies ist bei der  $\mathcal{Q}$ -Darstellung nicht der Fall (siehe Beispiel 1 in Abschnitt 2.4).

Der Vollständigkeit halber sei hier noch angemerkt, dass dies nicht die einzige Möglichkeit ist, stochastische Trajektorien für offene Quantensysteme zu definieren. In der Arbeit [51] von Horowitz wird gezeigt, wie man eine stochastische Schrödingergleichung aufstellen kann, und dann die von-Neumann-Entropie entlang dieser Trajektorie definieren. Es zeigt sich, dass man mit der dort verwendeten Trajektoriendefinition einen ersten Hauptsatz auf Trajektorienebene und ein Fluktuationstheorem für die Entropieproduktion beweisen kann. Das ist auch das zu erwartende Ergebnis, denn die von-Neumann-Entropie ist ja auch auf Ensembleebene thermodynamisch konsistent.

### Assoziierte Langevin-Gleichungen in der $\mathcal{P}$ -Darstellung

Wie bereits beschrieben, gibt es zu einer Fokker-Planck-Gleichung immer (im Allgemeinen nicht eindeutige) assoziierte Langevin-Gleichungen. Langevin-Gleichungen sind stochastische Differentialgleichungen (siehe z.B. [8, Kap. 3.3.3]), da die Trajektorie des Teilchens nicht nur von der

Anfangsbedingung abhängt: Für eine gegebene Anfangsbedingung wird nicht jedesmal die gleiche Trajektorie realisiert. Stattdessen tritt jede mögliche Realisierung mit einer endlichen Wahrscheinlichkeit  $p[x(t)]$  auf. Im Folgenden wird für solche stochastischen Differentialgleichungen eine symbolische Schreibweise verwendet, die aussieht wie eine gewöhnliche Differentialgleichung und zudem noch eine „stochastische Kraft“  $\xi_t$  enthält. Für einen Wiener-Prozess  $dx_t = dW_t$  wird also beispielsweise die Schreibweise  $\dot{x}_t = \xi_t$  verwendet, mit den Zusatzangaben  $\langle \xi_t \rangle = 0$  und  $\langle \xi_t \xi_{t'} \rangle = \delta(t - t')$ . Die Funktion  $x_t$  ist zwar nirgends differenzierbar, die Gleichung ist aber durch stochastische Integration<sup>1</sup> zu verstehen.

[8, Kap. 3.4] beschreibt, wie man die Koeffizienten der Langevin-Gleichung aus der Fokker-Planck-Gleichung berechnen kann. Aus der  $\mathcal{P}$ -Gleichung (3.4) liest man ab, dass die Größe, die in [8] „Driftvektor“ genannt wird,  $D^{(1)} = \begin{pmatrix} -q\gamma/2 + p/m \\ -p\gamma/2m\omega^2 q \end{pmatrix}$  ist, und die „Diffusionsmatrix“ ist  $D^{(2)} = D^{(\mathcal{P})} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & m^2\omega^2 \end{pmatrix}$  (wobei der obere Eintrag jeweils zur  $q$ -Gleichung gehört). Gleichungen [8, 3.118] und [8, 3.119] liefern dann sofort

$$\begin{cases} \dot{q} = \mu F_q + \xi_t + \frac{1}{m}p \\ \dot{p} = \mu F_p + m\omega^2 \xi_t' - m\omega^2 q \end{cases}, \quad (5.5)$$

wobei  $\langle \xi_t \rangle = \langle \xi_t' \rangle = 0$ ,  $\langle \xi_t \xi_{t'} \rangle = 0$  und  $\langle \xi_t \xi_{t'}' \rangle = \langle \xi_t' \xi_{t'} \rangle = 2D^{(\mathcal{P})} \delta(t - t')$  sind.

Wir bemerken, dass für das zugeordnete klassische System aus Abschnitt 4.2.4 dieselben Langevin-Gleichungen gelten, es muss nur  $D^{(\mathcal{P})}$  durch  $D^{(\text{cl})}$  ersetzt werden. Dies zeigt, dass in diesem klassischen System  $q$  und  $p$  keine konjugierten Variablen sind, da beide unabhängig verrauscht sind.

## 5.2 R-Größe und Fluktuationstheorem

Wie in [14] gezeigt wurde, kann man Größen erhalten, die ein integrales Fluktuationstheorem erfüllen, indem man das Verhalten von Trajektorien bei der Abbildung auf eine konjugierte Dynamik (zum Beispiel Zeitumkehr) untersucht.

Wir schreiben wie oben bereits erwähnt  $p[q(\tau), p(\tau)|q_0, p_0]$  für die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Trajektorie  $(q(\tau), p(\tau))$  realisiert wird, unter der Bedingung dass sich das Teilchen anfangs am Punkt  $(q_0, p_0)$  befindet. Für die in der Zeit rückwärts durchlaufene Trajektorie schreiben wir  $(\tilde{q}(\tau), \tilde{p}(\tau))$ . Wir definieren also

$$\tilde{q}(\tau) = q(t - \tau) \quad \text{und} \quad \tilde{p}(\tau) = -p(t - \tau), \quad (5.6)$$

wobei wir bei der Zeitumkehr auch das Vorzeichen von  $p$  umkehren müssen, sodass das Bild der Trajektorie im  $(q, p)$ -Raum tatsächlich an der  $q$ -Achse gespiegelt wird.<sup>2</sup>

Sei  $(q_t, p_t)$  der Endpunkt der Trajektorie  $(q(\tau), p(\tau))$  und  $\tilde{p}[\tilde{q}(\tau), \tilde{p}(\tau)|q_t, -p_t]$  das Pfadgewicht der Rückwärtstrajektorie. Man definiert nun die R-Größe als Kombination dieser Pfadgewichte mit einer Anfangswahrscheinlichkeitsverteilung  $\mathcal{P}_0(q, p)$  und deren Zeitevolution nach Gleichung (3.4),  $\mathcal{P}_t(q, p)$ :

$$R[q(\tau), p(\tau); \mathcal{P}_0] := k \ln \frac{p[q(\tau), p(\tau)|q_0, p_0] \mathcal{P}_0(q_0, p_0)}{\tilde{p}[\tilde{q}(\tau), \tilde{p}(\tau)|q_t, -p_t] \mathcal{P}_t(q_t, -p_t)}. \quad (5.7)$$

Diese Definition ordnet jeder Trajektorie einen Wert  $R$  zu.

<sup>1</sup> In dieser Arbeit wird durchgehend das Integrationskalkül von Stratonovich verwendet, wie in der statistischen Physik üblich.

<sup>2</sup> Es wäre auch möglich, die Umkehr des Vorzeichens wegzulassen, da für diese Rechnung nur irgendeine konjugierte Dynamik benötigt wird. Das heißt, die so berechnete R-Größe würde dann auch ein integrales Fluktuationstheorem erfüllen – diese R-Größe hätte aber nichts mit der Gesamtentropie zu tun.

Man sieht sehr leicht, dass diese R-Größe das integrale Fluktuationstheorem

$$\langle e^{-R/k} \rangle = 1 \quad (5.8)$$

erfüllt. Man kann diesen Mittelwert nämlich einfach berechnen:

$$\begin{aligned} \langle e^{-R/k} \rangle &= \int \frac{dq_0 dp_0}{2\pi\hbar} \mathcal{P}_0(q_0, p_0) \int D[q(\tau), p(\tau)] p[q(\tau), p(\tau)|q_0, p_0] e^{-R/k} \\ &= \int \frac{dq_t dp_t}{2\pi\hbar} \mathcal{P}_t(q_t, -p_t) \int D[\tilde{q}(\tau), \tilde{p}(\tau)] \tilde{p}[\tilde{q}(\tau), \tilde{p}(\tau)|q_t, -p_t] = 1. \end{aligned}$$

In dem Fall, dass die R-Größe immer reell ist, kann man mittels der Jensenschen Ungleichung direkt  $\langle R \rangle \geq 0$  folgern. Für die klassische Brownsche Bewegung ist  $\langle R \rangle$  gerade die gesamte Entropieproduktion im System [14], bzw.  $R$  ist die gesamte Entropieproduktion auf Trajektorienebene. Es ist also interessant zu berechnen, was die R-Größe in dem hier besprochenen quantalen Fall ist.

### Berechnung von $R$

Im Anhang A.5 ist die Berechnung der Pfadgewichte  $p[q(\tau), p(\tau)|q_0, p_0]$  dargestellt (siehe Gleichungen (A.28), (A.29)). Um  $\tilde{p}[\tilde{q}(\tau), \tilde{p}(\tau)|q_t, -p_t]$ , das Pfadgewicht der Rückwärtstrajektorie, zu berechnen, genügt es, innerhalb des Integrals in der Wirkung die Vorzeichen von  $\dot{q}$  und  $p$  umzukehren. Somit sind die meisten Summanden der Wirkungen  $\mathcal{A}[q(\tau), p(\tau)]$  und  $\tilde{\mathcal{A}}[\tilde{q}(\tau), \tilde{p}(\tau)]$  identisch:

$$\tilde{\mathcal{A}}[\tilde{q}(\tau), \tilde{p}(\tau)] - \mathcal{A}[q(\tau), p(\tau)] = \frac{1}{D(\mathcal{P})} \int_0^t \mu \dot{q} F_q + \frac{\mu}{m^2 \omega^2} \dot{p} F_p - \frac{\mu}{m} \underbrace{(F_q p - F_p q)}_0 d\tau.$$

Daraus kann man sofort den Quotienten der Pfadgewichte ablesen:

$$\ln \frac{p[q(\tau), p(\tau)|q_0, p_0]}{\tilde{p}[\tilde{q}(\tau), \tilde{p}(\tau)|q_t, p_t]} = \beta^{(\mathcal{P}, \text{eff})} \int_0^t \dot{q} F_q + \dot{p} F_p / (m\omega)^2 d\tau. \quad (5.9)$$

Analog zur oben erwähnten Definition der stochastischen Entropie  $s(x(t)) = -k \ln p_\tau(x(t))$  definieren wir

$$z(q(t), p(t)) := -k \ln \mathcal{P}_t(q(t), p(t)). \quad (5.10)$$

Dies kann man als Analogon zur  $Z$ -Größe aus Gleichung (4.40) verstehen, wobei  $z(q(t), p(t))$  aber für einzelne Trajektorien definiert ist, und  $Z_t$  nur für das gesamte Ensemble. Offenbar macht diese Definition insofern Sinn, dass  $\langle z \rangle = Z_t$  gilt. Mit dieser Definition können wir einen Ausdruck für  $R$  angeben, nämlich

$$R[q(\tau), p(\tau); \mathcal{P}_0] = \Delta z + k\beta^{(\mathcal{P}, \text{eff})} \int_0^t \dot{q} F_q + \dot{p} F_p / (m\omega)^2 d\tau, \quad (5.11)$$

wobei  $\Delta z = z(q(t), p(t)) - z(q(0), p(0))$  ist.

### Konditionierte Mittelwerte

Für eine Interpretation des Ergebnisses müssen wir zuerst noch den zweiten Term verstehen. Nach [14] erwarten wir, dass er die Entropieproduktion im Wärmebad auf Trajektorienebene angibt. Um dies zu verifizieren, müssen wir das Ensemblemittel davon berechnen und mit dem Ergebnis aus Abschnitt 4.1 vergleichen.

Das Ensemblemittel kann am besten in zwei Schritten berechnet werden: In einem ersten Schritt berechnen wir den konditionierten Mittelwert  $\langle \cdot | q, p, \tau \rangle$  über alle Trajektorien, die zum Zeitpunkt  $\tau$  am Punkt  $(q, p)$  sind. Das gesamte Mittel ist dann

$$\langle \cdot \rangle = \int \langle \cdot | q, p, \tau \rangle \cdot \mathcal{P}_\tau(q, p) \frac{dq dp}{2\pi\hbar}. \quad (5.12)$$

Demnach müssen wir als erstes die konditionierten Mittelwerte  $\langle \dot{q} \mid q, p, \tau \rangle$  und  $\langle \dot{p} \mid q, p, \tau \rangle$  berechnen. Das Ergebnis der Rechnung in Anhang A.6 ist

$$\langle \dot{q} \mid q, p, \tau \rangle \cdot \mathcal{P}_\tau(q, p) = j_q^{(\mathcal{P})} \quad \text{und} \quad \langle \dot{p} \mid q, p, \tau \rangle \cdot \mathcal{P}_\tau(q, p) = j_p^{(\mathcal{P})}. \quad (5.13)$$

Mit diesem Ergebnis und Gleichung (5.13) können wir nun das Mittel des Integranden in Gleichung (5.11) angeben, es ist

$$\langle \dot{q}F_q + \dot{p}F_p / (m\omega)^2 \rangle = \int \left( j_q^{(\mathcal{P},d)} F_q + \frac{j_p^{(\mathcal{P},d)} F_p}{m^2 \omega^2} \right) \frac{dqdp}{2\pi\hbar} + \frac{1}{m} \int \underbrace{(pF_q - qF_p)}_0 \mathcal{P}_\tau(q, p) \frac{dqdp}{2\pi\hbar},$$

dies ist gleich  $-\dot{E}_t^{(\text{sys})}$  (siehe Abschnitt 4.6 oder A.4). Aus Gleichung (5.11) folgt also

$$\langle R \rangle = \Delta Z - k\beta^{(\mathcal{P},\text{eff})} \Delta E^{(\text{sys})} =: \Delta Z + \Delta S^{(\text{med,eff})}, \quad (5.14)$$

dadurch motiviert können wir für den zweiten Term in Gleichung (5.11) auch  $\Delta S^{(\text{med,eff})}$  schreiben:

$$R[q(\tau), p(\tau); \mathcal{P}_0] = \Delta z + \Delta s^{(\text{med,eff})}. \quad (5.15)$$

### Interpretation

Nach unseren obigen Betrachtungen erfüllt dieses  $R$  ein integrales Fluktuationstheorem  $\langle e^{-R/k} \rangle = 1$ . In dem Fall, dass  $\mathcal{P}_0$  und  $\mathcal{P}_t$  nicht negativ sind, ist  $R$  reell und wie oben erwähnt die Ungleichung von Jensen anwendbar, es gilt also  $\langle R \rangle \geq 0$ . In diesem Fall ist  $\Delta Z = \Delta S^{(\mathcal{P})}$ , und somit ist in diesem Fall die Entropiedefinition  $S^{(\mathcal{P})}$  aus Gleichung (4.41) unter Verwendung der effektiven Badtemperatur  $\beta^{(\mathcal{P},\text{eff})} = \frac{\mu}{D^{(\mathcal{P})}}$ , die schon in Abschnitt 4.6 besprochen wurde, thermodynamisch konsistent. Das war aber bereits aus Gleichung (4.37) bekannt.

Auch wenn  $R$  nicht reell ist, gilt das integrale Fluktuationstheorem dennoch. Es ist nun wichtig zu bemerken, dass

$$\Delta z = \Delta s^{(\mathcal{P})} + \begin{cases} \pm i\pi & \text{Vorzeichen von } \mathcal{P} \text{ ändert sich} \\ 0 & \text{Sonst} \end{cases} \quad (5.16)$$

ist. Da  $e^{\mp i\pi} = -1$  ist, ist also

$$e^{-R/k} = e^{-\Delta z/k - \Delta s^{(\text{med,eff})}/k} \leq e^{-\Delta s^{(\mathcal{P})}/k - \Delta s^{(\text{med,eff})}/k}. \quad (5.17)$$

Wenn nun  $R$  tatsächlich nicht reell ist, gibt es Trajektorien, für die „<“ und nicht nur „≤“ gilt. Damit ist dann

$$\langle e^{-\Delta s^{(\mathcal{P})}/k - \Delta s^{(\text{med,eff})}/k} \rangle =: C > 1 = \langle e^{-R/k} \rangle \quad (5.18)$$

eine Konstante  $C$ , die größer als 1 ist. Da jetzt alle Größen reell sind, können wir auch hier die Ungleichung von Jensen anwenden, sie liefert aber nur

$$\Delta S^{(\mathcal{P})} + \Delta S^{(\text{med,eff})} \geq -k \ln C \quad (5.19)$$

und  $-\ln C$  ist kleiner als 0. Hier gibt es also die Möglichkeit, die thermodynamische Konsistenz zu verletzen – selbst mit effektiver Badtemperatur  $\beta^{(\mathcal{P},\text{eff})}$ .

# Kapitel 6

## Ausblick: Generalisierte kohärente Zustände

In dieser Arbeit wurde als Modellsystem ausschließlich der harmonische Oszillator betrachtet, da dessen kohärente Zustände besonders einfach sind. Der harmonische Oszillator ist zwar ein gutes Modell für viele Systeme, es gibt aber natürlich auch Systeme, die sich nicht auf harmonische Oszillatoren abbilden lassen.

Es ist aber möglich, das Konzept der kohärenten Zustände auf eine wesentlich größere Klasse von Systemen zu verallgemeinern. Die ersten Grundideen für die Konstruktion von generalisierten kohärenten Zuständen stammen von Klauder aus dem Jahr 1962 [52, 53]; 1972 veröffentlichten Perelomov [2] und Gilmore [54] unabhängig voneinander vollständige Konstruktionsvorschriften für generalisierte kohärente Zustände, die sich nur in Details unterscheiden.

In diesem Kapitel soll nur noch ein kurzer Überblick in das Thema gegeben werden, wobei mögliche Ansatzpunkte für weiterführende Arbeiten genannt werden. Die Zusammenfassung orientiert sich an dem Review [55] von Zhang, Feng und Gilmore und an dem Buch [18] von Perelomov.

### 6.1 Allgemeine Konstruktion

**Gruppentheoretische Betrachtung der kanonischen kohärenten Zustände.** Es hat sich gezeigt, dass der beste Ausgangspunkt für die Verallgemeinerung der kohärenten Zustände der Verschiebungsoperator  $D(\alpha)$  aus Abschnitt 2.2 ist. Dafür bemerken wir folgende gruppentheoretische Sichtweise dieser Definition: Die Operatoren  $\{1, a^\dagger, a, a^\dagger a\}$  bilden eine Basis einer Darstellung der Heisenberg-Weyl-Algebra  $h_4$  (die definiert ist durch genau die Kommutationsrelationen dieser vier Operatoren) auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ . Durch Exponentiation

$$\{\exp(i\varphi 1 + \alpha a^\dagger - \alpha^* a + i\delta a^\dagger a) \mid \alpha \in \mathbb{C}, \varphi, \delta \in \mathbb{R}\} \quad (6.1)$$

erhalten wir eine unitäre irreduzible Darstellung der Heisenberg-Weyl-Gruppe  $H_4$  (nach dem Theorem von Stone und von Neumann ist das bis auf unitäre Äquivalenz die einzige solche Darstellung auf separablen Hilberträumen).

Wir betrachten nun die Untergruppe  $K$  von  $H_4$ , deren Elemente bei der durch die obige Darstellung gegebenen Wirkung auf  $\mathcal{H}$  den Grundzustand  $|0\rangle$  nur um eine Phase ändern („maximale Isotropie-Untergruppe“). Die Darstellung von  $K$  ist offenbar

$$\{\exp(i\varphi 1 + i\delta a^\dagger a) \mid \varphi, \delta \in \mathbb{R}\} . \quad (6.2)$$

Die Menge der kohärenten Zustände ist der Orbit des Zustands  $|0\rangle$  unter der Wirkung des Quotienten  $H_4/K$ : Die Elemente dieses Quotienten werden durch den komplexen Parameter  $\alpha$  beschrieben, als Repräsentanten einer Nebenklasse wählen wir

$$D(\alpha) := \exp(\alpha a^\dagger - \alpha^* a) \quad (6.3)$$

(siehe Gleichung (2.8)).

**Allgemeine Konstruktion.** Für den Algorithmus zur Konstruktion generalisierter Zustände werden zusammengefasst folgende drei Bausteine benötigt:

1. Eine Lie-Gruppe  $G$  und ihre Lie-Algebra  $\mathfrak{g}$ . Für ein gegebenes physikalisches System wird diese üblicherweise wie folgt bestimmt: Man suche eine endliche Menge von Operatoren  $\{T_i\}$ , sodass der Hamiltonoperator  $H$  eine Linearkombination dieser Operatoren ist, und alle anderen interessanten Observablen auch durch diese ausgedrückt werden können. Zudem soll  $\text{span}\{T_i\}$  eine abgeschlossene Algebra sein<sup>1</sup>, d.h.  $[T_i, T_j] \in \text{span}\{T_i\}$  für alle Paare  $T_i, T_j$ .  $\text{span}\{T_i\}$  ist dann eine Darstellung der Lie-Algebra  $\mathfrak{g}$ , die Lie-Gruppe  $G$  erhält man durch Exponentiation.
2. Eine unitäre irreduzible Darstellung  $D$  der Lie-Gruppe auf einem Hilbertraum. Wenn die Lie-Gruppe wie oben aus einem physikalischen System konstruiert wird, hat man diese automatisch gegeben.
3. Ein Ausgangsvektor  $|\psi_0\rangle$ . Dieser ist prinzipiell beliebig, sollte aber für unsere Zwecke so gewählt werden, dass die resultierenden kohärenten Zustände möglichst nahe an den klassischen liegen, für Details siehe [18, Kap. 2.4] und [56].

Analog zu der Heisenberg-Weyl-Gruppe oben wird dann die maximale Isotropie-Untergruppe von  $G$  konstruiert,

$$K := \left\{ k \in G \mid D(k) |\psi_0\rangle = e^{i\varphi(k)} |\psi_0\rangle \ (\varphi(k) \in \mathbb{R}) \right\}. \quad (6.4)$$

Daraus ergibt sich der Quotientenraum  $G/K$ , für jede Nebenklasse  $\Omega \in G/K$  wählen wir einen Repräsentanten  $g(\Omega) \in G$  sodass  $\Omega = g(\Omega)K$ . Die generalisierten kohärenten Zustände der Gruppe  $G$  sind dann die Vektoren

$$|\Omega\rangle = D(g(\Omega)) |\psi_0\rangle. \quad (6.5)$$

**Eigenschaften.** Die Menge  $G/K$  kann immer geometrisch als Riemannsche Mannigfaltigkeit verstanden werden. Zudem kann man durch geeignete Wahl des Ausgangsvektors  $|\psi_0\rangle$  üblicherweise erreichen, dass die kohärenten Zustände eine minimale Unschärfe besitzen. Falls der Hamiltonoperator linear in den Generatoren der Lie-Algebra ist, sieht man drittens sofort, dass unter der unitären Dynamik (2.16) kohärente Zustände nur wieder in kohärente übergehen. Generalisierte kohärente Zustände geben uns also ein klassisches Bild des Systems, genau wie wir es beim harmonischen Oszillator gesehen haben.

Aufgrund der geometrischen Eigenschaften des Raums kann man immer ein translationsinvariantes Maß  $\mu$  auf  $G/K$  konstruieren, es gilt

$$\int_{G/K} |\Omega\rangle\langle\Omega| \, d\mu(\Omega) \propto 1, \quad (6.6)$$

die Menge der generalisierten kohärenten Zustände ist also übervollständig. Die Vollständigkeitsrelation (6.6) lässt sich in der Sprache der Gruppentheorie sehr elegant beweisen: Sei  $O$  das Integral in (6.6) und sei  $g \in G$ . Dann ist  $D(g) |\Omega\rangle = e^{i\varphi(g)} |\Omega'\rangle$ , also

$$\begin{aligned} D(g)O &= D(g)OD(g^{-1}g) = D(g)OD(g)^\dagger D(g) \\ &= \int_{G/K} (D(g) |\Omega\rangle) (\langle\Omega| D(g)^\dagger) \, d\mu(\Omega) D(g) \\ &= \int_{G/K} |\Omega'\rangle\langle\Omega'| \, d\mu(\Omega) D(g) = \int_{G/K} |\Omega'\rangle\langle\Omega'| \, d\mu(\Omega') D(g) = OD(g). \end{aligned}$$

Da die Darstellung  $D$  irreduzibel ist, ist nach dem Lemma von Schur [57, Theorem 6.1]  $O \propto 1$ .

<sup>1</sup>Diese Bedingung macht die Konstruktion in der Praxis häufig schwierig.

Schließlich kann man für jede Dichtematrix ein  $\mathcal{Q}$ -Symbol  $\mathcal{Q}(\Omega) := \langle \Omega | \rho | \Omega \rangle$  angeben; unter gewissen Voraussetzungen existiert außerdem ein  $\mathcal{P}$ -Symbol sodass  $\rho = \int_{G/K} \mathcal{P}(\Omega) |\Omega\rangle \langle \Omega| d\mu(\Omega)$ . Der allgemeine Beweis dafür funktioniert großteils analog zu dem Beweis in Anhang A.1.

Wir bemerken noch folgende weitere Eigenschaften, die die generalisierten kohärenten Zustände interessant machen: Wenn die Lindblad-Operatoren in der Lie-Algebra  $\mathfrak{g}$  enthalten sind, sind kohärente Zustände unter der Lindblad-Dynamik in einem gewissen Sinn maximal robust (für Details siehe [58]). Außerdem eignen sie sich zur Beschreibung von generalisierter Verschränkung [59].

## 6.2 Beispiel: Spinsysteme

Die folgenden Definitionen orientieren sich meist an [60], dort sind auch die Rechnungen zu finden. Auch [18] und [55] enthalten Abschnitte zu diesem Beispiel. Zu den Grundlagen siehe [20, Seite 85ff.].

Der Zustandsraum eines Systems mit Spin  $j$  ist ein  $(2j + 1)$ -dimensionalen Hilbertraum  $\mathcal{H}_j$ , aufgespannt von den Vektoren

$$|j, m = -j\rangle, \dots, |j, m = j - 1\rangle, |j, m = j\rangle. \quad (6.7)$$

Von Interesse sind die Drehimpulsoperatoren  $J_z$  und  $J_{\pm}$  mit

$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \quad \text{und} \quad (6.8)$$

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle. \quad (6.9)$$

Diese Operatoren bilden aufgrund ihrer Kommutationsrelationen auf  $\mathcal{H}_j$  eine irreduzible Darstellung der Drehimpulsalgebra  $\mathfrak{su}(2)$ , für die dynamische Gruppe  $G$  verwenden wir also  $SU(2)$ . Um die kohärenten Zustände zu konstruieren benötigen wir noch einen Anfangszustand, wir wählen  $|\psi_0\rangle = |j, j\rangle$ . Wir sehen, dass die maximale Isotropie-Untergruppe  $K_j$  aus folgenden Elementen besteht:

$$K_j = \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar j} \varphi J_z\right) \mid \varphi \in [0, 2\pi) \right\} \cong U(1). \quad (6.10)$$

Man kann zeigen, dass  $SU(2)/U(1)$  isomorph zur 2-Sphäre ist, die Elemente der Darstellung von  $SU(2)/U(1)$  sind

$$\left\{ \exp\left\{ \frac{\xi}{\hbar} J_+ - \frac{\xi^*}{\hbar} J_- \right\} \mid \xi = -\frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi}, \vartheta \in [0, \pi), \varphi \in [0, 2\pi) \right\}. \quad (6.11)$$

Folglich sind die  $SU(2)$  kohärenten Zustände

$$\boxed{|j, \vartheta, \varphi\rangle := \exp\left\{ \frac{\xi}{\hbar} J_+ - \frac{\xi^*}{\hbar} J_- \right\} |j, j\rangle}. \quad (6.12)$$

Berechnet man die Erwartungswerte des Operators  $\vec{J} := (J_x, J_y, J_z)^t$  (wobei  $J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$  und  $J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$  ist), erhält man:

$$\langle j, \vartheta, \varphi | \vec{J} | j, \vartheta, \varphi \rangle = \hbar j \begin{pmatrix} \sin(\vartheta) \cos(\varphi) \\ \sin(\vartheta) \sin(\varphi) \\ \cos(\vartheta) \end{pmatrix}. \quad (6.13)$$

Dadurch haben wir folgendes quasiklassisches Bild: Der kohärente Zustand  $|j, \vartheta, \varphi\rangle$  entspricht einem Drehimpuls, dessen Richtung in Kugelkoordinaten durch die Winkel  $\vartheta$  und  $\varphi$  angegeben wird, und dessen Betrag  $\hbar j$  ist.

Es gilt schließlich die Vollständigkeitsrelation

$$\boxed{\int_0^\pi d\vartheta \sin(\vartheta) \int_0^{2\pi} d\varphi |j, \vartheta, \varphi\rangle \langle j, \vartheta, \varphi| = \frac{4\pi}{2j+1}}, \quad (6.14)$$

und für eine gegebene Dichtematrix  $\rho$  ist es möglich, ein  $\mathcal{P}$ - und ein  $\mathcal{Q}$ -Symbol zu bestimmen (in diesem Fall ist das  $\mathcal{P}$ -Symbol sogar nicht singular). Damit ist es auch möglich, die Wehrl-Entropie

$$S^{(W)} := \frac{2j+1}{4\pi} \int_0^\pi d\vartheta \sin(\vartheta) \int_0^{2\pi} d\varphi \mathcal{Q}(\vartheta, \varphi) \cdot \ln \mathcal{Q}(\vartheta, \varphi) \quad (6.15)$$

zu definieren; wie bereits in Abschnitt 4.2.2 angemerkt wurde, minimieren reine kohärente Zustände auch in dieser Fall der Spinsysteme die Wehrl-Entropie [45].

### 6.3 Zukünftige Fragestellungen

Es wäre nun interessant zu sehen, ob die in dieser Arbeit gefundenen Ergebnisse auf weitere Systeme verallgemeinert werden können: Es steht zu vermuten, dass die Wehrl-Entropie auch für andere Systeme thermodynamisch inkonsistent ist. Kann man aber möglicherweise auch für andere Systeme eine effektive Badtemperatur einführen? Falls ja, ist diese dieselbe wie für den harmonischen Oszillator (Gleichung (4.38))? Oder gibt es zumindest einen allgemeinen Zusammenhang zwischen den verschiedenen effektiven Badtemperaturen?

Vermutlich wäre es hilfreich, zunächst noch ein weiteres Modellsystem zu betrachten. Das einfachste mögliche ist ein Zwei-Niveau-System, welches durch die im letzten Abschnitt dargestellte Prozedur mit  $j = \frac{1}{2}$  und einem Hamiltonoperator  $H = \omega J_z$  beschrieben werden kann.<sup>2</sup> Die dissipative Dynamik eines solchen Systems kann durch folgende Lindblad-Gleichung beschrieben werden [29, Gl. 3.219]:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_t = & \frac{\gamma N}{2\hbar^2} (2J_+ \rho_t J_- - J_- J_+ \rho_t - \rho_t J_- J_+) \\ & + \frac{\gamma(N+1)}{2\hbar^2} (2J_- \rho_t J_+ - J_+ J_- \rho_t - \rho_t J_+ J_-) . \end{aligned} \quad (6.16)$$

Analog zu der Rechnung in Abschnitt 3.1 kann man in Ausdrücken wie  $J_+ |\frac{1}{2}, \vartheta, \varphi\rangle \langle \frac{1}{2}, \vartheta, \varphi|$  den Operator  $J_+$  durch eine Kombination von Differentialoperatoren ersetzen und so eine Differentialgleichung für das  $\mathcal{P}$ - und das  $\mathcal{Q}$ -Symbol erhalten [62]. Diese ist zwar komplizierter als Gleichung (3.3), aber immer noch vom Fokker-Planck-Typ. Um die thermodynamische Konsistenz der Wehrl-Entropie zu untersuchen, müsste man mit dieser Gleichung dann die Änderung der Wehrl-Entropie berechnen.

---

<sup>2</sup> Dieses System wurde bereits 2011 in einer Bachelorarbeit von Kleinbach untersucht, allerdings mit einer anderen Entropiedefinition aus einer Beschreibung des Systems mit Sprung-Trajektorien [61]. Hierbei zeigte sich auch eine Inkonsistenz der Entropiedefinition, außer bei einer starken Einschränkung der erlaubten Anfangsbedingungen.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung

Das Ziel dieser Bachelorarbeit war es, mit Hilfe von kohärenten Zuständen eine quasiklassische Beschreibung von offenen Quantensystemen zu erhalten. Diese sollte dann genutzt werden, um thermodynamische Eigenschaften der Systeme zu untersuchen. Dazu haben wir als exemplarisches Modell einen harmonischen Oszillator betrachtet, der in Kontakt mit einem Wärmebad steht.

Zu Beginn der Arbeit haben wir noch einmal diejenigen Eigenschaften der kohärenten Zustände des harmonischen Oszillators rekapituliert, die sie so nützlich für eine quasiklassische Beschreibung machen: Sie besitzen eine minimale Unschärfe, sodass sie einem klassischen Teilchen, welches an einem Punkt des Phasenraums lokalisiert ist, möglichst nahe kommen. Die Bewegung dieses Punktes im Phasenraum ist außerdem identisch zu der Phasenraumtrajektorie eines klassischen Teilchens im harmonischen Oszillator.

Der Zustand eines offenen Quantensystems wird üblicherweise durch eine Dichtematrix beschrieben. Es zeigte sich, dass die kohärenten Zustände eine exzellente quasiklassische Anschauung von Dichtematrizen liefern: Analog zu einem klassischen Ensemble von Teilchen kann eine beliebige Dichtematrix durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mathcal{Q}(q, p)$  im Phasenraum beschrieben werden, diese Zuordnung ist eindeutig. Zudem haben wir bewiesen, dass jede Dichtematrix als Linearkombination von Projektoren auf reine kohärente Zustände geschrieben werden kann. Die Koeffizienten dieser Linearkombination definieren das  $\mathcal{P}$ -Symbol. Es handelt sich hierbei um eine Pseudo-Wahrscheinlichkeitsverteilung, die zwar normiert ist, aber negativ werden kann.

Wir haben den harmonischen Oszillator dann in Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur  $T$  betrachtet. Um den Einfluss des Wärmebads auf die Dynamik des harmonischen Oszillators zu beschreiben, wurde die häufig verwendete Lindblad-Gleichung genutzt. Dabei zeigt sich, dass man diese Dynamik in Differentialgleichungen vom Fokker-Planck-Typ für die (Pseudo-)Wahrscheinlichkeitsverteilungen  $\mathcal{Q}$  und  $\mathcal{P}$  übersetzen kann. Das heißt, das offene Quantensystem kann ohne Näherungen auf eine klassische Wahrscheinlichkeitsverteilung, die einer klassischen dissipativen Dynamik unterworfen ist, abgebildet werden.

Um ein Gefühl für diese klassische Dynamik zu vermitteln, haben wir die Zeitabhängigkeit des  $\mathcal{P}$ -Symbols einiger typischer Beispiele explizit berechnet. In den Abbildungen 3.1 bis 3.3 wurden die Ergebnisse dieser Rechnungen grafisch dargestellt.

Der Hauptaspekt dieser Arbeit war es nun, die Informationsentropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mathcal{Q}$ , die sogenannte Wehrl-Entropie  $S^{(W)}$ , zu untersuchen. Dabei haben wir zunächst festgestellt, dass das Quantensystem im klassischen Grenzwert  $\hbar \rightarrow 0$  auf ein klassisches System abgebildet wird. Wird dieser Grenzwert „vorsichtig“ ausgeführt (siehe Abschnitt 4.2.4), geht die Wehrl-Entropie dabei in eine klassische Entropie  $S^{(cl)}$  über. Diese klassische Entropie ist thermodynamisch konsistent.

Darunter ist hier Folgendes zu verstehen: Für alle Zeiten  $t \geq 0$  gilt

$$\left( \dot{S}_t^{(cl)} + \dot{S}_t^{(med)} \right) \geq 0,$$

wobei  $S_t^{(med)}$  die Entropie des Wärmebades ist. Das heißt, es gilt der zweite Hauptsatz der Thermodynamik.

Bei einer voll quantenmechanischer Rechnung haben wir aber gesehen, dass in bestimmten Fällen eine Verletzung des zweiten Hauptsatzes möglich ist, also dass  $\left(\dot{S}_t^{(W)} + \dot{S}_t^{(\text{med})}\right)$  negativ wird. Dafür gibt es zwei mögliche Erklärungen:

Die eine ist, dass die Wehrl-Entropie eben thermodynamisch inkonsistent ist. Das könnte darin begründet sein, dass man im quantenmechanischen Phasenraum generell keine Entropien von Wahrscheinlichkeitsverteilungen definieren sollte, da nach der Unschärferelation von Heisenberg die grundlegenden Ereignisse des Wahrscheinlichkeitsraums („Teilchen befindet sich am Ort  $(q, p)$ “) nicht unabhängig sind.

Auch möglich wäre es aber, dass wir die Entropieproduktion im Wärmebad falsch identifiziert haben: Wenn wir dem Wärmebad eine bestimmte effektive Temperatur  $T^{(\text{eff})}$  (siehe Gleichungen (4.38) und (4.39)) geben, dann haben wir gesehen, dass die Wehrl-Entropie dadurch thermodynamisch konsistent wird (d.h.  $\left(\dot{S}_t^{(W)} + \dot{S}_t^{(\text{med,eff})}\right) \geq 0$ ). Diese effektive Temperatur  $T^{(\text{eff})}$  ist immer größer als die tatsächliche Temperatur  $T$ , die Temperaturen sind nur im Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  asymptotisch gleich.

Wir haben zudem untersucht, was bei dem Versuch passiert, für die Definition der Wehrl-Entropie das  $\mathcal{P}$ -Symbol anstelle des  $\mathcal{Q}$ -Symbols zu verwenden. Es hat sich gezeigt, dass es dann möglich ist, das Quantensystem mit Hilfe von stochastischer Thermodynamik zu untersuchen. Die stochastische Thermodynamik versucht, thermodynamische Größen nicht nur auf Ensembleebene sondern auch für einzelne Realisierungen zu definieren. Im ihrem Rahmen ist es beispielsweise für kolloidale Systeme möglich, den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik durch ein sogenanntes integrales Fluktuationstheorem zu präzisieren.

Das Ergebnis der Untersuchung an dem harmonischen Oszillator im Wärmebad war, dass es auch hier die Möglichkeit gibt, ein solches integrales Fluktuationstheorem aufzustellen. In dem Fall, dass  $\mathcal{P}$  nicht negativ ist, folgt aus diesem Fluktuationstheorem, dass auch diese Entropie-Definition durch eine andere effektive Badtemperatur  $T^{(\mathcal{P},\text{eff})}$  (siehe Gleichungen (4.45) und (4.46)) thermodynamisch konsistent wird. Diese neue effektive Badtemperatur  $T^{(\mathcal{P},\text{eff})}$  ist immer kleiner als die tatsächliche Temperatur  $T$ , für  $\hbar \rightarrow 0$  sind aber auch diese Temperaturen asymptotisch gleich.

Falls  $\mathcal{P}$  aber partiell negativ ist, garantiert nicht einmal mehr eine effektive Badtemperatur die thermodynamische Konsistenz. Wir schließen also, dass es eher ungünstig ist, eine solche Definition für die Systementropie zu verwenden.

Schließlich stellte sich die Frage, ob sich die am harmonischen Oszillator gefundenen Ergebnisse auf weitere offene Quantensysteme verallgemeinern lassen. Wir haben gesehen, dass das Konzept der generalisierten kohärenten Zustände von Perelomov und Gilmore dabei helfen könnte, eine größere Klasse von Systemen zu untersuchen. Ob es auch für andere offene Quantensysteme eine Verletzung des zweiten Hauptsatzes und eine effektive Badtemperatur gibt, bleibt aber als spannende Frage für zukünftige Arbeiten offen.

# Anhang A

## Rechnungen und Beweise

### A.1 Existenz eines $\mathcal{P}$ -Symbols

Um ein Kriterium angeben zu können, wann  $\mathcal{P}$  in welchem Sinn existiert, betrachten wir die Funktion

$$f_{\text{crit}}(\beta, \beta^*) := e^{|\beta|^2} \tilde{Q}(\beta, \beta^*), \quad (\text{A.1})$$

wobei  $\tilde{Q}(\beta, \beta^*) := \mathcal{F}_{\alpha \rightarrow \beta}[Q(\alpha, \alpha^*)](\beta, \beta^*)$  die in Gleichung (B.1) definierte Fouriertransformation des  $Q$ -Symbols bezeichnet. Es ist möglich,  $Q$  zu fouriertransformieren, da nach Gleichung (2.27)  $Q \in L^1(\mathbb{R}^2)$  ist.

**Satz A.1.** *Sei  $\rho$  ein Operator der Spurklasse (der nicht zwingend positiv definit, also nicht zwingend eine Dichtematrix sein muss<sup>1</sup>).*

(a) *Auch wenn  $\rho$  keine Dichtematrix ist, ist  $Q$  (definiert nach Gleichung (2.26)) in  $L^1(\mathbb{R}^2)$  und somit sind  $\tilde{Q}$  und  $f_{\text{crit}}$  definiert.*

(b) *Falls  $f_{\text{crit}} \in L^2(\mathbb{R}^2)$  ist, existiert ein  $\mathcal{P}$ -Symbol  $\mathcal{P} \in L^2(\mathbb{R}^2)$  mit*

$$\rho = \int \mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) |\alpha\rangle\langle\alpha| \frac{d^2\alpha}{\pi}$$

(siehe Gleichung (2.28)).

$\mathcal{P}$  kann explizit berechnet werden als inverse Fouriertransformation von  $f_{\text{crit}}$  (wie in Gleichung (B.2) definiert), das heißt

$$\mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) = \int e^{\beta\alpha^* - \beta^*\alpha} f_{\text{crit}}(\beta, \beta^*) \frac{d^2\beta}{\pi}. \quad (\text{A.2})$$

(c) *Ohne Einschränkungen an  $f_{\text{crit}}$  gibt es eine Folge von Funktionen  $\mathcal{P}_k \in L^2(\mathbb{R}^2)$  ( $k \in \mathbb{N}$ ) sodass*

$$\rho = \lim_{k \rightarrow \infty} \int \mathcal{P}_k(\alpha, \alpha^*) |\alpha\rangle\langle\alpha| \frac{d^2\alpha}{\pi}. \quad (\text{A.3})$$

*Hier wird nur gezeigt werden, dass dies im Sinne der schwachen Operatorkonvergenz gilt. Die Aussage bleibt aber wahr für Konvergenz bezüglich der Supremumsnorm und sogar bezüglich der Hilbert-Schmidt-Norm [6].*

*Für noch stärkere Aussagen muss nun erlaubt werden, dass  $\mathcal{P}$  eine Distribution ist. Zur Definition der verwendeten Räume siehe Abschnitt B.2.*

(d) *Ohne Einschränkungen an  $f_{\text{crit}}$  gibt es ein  $\mathcal{P} \in E'$ , das Gleichung (2.28) erfüllt. Dieses ist wiederum die inverse Fouriertransformierte von  $f_{\text{crit}} \in E'$ .*

---

<sup>1</sup> In dieser Arbeit wird die Aussage zwar nur noch für Operatoren  $\rho$  benötigt, die Dichtematrizen sind. Die allgemeinere Aussage erschwert den Beweis aber nicht wesentlich, und zeigt – wie auch die Berechnung der Spur nach Gleichung (2.23) – die allgemeinere Verwendbarkeit des hier vorgestellten Formalismus.

Gleichung (2.28) muss dann symbolisch verstanden werden: Die Matrixelemente des Operators auf der rechten Seite in Anzahlzuständen  $|n\rangle, |m\rangle$  sind durch die Anwendung der Distribution  $\mathcal{P}$  auf die Funktion  $(\alpha_1, \alpha_2) \mapsto \langle n | \alpha \rangle \langle \alpha | m \rangle$  gegeben. Diese Funktion ist wegen Gleichung (2.11b) Element von  $E$ .

(e) Falls  $f_{\text{crit}}$  durch ein Polynom beschränkt ist, ist  $f_{\text{crit}} \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$  und damit auch  $\mathcal{P} \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$ .

Der im Folgenden vorgestellte Beweis dieses Satzes orientiert sich an dem Beweis von Klauder, McKenna und Currie in [6]. Das nächste Lemma A.2 enthält das Ergebnis einer Rechnung, die dort im Anhang A durchgeführt wird und hier nicht wiederholt werden muss.

**Lemma A.2.** Sei  $|\gamma\rangle$  ein kohärenter Zustand und  $|\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$  beliebig. Dann ist

$$\mathcal{F}_{\gamma \rightarrow \beta}[\langle \gamma | \psi \rangle \langle \chi | \gamma \rangle](\beta, \beta^*) = \langle 0 | D(\beta) | 0 \rangle \langle \chi | D(\beta^*) | \psi \rangle . \quad (\text{A.4})$$

Für diese Matrixelemente gilt außerdem noch die Formel

$$\int \langle \chi_1 | D(\beta^*) | \psi_1 \rangle \cdot \langle \psi_2 | D(-\beta^*) | \chi_2 \rangle \frac{d^2 \beta}{\pi} = \langle \chi_1 | \chi_2 \rangle \cdot \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle . \quad (\text{A.5})$$

### Aussage (a).

*Beweis.* Wie in (2.22) kann  $\rho$  als Schmidt-Reihe  $\sum_{j=1}^{\infty} \rho_j |\psi_j\rangle \langle \chi_j|$  geschrieben werden. Setzt man das in die Definition (2.26) von  $\mathcal{Q}$  ein, sieht man

$$\mathcal{Q}(\gamma, \gamma^*) = \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \langle \gamma | \psi_j \rangle \langle \chi_j | \gamma \rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \psi_j(\gamma, \gamma^*) \chi_j^*(\gamma, \gamma^*) , \quad (\text{A.6})$$

wobei wie immer  $\psi(\gamma, \gamma^*) = \langle \gamma | \psi \rangle$  ist.

Nach Gleichung (2.21) sind die Funktionen  $\psi_j(\cdot, \cdot)$  und  $\chi_j(\cdot, \cdot)$   $L^2(\mathbb{R}^2)$ -integrierbar mit Norm 1, demnach können die Terme in der Reihe mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung abgeschätzt werden:

$$\|\mathcal{Q}\|_{L^1(\mathbb{R}^2)} \leq \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \|\psi_j(\cdot, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \|\chi_j(\cdot, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j < \infty . \quad \square$$

### Nebenrechnung.

Zunächst soll  $\tilde{\mathcal{Q}}(\beta, \beta^*) = \mathcal{F}_{\gamma \rightarrow \beta}[\mathcal{Q}(\gamma, \gamma^*)](\beta, \beta^*)$  berechnet werden. Der Beweis von Aussage (a) hat gezeigt, dass in Gleichung (A.6) die Reihe der  $L^1(\mathbb{R}^2)$ -Normen der Summanden absolut konvergiert. Nach dem Satz über die majorisierte Konvergenz [22, Thm. I.16] kann man also die Integrale der Fouriertransformation mit den Reihen vertauschen.

Verwendet man Lemma A.2 für die einzelnen Summanden ergibt sich

$$\tilde{\mathcal{Q}}(\beta, \beta^*) = \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \mathcal{F}_{\gamma \rightarrow \beta}[\langle \gamma | \psi_j \rangle \langle \chi_j | \gamma \rangle](\beta, \beta^*) = \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \underbrace{\langle 0 | D(\beta) | 0 \rangle}_{\exp(-|\beta|^2/2)} \langle \chi_j | D(\beta^*) | \psi_j \rangle$$

und folglich ist

$$f_{\text{crit}}(\beta, \beta^*) = e^{|\beta|^2/2} \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \langle \chi_j | D(\beta^*) | \psi_j \rangle . \quad (\text{A.7})$$

**Aussage (b).**

*Beweis.* Nach Voraussetzung kann  $\mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) \in L^2(\mathbb{R}^2)$  definiert werden und es muss gezeigt werden, dass  $\int \mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) \langle n | \alpha \rangle \langle \alpha | m \rangle \frac{d^2\alpha}{\pi} = \langle n | \rho | m \rangle$  ist. Der Satz von Parseval (Gleichung (B.4)) besagt

$$\int \mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) \cdot [\langle m | \alpha \rangle \langle \alpha | n \rangle]^* \frac{d^2\alpha}{\pi} = \int f_{\text{crit}}(\beta, \beta^*) \cdot \mathcal{F}_{\alpha \rightarrow \beta}[\langle \alpha | n \rangle \langle m | \alpha \rangle](\beta, \beta^*)^* \frac{d^2\beta}{\pi} \quad (\text{A.8})$$

$$= \int \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \langle \chi_j | D(\beta^*) | \psi_j \rangle \langle n | D(-\beta^*) | m \rangle \frac{d^2\beta}{\pi}. \quad (\text{A.9})$$

In der zweiten Zeile wurden Gleichungen (A.7) und (A.4) ausgenutzt.

Da  $D(\alpha)$  unitär ist, ist offenbar  $|\langle \chi_j | D(\beta^*) | \psi_j \rangle| \leq 1$ . Zudem kann man sich leicht davon überzeugen, dass  $\int |\langle n | D(-\beta^*) | m \rangle| \frac{d^2\beta}{\pi}$  endlich ist. Somit konvergiert in (A.9) die Reihe über die  $L^1(\mathbb{R}^2)$ -Normen und kann mit den Integralen vertauscht werden. Wegen Gleichung (A.5) haben wir dann aber

$$\int \mathcal{P}(\alpha, \alpha^*) \cdot \langle n | \alpha \rangle \langle \alpha | m \rangle \frac{d^2\alpha}{\pi} = \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \langle n | \psi_j \rangle \langle \chi_j | m \rangle = \langle n | \rho | m \rangle. \quad \square$$

**Aussage (c).**

*Beweis.* Sei  $\Omega_k = \{(\beta_1, \beta_2) \in \mathbb{R}^2 \mid |\beta_1| < k, |\beta_2| < k\}$  das Quadrat mit Kantenlänge  $2k$ . Definiere dann einfach

$$\tilde{\mathcal{P}}_k(\beta, \beta^*) = f_{\text{crit}}(\beta, \beta^*) \cdot 1_{\Omega_k}, \quad (\text{A.10})$$

wobei  $1_{\Omega_k} = 1$  genau dann wenn  $\beta \in \Omega_k$ .

Als kompakt getragene stetige Funktionen sind die  $\tilde{\mathcal{P}}_k$  sicherlich  $L^2(\mathbb{R}^2)$ -integrierbar, demnach gibt es jeweils eine inverse Fouriertransformierte  $\mathcal{P}_k$ . Analog zum Beweis von Aussage (b) ist

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \int \mathcal{P}_k(\alpha, \alpha^*) \cdot \langle n | \alpha \rangle \langle \alpha | m \rangle \frac{d^2\alpha}{\pi} &= \lim_{k \rightarrow \infty} \int_{\Omega_k} \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \langle \chi_j | D(\beta^*) | \psi_j \rangle \langle n | D(-\beta^*) | m \rangle \frac{d^2\beta}{\pi} \\ &= \int \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \langle \chi_j | D(\beta^*) | \psi_j \rangle \langle n | D(-\beta^*) | m \rangle \frac{d^2\beta}{\pi} \\ &= \langle n | \rho | m \rangle, \end{aligned}$$

wobei die Ausführung des Grenzwertes durch den Satz von der majorisierten Konvergenz möglich gemacht wird.  $\square$

**Aussage (d).**

*Beweis.* Da Gleichung (A.8) nach Definition der Fouriertransformation für Distributionen (B.8) weiterhin gilt und der restliche Beweis ohnehin wortwörtlich übernommen werden kann, ist nur zu zeigen, dass das so definierte  $\mathcal{P}$  ein Element von  $E'$  ist. Dafür muss nach Definition gezeigt werden, dass  $f_{\text{crit}} \in E'$  ist, also dass das Integral  $\int f_{\text{crit}}(\beta, \beta^*) \cdot e^{-|\beta - \beta'|^2} z(\beta, \beta^*) \frac{d^2\beta}{\pi}$  für jedes Polynom  $z(\beta, \beta^*)$  und jedes  $\beta' \in \mathbb{C}$  existiert.

Nach Gleichung (A.7) ist

$$f_{\text{crit}}(\beta, \beta^*) e^{-|\beta|^2} z(\beta, \beta^*) = e^{|\beta|^2/2 - |\beta - \beta'|^2} z(\beta, \beta^*) \cdot \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j \langle \chi_j | D(\beta^*) | \psi_j \rangle.$$

Die Summe ist bezüglich  $\beta$  gleichmäßig beschränkt (da  $|\langle \chi_j | D(\beta^*) | \psi_j \rangle| \leq 1$  ist, siehe oben) und damit ist diese Funktion integrierbar.  $\square$

## A.2 Zeitentwicklung von $\mathcal{P}^{(\text{sup})}$

Betrachte wieder das  $\mathcal{P}$ -Symbol aus Beispiel 5 (Abschnitt 2.4). Es lautet

$$\mathcal{P}_0^{(2)}(\beta, \beta^*) = 2\pi e^{|\beta|^2 - \frac{1}{2}(|\alpha'|^2 + |\beta'|^2)} \cdot \cos\left(\frac{\alpha'_2 - \beta'_2}{2} \partial_{\beta_1} - \frac{\alpha'_1 - \beta'_1}{2} \partial_{\beta_2}\right) \delta^{(2)}(\beta - \gamma')$$

(siehe Gleichung (2.53)). Davon soll nun die Zeitentwicklung nach Gleichungen (3.11) und (3.9) berechnet werden, d.h.

$$\mathcal{P}_t^{(2)}(\alpha, \alpha^*) = \mathcal{N}_t \int \mathcal{P}_0^{(2)}(\beta, \beta^*) \cdot \exp\left[-\frac{|\alpha - \beta e^{-i\omega t - \gamma t/2}|^2}{\Delta\alpha_t}\right] \frac{d^2\beta}{\pi}.$$

**Integration.** Die Ableitungen werden partiell integriert. Da  $\cos(\partial_1 - \partial_2) = \cos(\partial_1)\cos(\partial_2) - \sin(\partial_1)\sin(\partial_2)$  gilt, sieht man, dass durch das partielle Integrieren kein Vorzeichen geändert wird. Somit kann das Integral ausgeführt werden. Fasst man sämtliche Vorfaktoren zur Konstanten

$$\mathcal{C}_t := 2\mathcal{N}_t e^{-\frac{1}{2}(|A|^2 + |B|^2)} \quad (\text{A.11})$$

zusammen und definiert außerdem die auftretende Exponentialfunktion als

$$\mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \beta, \beta^*) := \exp\left(|\beta|^2 - \frac{|\alpha - \beta \cdot e^{-i\omega t - \frac{\gamma}{2}t}|^2}{\Delta\alpha_t}\right), \quad (\text{A.12})$$

so ist das Ergebnis der Integration

$$\mathcal{P}_t^{(2)}(\alpha, \alpha^*) = \mathcal{C}_t \cdot \cos\left(\frac{\alpha'_2 - \beta'_2}{2} \partial_{\beta_1} - \frac{\alpha'_1 - \beta'_1}{2} \partial_{\beta_2}\right) \mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \beta, \beta^*) \Big|_{\beta=\gamma'}.$$

Definiert man (wie auch in Abschnitt 3.4 erwähnt)  $\kappa := -i\frac{\alpha' - \beta'}{2}$ , kann man den Cosinus einfacher schreiben als  $\cos(\kappa\partial_\beta + \kappa^*\partial_{\beta^*})$ .

**Berechnung der Ableitungen.** Nun muss dieser Cosinus in Reihendarstellung ausgeschrieben werden:

$$\mathcal{P}_t^{(2)}(\alpha, \alpha^*) = \mathcal{C}_t \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \sum_{\ell=0}^{2k} \binom{2k}{\ell} \kappa^\ell (\kappa^*)^{2k-\ell} \underbrace{\partial_\beta^\ell (\partial_{\beta^*})^{2k-\ell} \mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \beta, \beta^*)}_{*} \Big|_{\beta=\gamma'}.$$

Um den \*-Term zu berechnen, werden weitere Definitionen eingeführt. Seien

$$\begin{aligned} f_t(\alpha^*; \beta^*) &:= \beta^* + \frac{e^{-i\omega t - \frac{\gamma}{2}t} (\alpha^* - \beta^* \cdot e^{+i\omega t - \frac{\gamma}{2}t})}{\Delta\alpha_t} \quad \text{und} \\ f_t^*(\alpha; \beta) &:= \beta + \frac{e^{i\omega t - \frac{\gamma}{2}t} (\alpha - \beta \cdot e^{-i\omega t - \frac{\gamma}{2}t})}{\Delta\alpha_t}, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

denn dann ist  $\partial_\beta \mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \beta, \beta^*) = f_t(\alpha^*; \beta^*) \cdot \mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \beta, \beta^*)$  und  $\partial_{\beta^*} \mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \beta, \beta^*) = f_t^*(\alpha; \beta) \cdot \mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \beta, \beta^*)$ . Somit ist

$$\begin{aligned} * &= \partial_\beta^\ell [f_t^*(\alpha; \beta)^{2k-\ell} \cdot \mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \beta, \beta^*)] \\ &= \sum_{m=0}^{\ell} \binom{\ell}{m} \partial_\beta^m f_t^*(\alpha; \beta)^{2k-\ell} \cdot f_t(\alpha^*, \beta^*)^{\ell-m} \mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \beta, \beta^*). \end{aligned}$$

Mit der letzten Definition

$$g_t = 1 - \frac{e^{-\gamma t}}{\Delta\alpha_t} \quad (\text{A.14})$$

ist  $\partial_\beta^m f_t^*(\alpha; \beta)^{2k-\ell} = \frac{(2k-\ell)!}{(2k-\ell-m)!} \cdot g_t^m \cdot f_t^*(\alpha; \beta)^{2k-\ell-m}$  für  $m \leq 2k-\ell$ . Da alle Ableitungen ausgeführt sind, wird nun  $\beta = \gamma'$  gesetzt. Dann ist

$$\mathcal{P}_t^{(2)} = \mathcal{C}_t \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \sum_{\ell=0}^{2k} \binom{2k}{\ell} \kappa^\ell(\kappa^*)^{2k-\ell} \sum_{m=0}^{\min\{\ell, 2k-\ell\}} \binom{\ell}{m} \frac{(2k-\ell)!}{(2k-\ell-m)!} \cdot g_t^m \cdot (f_t^*)^{2k-\ell-m} \cdot f_t^{\ell-m} \cdot \mathcal{G}_t.$$

**Ergebnis.** Durch geschickte Änderungen der Summationsreihenfolgen ist es möglich, all diese Summen explizit zu berechnen. Das Ergebnis lautet

$$\mathcal{P}_t^{(2)}(\alpha, \alpha^*) = \mathcal{C}_t \cdot e^{-|\kappa|^2 g_t} \cdot \cos[\kappa f_t(\alpha^*, (\gamma')^*) + \kappa^* f_t^*(\alpha, \gamma')] \cdot \mathcal{G}_t(\alpha, \alpha^*; \gamma', (\gamma')^*). \quad (\text{A.15})$$

### A.3 Limes von Wehrl- und von-Neumann-Entropie

Wir wollen zeigen, dass Wehrl- und von-Neumann-Entropie im Grenzwert  $\hbar \rightarrow 0$  asymptotisch gleich sind.<sup>2</sup> Der Beweis beruht auf den folgenden zwei Lemmata:

**Lemma A.3.** Seien  $A^{(1)}, A^{(2)}, \dots, A^{(n)}$  Operatoren mit wohldefinierten Grenzwerten  $\lim_{\hbar \rightarrow 0} A^{(k)}$  und sei  $\mathcal{Q}^{(k)}(q, p) := \langle q, p | A^{(k)} | q, p \rangle$ . Dann gilt

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle q, p | A_1 A_2 \cdots A_n | q, p \rangle = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \mathcal{Q}^{(1)}(q, p) \cdot \mathcal{Q}^{(2)}(q, p) \cdots \mathcal{Q}^{(n)}(q, p). \quad (\text{A.16})$$

*Beweis (nach [63]).* Sei oBdA  $n = 2$ . Es gilt

$$\begin{aligned} \langle q, p | A^{(1)} A^{(2)} | q, p \rangle &= \int \langle q, p | A^{(1)} | q', p' \rangle \langle q', p' | A^{(2)} | q, p \rangle \frac{dq dp}{2\pi\hbar} \\ &= \int \frac{\langle q, p | A^{(1)} | q', p' \rangle}{\langle q, p | q', p' \rangle} \cdot \frac{\langle q', p' | A^{(2)} | q, p \rangle}{\langle q', p' | q, p \rangle} \cdot \frac{|\langle q, p | q', p' \rangle|^2}{2\pi\hbar} dq dp. \end{aligned}$$

Das Matrixelement  $\langle q, p | q', p' \rangle$  ist aus Gleichung (2.19) bekannt, der Ausdruck  $\frac{|\langle q, p | q', p' \rangle|^2}{2\pi\hbar}$  ist bekanntlich für  $\hbar \rightarrow 0$  eine Dirac-Folge. Demnach kann das Integral im Grenzwert  $\hbar \rightarrow 0$  leicht gelöst werden:

$$\begin{aligned} \lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle q, p | A^{(1)} A^{(2)} | q, p \rangle &= \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\langle q, p | A^{(1)} | q, p \rangle}{\langle q, p | q, p \rangle} \cdot \frac{\langle q, p | A^{(2)} | q, p \rangle}{\langle q, p | q, p \rangle} \\ &= \lim_{\hbar \rightarrow 0} \mathcal{Q}^{(1)}(q, p) \cdot \mathcal{Q}^{(2)}(q, p). \quad \square \end{aligned}$$

**Lemma A.4.** Sei  $\rho$  eine Dichtematrix. Dann ist

$$|\langle \alpha | \rho(\rho - 1)^k | \alpha \rangle| \leq \frac{1}{k}. \quad (\text{A.17})$$

*Beweis.* Seien  $E$  das Spektralmaß zu  $\rho$  und  $\mu_\alpha = \langle \alpha | E | \alpha \rangle$  das zugehörige reelle Maß. Aufgrund der Eigenschaften von  $\rho$  sind beide nur auf  $[0, 1]$  getragen. Nach dem Funktionalkalkül ist

$$\left| \langle \alpha | \rho(\rho - 1)^k | \alpha \rangle \right|^2 = \int_{[0,1]} x^2 (x - 1)^{2k} d\mu_\alpha.$$

Eine einfache Rechnung zeigt, dass die Funktion  $x \mapsto x^2(x - 1)^{2k}$  auf  $[0, 1]$  ihr Maximum bei  $x_0 = \frac{1}{k}$  annimmt, deshalb ist

$$\left| \langle \alpha | \rho(\rho - 1)^k | \alpha \rangle \right|^2 \leq \underbrace{\frac{1}{k^2}}_{\leq 1} \underbrace{\left( \frac{1-k}{k} \right)^{2k} \int_{[0,1]} 1 d\mu_\alpha}_{1} \leq \frac{1}{k^2}. \quad \square$$

<sup>2</sup> An dieser Stelle wird der (im Haupttext erst später behandelte) Fakt, dass man den Grenzwert der Wehrl-Entropie auch so durchführen kann, dass er nicht divergiert, noch nicht beachtet.

Damit können wir nun die asymptotische Gleichheit der Entropien beweisen. Da  $S^{(vN)} = -k \int \langle \alpha | \rho \ln \rho | \alpha \rangle \frac{d^2\alpha}{\pi}$  und  $S^{(W)} = -k \int \mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) \cdot \ln \mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2\alpha}{\pi}$  ist, genügt es zu zeigen, dass

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \{ \langle \alpha | \rho \ln \rho | \alpha \rangle - \mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) \cdot \ln \mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) \} = 0 \quad (\text{A.18})$$

gilt. Für  $x \in [0, 2]$  kann die Funktion  $x \mapsto -x \cdot \ln x$  durch die Reihe

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} x(x-1)^k$$

dargestellt werden. Da  $\mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) \in [0, 1]$  und  $\sigma(\rho) \subset [0, 1]$  sind, kann in der linken Seite von Gleichung (A.18) diese Entwicklung zweimal eingesetzt werden, dort steht dann

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \left\{ \mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) (\mathcal{Q}(\alpha, \alpha^*) - 1)^k - \langle \alpha | \rho (\rho - 1)^k | \alpha \rangle \right\}.$$

Nach Lemma A.4 kann der Betrag des Terms in geschweiften Klammern unabhängig von  $\hbar$  durch  $\frac{2}{k}$  abgeschätzt werden. Da die Reihe über  $\frac{2}{k^2}$  konvergiert, kann der Grenzwert nach dem Satz über die majorisierte Konvergenz in die Reihe gezogen werden. Nach Lemma A.3 ist der Grenzwert  $\lim_{\hbar \rightarrow 0}$  des Terms in geschweiften Klammern aber 0, demnach ist der gesamte Ausdruck 0.  $\square$

## A.4 Zweiter Term in der Änderung der Systementropie

Hier soll zunächst gezeigt werden, dass

$$\int \left( j_q^{(d)} F_q + \frac{j_p^{(d)} F_p}{m^2 \omega^2} \right) \frac{dqdp}{2\pi\hbar} = -\dot{E}_t^{(\text{sys})} \quad (\text{A.19})$$

gilt (siehe Gleichung (4.37)).

Dafür werden zuerst die Definitionen (4.35) für  $j_q^{(d)}$  und  $j_p^{(d)}$  eingesetzt:

$$j_q^{(d)} F_q + \frac{j_p^{(d)} F_p}{m^2 \omega^2} = \left[ \mu \left( F_q^2 + \frac{F_p^2}{m^2 \omega^2} \right) - D(F_q \partial_q + F_p \partial_p) \right] \mathcal{Q}_t.$$

Im ersten Term werden die Definition von  $\mu$  aus Gleichung (4.27) und die Definitionen von  $F_q$  und  $F_p$  aus Gleichung (4.28) eingesetzt. Damit ist das Integral des ersten Terms gleich

$$\gamma \int \left( \frac{m\omega^2}{2} q^2 + \frac{p^2}{2m} \right) \mathcal{Q}_t \frac{dqdp}{2\pi\hbar}.$$

Im Integral über den zweiten Term wird partiell integriert; verwendet man dann noch die Normierung des  $\mathcal{Q}$ -Symbols (Gleichung (2.27)), erhält man

$$D \int \underbrace{(\partial_q F_q + \partial_p F_p)}_{-2m\omega^2} \mathcal{Q}_t \frac{dqdp}{2\pi\hbar} = -2D m\omega^2 = -\gamma\hbar\omega(N+1).$$

Insgesamt ist

$$\int \left( j_q^{(d)} F_q + \frac{j_p^{(d)} F_p}{m^2 \omega^2} \right) \frac{dqdp}{2\pi\hbar} = -\gamma\hbar\omega(N+1) + \gamma \int \left( \frac{m\omega^2}{2} q^2 + \frac{p^2}{2m} \right) \mathcal{Q} \frac{dqdp}{2\pi\hbar}, \quad (\text{A.20})$$

dies ist gleich  $-\dot{E}_t^{(\text{sys})}$  (siehe Gleichungen (4.2) und (4.4)).

### Bei Verwendung des $\mathcal{P}$ -Symbols

In Abschnitt 4.6 taucht wieder nahezu derselbe Ausdruck auf:  $\int \left( j_q^{(\mathcal{P},d)} F_q + \frac{j_p^{(\mathcal{P},d)} F_p}{m^2 \omega^2} \right) \frac{dq dp}{2\pi \hbar}$ . Man sieht sofort, dass die Rechnung analog durchgeführt werden kann mit dem Ergebnis

$$\int \left( j_q^{(\mathcal{P},d)} F_q + \frac{j_p^{(\mathcal{P},d)} F_p}{m^2 \omega^2} \right) \frac{dq dp}{2\pi \hbar} = -\gamma \hbar \omega N + \gamma \int \left( \frac{m \omega^2}{2} q^2 + \frac{p^2}{2m} \right) \mathcal{P} \frac{dq dp}{2\pi \hbar}. \quad (\text{A.21})$$

Dies ist aber das selbe Ergebnis wie in der obigen Rechnung, was man sieht, wenn man die Faltung (2.35) für  $\mathcal{Q}$  in Gleichung (A.19) einsetzt. Demnach ist auch in diesem Fall das Integral gleich  $-\dot{E}_t^{(\text{sys})}$ .

### Im klassischen Grenzfall

Auch in Abschnitt 4.4 haben wir den Ausdruck  $\int \left( j_q^{(\text{cl},d)} F_q + \frac{j_p^{(\text{cl},d)} F_p}{m^2 \omega^2} \right) \frac{dq dp}{2\pi \hbar}$ . Das ist aber offenbar der Grenzwert von  $\int \left( j_q^{(d)} F_q + \frac{j_p^{(d)} F_p}{m^2 \omega^2} \right) \frac{dq dp}{2\pi \hbar}$  für  $\hbar \rightarrow 0$ . Da die Energie im zugeordneten klassischen System  $E_t^{(\text{cl})}$  gerade der Grenzwert  $\lim_{\hbar \rightarrow 0} E_t^{(\text{sys})}$  ist, folgt

$$\int \left( j_q^{(\text{cl},d)} F_q + \frac{j_p^{(\text{cl},d)} F_p}{m^2 \omega^2} \right) \frac{dq dp}{2\pi \hbar} = -\dot{E}_t^{(\text{cl})} \quad (\text{A.22})$$

## A.5 Pfadgewichte

Die Rechnung kann im Großen und Ganzen analog zur Rechnung für die eindimensionale Langevin-Gleichung in [49, Anhang A] durchgeführt werden. Zunächst muss die Zeit diskretisiert werden, es werden nur noch die Zeitpunkte  $t_i := i\varepsilon$  für  $i \in 0, \dots, N$  betrachtet. Seien  $q_i := q(t_i)$  und  $p_i := p(t_i)$  die entsprechenden Koordinaten im Phasenraum. Die diskretisierten<sup>3</sup> Langevin-Gleichungen (5.5) lauten

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon} (q_i - q_{i-1}) &= \frac{\mu}{2} (F_q(q_i) + F_q(q_{i-1})) + \frac{1}{2m} (p_i + p_{i-1}) + \xi_i \\ \frac{1}{\varepsilon} (p_i - p_{i-1}) &= \frac{\mu}{2} (F_p(p_i) + F_p(p_{i-1})) - \frac{m\omega^2}{2} (q_i + q_{i-1}) + m\omega \xi'_i. \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Die Werte  $\xi_i, \xi'_i$  der stochastischen Kräfte sind voneinander unabhängig und jeweils gaußverteilt mit  $\langle \xi_i \xi_j \rangle = 2D^{(\mathcal{P})} \frac{\delta_{ij}}{\varepsilon}$ , d.h.

$$p(\{\xi_i\}, \{\xi'_i\}) = \left( \frac{\varepsilon}{4\pi D^{(\mathcal{P})}} \right)^N \cdot \exp \left[ -\frac{\varepsilon}{4D^{(\mathcal{P})}} \sum_{i=1}^N (\xi_i^2 + (\xi'_i)^2) \right]. \quad (\text{A.24})$$

Die Gleichungen in (A.23) können als Koordinatentransformation zwischen den Variablen  $\{\xi_i\}, \{\xi'_i\}$  und den Variablen  $\{q_i \mid i \geq 1\}, \{p_i \mid i \geq 1\}$  verstanden werden. Demnach ist

$$p(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N | q_0, p_0) = \det(J) \cdot p(\{\xi_i\}, \{\xi'_i\}) \quad (\text{A.25})$$

mit der Jacobi-Matrix  $J$ . Diese hat folgende Einträge:

$$J = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon} - \frac{\mu}{2} F'_q(q_1) & -\frac{1}{2m} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -\frac{\mu}{2} F'_q(q_1) & \frac{1}{\varepsilon m \omega} - \frac{\mu}{2m\omega} F'_p(p_1) & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -\frac{1}{\varepsilon} - \frac{\mu}{2} F'_q(q_2) & -\frac{1}{2m} & \frac{1}{\varepsilon} - \frac{\mu}{2} F'_q(q_2) & -\frac{1}{2m} & 0 & 0 & \dots \\ -\frac{\mu}{2} F'_q(q_2) & \frac{1}{\varepsilon m \omega} - \frac{\mu}{2m\omega} F'_p(p_2) & -\frac{1}{2m} & \frac{1}{\varepsilon m \omega} - \frac{\mu}{2m\omega} F'_p(p_2) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

<sup>3</sup> Zur Diskretisierung wird der zentrale Differenzenquotient verwendet, also das Stratonovich-Kalkül.

(die Spalten entsprechen den Variablen  $q_1, p_1, q_2, p_2$  usw. und die Zeilen entsprechen den Ableitungen nach  $\xi_1, \xi'_1, \xi_2, \xi'_2$  usw.). Durch die Blockform kann die Determinante der Matrix einfach berechnet werden, sie ist

$$\det(J) = \prod_{i=1}^N \left[ \frac{1}{m\omega} \left( \frac{1}{\varepsilon} - \frac{\mu}{2} F'_q(q_i) \right) \left( \frac{1}{\varepsilon} - \frac{\mu}{2} F'_p(p_i) \right) + \frac{\omega}{4m} \right].$$

Durch Einsetzen der Definitionen von  $F_q$  und  $F_p$  aus Gleichung (4.28) wird dies zu

$$\begin{aligned} \det(J) &= \prod_{i=1}^N \left[ \frac{1}{m\omega} \left( \frac{1}{\varepsilon} + \frac{\mu m \omega^2}{2} \right)^2 + \frac{\omega}{4m} \right] = \left( \frac{1}{m\omega\varepsilon^2} \right)^N \cdot \prod_{i=1}^N \left[ \left( 1 + \varepsilon \frac{\mu m \omega^2}{2} \right)^2 + \varepsilon^2 \frac{m\omega^2}{4} \right] \\ &= \left( \frac{1}{m\omega\varepsilon^2} \right)^N \cdot \exp \left[ \sum_{i=1}^N \ln \left( 1 + \varepsilon \mu m \omega^2 + \varepsilon^2 \frac{\mu^2 m^2 \omega^4 + m\omega^2}{4} \right) \right] \\ &= \left( \frac{1}{m\omega\varepsilon^2} \right)^N \cdot \exp [N\varepsilon \cdot \mu m \omega^2 + O(N\varepsilon^2)]. \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck wird nun zusammen mit Gleichung (A.24) in Gleichung (A.25) eingesetzt. Der auftretende divergierende Faktor  $\left( \frac{1}{4\pi D^{(\mathcal{P})} m \omega \varepsilon} \right)^N$  wird in die Definition des Maßes  $D[q(\tau), p(\tau)]$  einbezogen und demnach im Folgenden weggelassen. Somit resultiert

$$p(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N | q_0, p_0) = \exp \left[ N\varepsilon \cdot \mu m \omega^2 - \frac{\varepsilon}{4D^{(\mathcal{P})}} \sum_{i=1}^N (\xi_i^2 + (\xi'_i)^2) + O(N\varepsilon^2) \right]. \quad (\text{A.26})$$

Um das Pfadgewicht zu erhalten, werden  $\xi_i$  und  $\xi'_i$  noch durch Gleichung (A.23) durch  $q_i$  und  $p_i$  ausgedrückt,

$$\xi_i^2 + (\xi'_i)^2 = \left( \frac{q_i - q_{i-1}}{\varepsilon} - \mu F_q(q_i) - \frac{1}{m} p_i \right)^2 + \frac{1}{m^2 \omega^2} \left( \frac{p_i - p_{i-1}}{\varepsilon} - \mu F_p(p_i) + m\omega^2 q_i \right)^2, \quad (\text{A.27})$$

und schließlich der Grenzübergang  $N \rightarrow \infty, \varepsilon \rightarrow 0, N\varepsilon = t = \text{const}$  durchgeführt. Das Pfadgewicht lautet

$$p[q(\tau), p(\tau) | q_0, p_0] = \exp [-\mathcal{A}[q(\tau), p(\tau)]] \quad (\text{A.28})$$

mit der Wirkung

$$\mathcal{A}[q(\tau), p(\tau)] = \frac{1}{D^{(\mathcal{P})}} \int_0^t \frac{1}{4} \left( (\dot{q} - \mu F_q - \frac{1}{m} p)^2 + \frac{1}{m^2 \omega^2} (\dot{p} - \mu F_p + m\omega^2 q)^2 \right) - \mu D^{(\mathcal{P})} m \omega^2 d\tau. \quad (\text{A.29})$$

## A.6 Konditionierte Mittelwerte

Hier soll Gleichung (5.13) bewiesen werden, wir werden beispielhaft

$$\langle \dot{q} | q, p, \tau \rangle \cdot \mathcal{P}_\tau(q, p) = j_q^{(\mathcal{P})}$$

zeigen. Dafür muss die Ableitung diskretisiert werden, es ist wichtig, dass die Diskretisierung nach Stratonovich durchgeführt wird. Wir schreiben  $q_i := q(\tau + i\varepsilon)$  und  $p_i := p(\tau + i\varepsilon)$  und  $B_0$  für die Bedingung  $q_0 = q$  und  $p_0 = p$ :

$$\langle \dot{q} | q, p, \tau \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\langle q_1 - q_0 | B_0 \rangle}{2\varepsilon} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\langle q_0 - q_{-1} | B_0 \rangle}{2\varepsilon}. \quad (\text{A.30})$$

**Term 1: Anfangspunktbedingung.** Der erste Term kann problemlos berechnet werden: Seien  $\Delta_q^+ := q_1 - q_0$  und  $\Delta_p^+ := p_1 - p_0$ , der konditionierte Mittelwert ergibt sich dann aus dem Integral

$$\langle \Delta_q^+ | B_0 \rangle = \iint \Delta_q^+ P(\Delta_q^+, \Delta_p^+ | B_0) \frac{d\Delta_q^+ d\Delta_p^+}{4\pi D^{(\mathcal{P})} m \omega \varepsilon},$$

wobei wir in diesem Abschnitt Wahrscheinlichkeiten mit  $P$  bezeichnen, um Verwechslungen mit der Variable  $p$  zu vermeiden. Die Wahrscheinlichkeit  $P(\Delta_q^+, \Delta_p^+ | B_0)$  können wir aber aus Gleichungen (A.26) und (A.27) ablesen, denn offenbar ist

$$P(\Delta_q^+, \Delta_p^+ | B_0) = P(q + \Delta_q^+, p + \Delta_p^+ | q, p)$$

(die Funktion  $P$  auf der rechten Seite bezeichnet das diskretisierte Pfadgewicht aus Gleichung (A.26)).

Damit ist klar, wie der Integrand lautet; nach der Berechnung einiger Gauß-Integrale erhalten wir das Ergebnis

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta_q^+ | B_0 \rangle}{2\varepsilon} = \frac{p}{2m} - \mu \frac{m}{2} \omega^2 q = \frac{1}{2} \left( \frac{p}{m} + \mu F_q \right). \quad (\text{A.31})$$

**Term 2: Endpunktbedingung.** Seien zunächst  $\Delta_q^- := q_0 - q_{-1}$  und  $\Delta_p^- := p_0 - p_{-1}$ . Im zweiten Term ist damit das Integral

$$\langle \Delta_q^- | B_0 \rangle = \iint \Delta_q^- P(\Delta_q^-, \Delta_p^- | B_0) \frac{d\Delta_q^- d\Delta_p^-}{4\pi D^{(\mathcal{P})} m \omega \varepsilon}$$

zu berechnen.

Das ist aber nicht so einfach wie beim ersten Term, da das Pfadgewicht aus Gleichung (A.26) nur eine Berechnung der Wahrscheinlichkeit bei Anfangspunktbedingung erlaubt. Wir behelfen uns mit dem Satz von Bayes:

$$P(\Delta_q^-, \Delta_p^- | B_0) = P(B_0 | \Delta_q^-, \Delta_p^-) \cdot \frac{\mathcal{P}_{\tau-\varepsilon}(q - \Delta_q^-, p - \Delta_p^-)}{\mathcal{P}_\tau(q, p)}. \quad (\text{A.32})$$

Die Größe  $P(B_0 | \Delta_q^-, \Delta_p^-)$  können wir berechnen, da

$$P(B_0 | \Delta_q^-, \Delta_p^-) = P(q, p | q - \Delta_q^-, p - \Delta_p^-)$$

ist (die Funktion  $P$  auf der rechten Seite ist erneut das diskretisierte Pfadgewicht aus Gleichung (A.26)). Den Bruch aus Gleichung (A.32) können wir für kleine  $\varepsilon$  entwickeln:

$$\frac{\mathcal{P}_{\tau-\varepsilon}(q - \Delta_q^-, p - \Delta_p^-)}{\mathcal{P}_\tau(q, p)} \approx 1 - \Delta_q^- \partial_q \ln \mathcal{P}(q, p) - \Delta_p^- \partial_p \ln \mathcal{P}(q, p).$$

Der gesuchte bedingte Mittelwert kann also wie folgt ausgerechnet werden:

$$\begin{aligned} \langle \Delta_q^- | B_0 \rangle &= \iint \Delta_q^- P(B_0 | \Delta_q^-, \Delta_p^-) \frac{d\Delta_q^- d\Delta_p^-}{4\pi D^{(\mathcal{P})} m \omega \varepsilon} \\ &\quad - \partial_q \ln \mathcal{P}(q, p) \iint (\Delta_q^-)^2 P(B_0 | \Delta_q^-, \Delta_p^-) \frac{d\Delta_q^- d\Delta_p^-}{4\pi D^{(\mathcal{P})} m \omega \varepsilon} \\ &\quad - \partial_p \ln \mathcal{P}(q, p) \iint \Delta_q^- \Delta_p^- P(B_0 | \Delta_q^-, \Delta_p^-) \frac{d\Delta_q^- d\Delta_p^-}{4\pi D^{(\mathcal{P})} m \omega \varepsilon}, \end{aligned}$$

wobei die Bedingung  $q_{-1} = q$  und  $p_{-1} = p$  mit  $B$  abgekürzt wurde.

Eine explizite Rechnung zeigt: Das Integral in der dritten Zeile verschwindet für  $\varepsilon \rightarrow 0$ , das Integral aus der ersten Zeile ist bereits von Term 1 bekannt. Das Integral in der zweiten Zeile liefert aber einen wichtigen zusätzlichen Beitrag von  $-D^{(\mathcal{P})} \partial_q \ln \mathcal{P}$ , insgesamt ist

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta_q^- | B_0 \rangle}{2\varepsilon} = \frac{1}{2} \left( \frac{p}{m} + \mu F_q \right) - D^{(\mathcal{P})} \partial_q \ln \mathcal{P}(q, p). \quad (\text{A.33})$$

Setzen wir Gleichungen (A.31) und (A.33) zusammen, haben wir die gewünschte Aussage gezeigt.

# Anhang B

## Notationen und Definitionen

### B.1 Fouriertransformation einer komplexen Variablen

Sei  $f(\alpha, \alpha^*)$  eine Funktion einer komplexen Variablen. Die Fouriertransformation in die transformierte Variable  $\beta$  wird bezeichnet mit  $\mathcal{F}_{\alpha \rightarrow \beta}$ . Nach Konvention (siehe zum Beispiel [6, 7]) ist sie definiert als

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{\alpha \rightarrow \beta}[f(\alpha, \alpha^*)](\beta, \beta^*) &:= \int e^{\alpha\beta^* - \alpha^*\beta} f(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2\alpha}{\pi} \\ &= \int e^{-2i\alpha_1\beta_2 + 2i\alpha_2\beta_1} f(\alpha, \alpha^*) \frac{d^2\alpha}{\pi} .\end{aligned}\tag{B.1}$$

Die entsprechende Rücktransformation  $\mathcal{F}_{\beta \rightarrow \alpha}^{-1}$  einer Funktion  $g(\beta, \beta^*)$  lautet dann

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{\beta \rightarrow \alpha}^{-1}[g(\beta, \beta^*)](\alpha, \alpha^*) &= \int e^{\alpha^*\beta - \alpha\beta^*} g(\beta, \beta^*) \frac{d^2\beta}{\pi} \\ &= \int e^{2i\alpha_1\beta_2 - 2i\alpha_2\beta_1} g(\beta, \beta^*) \frac{d^2\beta}{\pi} ,\end{aligned}\tag{B.2}$$

mit dieser Definition gilt natürlich

$$\mathcal{F}_{\beta \rightarrow \alpha}^{-1}[\mathcal{F}_{\alpha \rightarrow \beta}[f(\alpha, \alpha^*)](\beta, \beta^*)](\alpha, \alpha^*) = f(\alpha, \alpha^*) .\tag{B.3}$$

Nach [22, Thm. IX.6] ist dies eine unitäre Abbildung von  $L^2(\mathbb{R}^2)$  nach  $L^2(\mathbb{R}^2)$ . Das heißt insbesondere, dass der Satz von Parseval

$$\int f(\alpha, \alpha^*) \cdot g(\alpha, \alpha^*)^* \frac{d^2\alpha}{\pi} = \int \mathcal{F}_{\alpha \rightarrow \beta}[f(\alpha, \alpha^*)](\beta, \beta^*) \cdot \mathcal{F}_{\alpha \rightarrow \beta}[g(\alpha, \alpha^*)](\beta, \beta^*)^* \frac{d^2\beta}{\pi}\tag{B.4}$$

gilt.

### B.2 Distributionsräume

Zu jedem geeigneten Raum von Testfunktionen  $D$  gibt es einen Distributionsraum  $D'$ , der der Dualraum von  $D$  ist (für Details siehe z.B. [28]).  $D$  ist kanonisch in  $D'$  eingebettet, zu jedem  $f \in D$  gibt es ein  $\varphi_f \in D'$ , das wie folgt wirkt:

$$\varphi_f(g) = \int f(x)g(x) dx \quad (g \in D) .$$

Deshalb verwendet man üblicherweise für alle  $\varphi \in D'$  die symbolische Notation

$$\varphi(g) =: \int \varphi(x)g(x) dx \quad (g \in D) .$$

## Temperierte Distributionen

Verwendet man den Schwartz-Raum  $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$  als Testfunktionenraum, erhält man den Raum der temperierten Distributionen  $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$  als Distributionenraum. Dieser erlaubt (unter anderem) folgende Operationen:

- Translation um einen Vektor  $\xi \in \mathbb{R}^n$ : Sei  $\varphi \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$  und  $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ . Dann ist

$$\int \varphi(x - \xi)g(x) dx := \int \varphi(x)g(x + \xi) dx . \quad (\text{B.5})$$

- Multiplikation mit einer Funktion  $f \in C_0^\infty$ : Sei  $\varphi \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$  und  $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ . Dann ist

$$\int (\varphi \cdot f)(x)g(x) dx := \int \varphi(x) (f(x)g(x)) dx . \quad (\text{B.6})$$

- Beliebige Ableitung: Sei  $k \in \mathbb{N}^n$  ein Multiindex,  $\varphi \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$  und  $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ . Dann ist

$$\int (\partial_x^k \varphi(x)) g(x) dx := (-1)^{|k|} \int \varphi(x) (\partial_x^k g(x)) dx . \quad (\text{B.7})$$

- Da die Fouriertransformation  $\mathcal{F} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$  bijektiv ist, ist es möglich, auch die Fouriertransformation einer Distribution  $\varphi \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$  zu bilden, nämlich über

$$\int \mathcal{F}[\varphi](x)g(x) dx := \int \varphi(x)\mathcal{F}[g](x) dx \quad (g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)) . \quad (\text{B.8})$$

## Der Raum $E'$

Betrachte nun folgenden Raum von Testfunktionen:

$$E := \text{span}\{(\alpha, \alpha^*) \mapsto z(\alpha, \alpha^*) \cdot e^{-|\alpha - \alpha'|^2} \mid \alpha' \in \mathbb{C}, z \text{ Polynom}\} \quad (\text{B.9})$$

als Teilraum von  $\mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ .

Den zugehörigen Distributionenraum nennen wir  $E'$ , offenbar ist  $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^2) \subset E'$ . Für solche Distributionen können wie oben Translationen und beliebige Ableitungen definiert werden. Eine Multiplikation mit beliebigen  $C_0^\infty$ -Funktionen ist nicht mehr möglich, aber immer noch eine Multiplikation mit einem Polynom. Schließlich kann auch auf  $E'$  eine Fouriertransformation wie in Gleichung (B.8) definiert werden, da  $\mathcal{F}(E) \subset E$  und  $\mathcal{F}^{-1}(E) \subset E$  ist, und somit die Einschränkung von  $\mathcal{F}$  auf  $E$  wieder bijektiv.

## B.3 Positivität und vollständige Positivität

### Positivität

Bei der Definition einer quantendynamischen Halbgruppe  $(U_t)_{t \geq 0}$  (siehe Abschnitt 3.1) könnte man zunächst versuchen, nur folgendes Axiom, die Positivität, zu fordern:

$$\rho \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \forall_{t \geq 0} : U_t \rho \geq 0 . \quad (\text{B.10})$$

Dies ist aber nicht ausreichend: Eine sinnvolle Definition einer quantendynamischen Halbgruppe sollte mit dem Tensorprodukt verträglich sein, d.h. wenn  $(U_t)_{t \geq 0}$  und  $(V_t)_{t \geq 0}$  quantendynamische Halbgruppen sind, sollte auch  $(U_t \otimes V_t)_{t \geq 0}$  eine solche sein.

Das Tensorprodukt von zwei positiven Operatoren ist aber im Allgemeinen nicht wieder positiv (siehe [64]): Betrachte den Operator  $U : \mathbb{R}^{2 \times 2} \rightarrow \mathbb{R}^{2 \times 2}$  mit

$$U \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} . \quad (\text{B.11})$$

Dieser ist positiv, denn eine einfache Rechnung zeigt

$$(x, y) \cdot \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = (x, -y) \cdot \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ -y \end{pmatrix}, \quad (\text{B.12})$$

das heißt, wenn  $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$  nicht negativ ist, ist auch  $UA$  nicht negativ. Betrachte außerdem die Identität  $E_2 : \mathbb{R}^{2 \times 2} \rightarrow \mathbb{R}^{2 \times 2}$  mit  $E_2 A = A$ , diese ist offensichtlich auch positiv. Man kann nun die Wirkung von  $E_2 \otimes U$  auf  $4 \times 4$ -Matrizen berechnen: Seien  $A, B, C, D \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ , dann ist

$$(E_2 \otimes U) \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} UA & UB \\ UC & UD \end{pmatrix}. \quad (\text{B.13})$$

Wie man leicht sieht, ist die Matrix

$$M := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.14})$$

nicht negativ, die Matrix

$$(E_2 \otimes U) M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.15})$$

besitzt aber den Eigenwert  $-1$ . Demnach ist  $E_2 \otimes U$  nicht positiv, obwohl  $E_2$  und  $U$  positiv sind.

## Vollständige Positivität

Aus diesem Grund wird an eine quantendynamische Halbgruppe  $(U_t)_{t \geq 0}$  eine stärkere Voraussetzung gestellt, die vollständige Positivität: Sei  $E_n : \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$  die Identität. Die Halbgruppe  $(U_t)_{t \geq 0}$  heißt vollständig positiv genau dann, wenn  $(E_n \otimes U_t)_{t \geq 0}$  positiv ist für jedes  $n \in \mathbb{N}$ .

Vollständige Positivität ist offenbar mit dem Tensorprodukt verträglich: Seien  $U^{(1)} : \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$  und  $U^{(2)} : \mathbb{R}^{m \times m} \rightarrow \mathbb{R}^{m \times m}$  vollständig positive Operatoren, dann ist  $U^{(1)} \otimes U^{(2)} = (U^{(1)} \otimes E_m)(E_n \otimes U^{(2)})$  wieder vollständig positiv.

## B.4 Glossar mit verwendeten Symbolen

$a, a^\dagger$	Leiteroperatoren (Gleichung (2.2))
$\mathcal{A}$	Eine Wirkung
$\alpha$	Komplexe Zahl, üblicherweise mit Realteil $\alpha_1 =: \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q$ und Imaginärteil $\alpha_2 =: \frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}}$ (Gleichung (2.7))
$ \alpha\rangle$	Kohärenter Zustand, $a \alpha\rangle = \alpha \alpha\rangle$ (Gleichungen (2.10), (2.11), (2.12))
$b$	Breite einer Gaußfunktion
$\beta$	Inverse Temperatur $\frac{1}{kT}$
$\beta^{(\text{eff})}$	Effektive Badtemperatur (Gleichung (4.38) bzw. (4.45))
$C^\infty(\mathbb{R}^n)$	Raum der unendlichfach differenzierbaren Funktionen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$
$C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$	Raum der Funktionen $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ mit kompaktem Träger
$D, D^{(\cdot)}$	Effektive Diffusionskonstanten (Gleichungen (4.34), (4.27), (4.42))
$D(\alpha)$	Verschiebungsoperator (Gleichung (2.8), siehe auch Abschnitt 6.1)
$D[x(\tau)]$	Integrationsmaß im Pfadintegral (Symbolische Schreibweise für den Grenzwert von unendlich vielen Integralen)
$\delta, \delta^{(n)}$	Delta-Distribution, $n$ -dimensionale Delta-Distribution
$\Delta\alpha(t)$	Zeitabhängige Breite der Greenschen Funktion von (3.3) (Gleichung (3.10))

$\partial_x$	$:= \frac{\partial}{\partial x}$
$E$	Für das $\mathcal{P}$ -Symbol günstiger Raum von Testfunktionen (Gleichung (B.9))
$E'$	Entsprechender Distributionenraum
$E^{(\text{sys})}$	(Mittlere) Energie im System
$F_q, F_p$	Effektive Kräfte (Gleichung (4.28))
$f_{\text{crit}}$	Fouriertransformation des $\mathcal{P}$ -Symbols (Gleichung (A.1))
$\mathcal{F}$	Fouriertransformation (Gleichung (B.1))
$G, g$	Dynamische Lie-Gruppe eines Systems und ihre Lie-Algebra
$\gamma$	Stärke der Kopplung des Systems an das Wärmebad
$H$	Hamiltonoperator (Gleichung (2.3))
$\mathcal{H}$	Der Hilbertraum des harmonischen Oszillators mit Skalarprodukt $\langle \cdot   \cdot \rangle$
$\mathcal{H}_j$	Hilbertraum eines Spin- $j$ -Systems
$H_4, h_4$	Heisenberg-Weyl-Gruppe bzw. Heisenberg-Weyl-Algebra (Abschnitt 6.1)
$\hbar$	Reduziertes Plancksches Wirkungsquantum
$J_i, J_{\pm}$	Drehimpulsoperatoren
$ j, \vartheta, \varphi\rangle$	SU(2) kohärente Zustände
$j_{q/p}^{(\cdot)}$	Wahrscheinlichkeitsströme (Gleichung (4.35))
$j_{q/p}^{(\text{cl}, \cdot)}$	Wahrscheinlichkeitsströme (Gleichung (4.29))
$j_{q/p}^{(\mathcal{P}, \cdot)}$	Wahrscheinlichkeitsströme (Gleichung (4.43))
$k$	Boltzmann-Konstante
$K$	Maximale Isotropie-Untergruppe von $G$
$\Lambda, \Lambda^{(\text{cl})}$	Positive Größen, im klassischen Fall: Gesamtentropieproduktion
$L^p(\mathbb{R}^n)$	Raum der Funktionen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ , für die $\ \cdot\ _p^p := \int  f(x) ^p d^n x$ endlich ist
$m$	Masse des Teilchens im harmonischen Oszillator
$\mu$	Effektive Mobilität (Gleichung (4.27))
$N$	In Abschnitt 6.1: Maß auf dem Quotientenraum $G/K$ $:= 1/(e^{\hbar\omega\beta} - 1)$
$\mathbb{N}$	Natürliche Zahlen inklusive Null
$\mathcal{N}(t)$	$:= 1/\Delta\alpha(t)$ , Normierungskonstante (Gleichung (3.6))
$ n\rangle$	Anzahlzustand, $a^\dagger a  n\rangle = n  n\rangle$
$o, O$	Landau-Symbole
$p[x(\tau) x_0]$	Pfadgewicht im Pfadintegral
$\hat{p}$	Impulsoperator
$\mathcal{P}$	Glauber- $\mathcal{P}$ -Funktion (Gleichung (2.28))
$ \psi_0\rangle$	Ausgangsvektor für die Konstruktion der generalisierten kohärenten Zustände
$\hat{q}$	Ortsoperator
$dQ^{(\text{sys})}$	Infinitesimale Menge an Wärme, die von dem System abgegeben wird
$\mathcal{Q}$	Husimi- $\mathcal{Q}$ -Funktion (Gleichung (2.26))
$R$	R-Größe, definiert in Gleichung (5.7)
$\rho$	Dichtematrix, positiv definiter Spurklasse-Operator mit $\text{tr } \rho = 1$
$\rho(\dots)$	Eine Wahrscheinlichkeitsdichte
$\rho^{(1)}$	Quantenmechanische Korrekturen erster Ordnung zu $\rho^{(\text{cl})}$ (Gleichung (4.21))
$\rho^{(\text{cl})}$	Wahrscheinlichkeitsdichte des zugeordneten klass. Systems (Gleichung (4.16))
$S^{(1)}$	Quantenmechanische Korrekturen erster Ordnung zu $S^{(\text{cl})}$ (Gleichung (4.22))
$S^{(\text{cl})}$	Entropie des zugeordneten klassischen Systems (Gleichung (4.19))
$S^{(\text{med})}$	Entropie des Wärmebads
$S^{(\text{vN})}$	Von-Neumann-Entropie des Systems (Gleichung (4.6))
$S^{(\text{tot})}$	Summe aus Systementropie und Badentropie
$S^{(\text{W})}$	Wehrl-Entropie des Systems (Gleichung (4.8))
$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$	Der Schwartz-Raum $\{f \in C^\infty(\mathbb{R}^n) \mid \forall k, l \in \mathbb{N}^n : x^k \partial_x^l f(x) \in L^\infty(\mathbb{R}^n)\}$
$\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$	Raum der temperierten Distributionen
$SU(n)$	Spezielle unitäre Gruppe (Abschnitt 6.2)

$su(n)$	Lie-Algebra zu $SU(n)$
$T$	Temperatur
$\text{tr}$	Spur eines Operators
$\tau_D$	Dekohärenzzeit (Gleichung (3.21))
$U(n)$	Unitäre Gruppe
$dW^{(\text{sys})}$	Infinitesimale Menge von an dem System verrichteter Arbeit
$\omega$	Kreisfrequenz des harmonischen Oszillators
$\xi, \xi'$	Stochastische Kräfte (siehe Abschnitt 5.1)
$Z, z$	$Z$ : Größe aus Gleichung (4.40), $z$ : auf Trajektorienebene (Gleichung (5.10))
$\cong$	Isomorphie

# Anhang C

## Literaturverzeichnis

- [1] Schrödinger, E.: *Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik*. Naturwissenschaften, 14:664–666, 1926, ISSN 0028-1042. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01507634>, 10.1007/BF01507634.
- [2] Perelomov, A.M.: *Coherent states for arbitrary Lie group*. Communications in Mathematical Physics, 26:222–236, 1972, ISSN 0010-3616. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01645091>.
- [3] Ringel, M. und V. Gritsev: *Liouville coherent states*. EPL (Europhysics Letters), 99(2):20012, 2012. <http://stacks.iop.org/0295-5075/99/i=2/a=20012>.
- [4] Glauber, R.J.: *Coherent and Incoherent States of the Radiation Field*. Phys. Rev., 131:2766–2788, Sep 1963. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.131.2766>.
- [5] Sudarshan, E.C.G.: *Equivalence of Semiclassical and Quantum Mechanical Descriptions of Statistical Light Beams*. Phys. Rev. Lett., 10:277–279, Apr 1963. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.10.277>.
- [6] Klauder, J.R., J. McKenna und D.G. Currie: *On “Diagonal” Coherent-State Representations for Quantum-Mechanical Density Matrices*. Journal of Mathematical Physics, 6(5):734–739, 1965. <http://link.aip.org/link/?JMP/6/734/1>.
- [7] Scully, M.O. und M.S. Zubairy: *Quantum Optics*. Cambridge University Press, 1997.
- [8] Risken, H.: *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications*. Springer Series in Synergetics. Springer, zweite Auflage, 1988.
- [9] Bužek, V., C.H. Keitel und P.L. Knight: *Sampling entropies and operational phase-space measurement. I. General formalism*. Phys. Rev. A, 51:2575–2593, Mar 1995. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.51.2575>.
- [10] Mintert, F. und K. Życzkowski: *Wehrl entropy, Lieb conjecture, and entanglement monotonies*. Phys. Rev. A, 69:022317, Feb 2004. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.69.022317>.
- [11] Anderson, A. und J.J. Halliwell: *Information-theoretic measure of uncertainty due to quantum and thermal fluctuations*. Phys. Rev. D, 48:2753–2765, Sep 1993. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.48.2753>.
- [12] Wehrl, A.: *General properties of entropy*. Rev. Mod. Phys., 50:221–260, Apr 1978. <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.50.221>.
- [13] Seifert, U.: *Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems, and molecular machines*. <http://de.arxiv.org/abs/1205.4176>, arXiv:1205.4176v1 [cond-mat.stat-mech].
- [14] Seifert, U.: *Entropy Production along a Stochastic Trajectory and an Integral Fluctuation Theorem*. Phys. Rev. Lett., 95:040602, Jul 2005. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.040602>.

- [15] Jarzynski, C.: *Nonequilibrium Equality for Free Energy Differences*. Phys. Rev. Lett., 78:2690–2693, Apr 1997. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.78.2690>.
- [16] Teschl, G.: *Mathematical Methods in Quantum Mechanics: With Applications to Schrödinger Operators*. Graduate Studies in Mathematics. American Mathematical Society, 2009.
- [17] Messiah, A.: *Quantenmechanik*, Band 1 der Reihe *Quantenmechanik*. De Gruyter, zweite Auflage, 1991.
- [18] Perelomov, A.: *Generalized Coherent States And Their Applications*. Texts and Monographs in Physics. Springer, 1986.
- [19] Gardiner, C.W. und P. Zoller: *Quantum Noise: A Handbook Of Markovian And Non-markovian Quantum Stochastic Methods With Applications To Quantum Optics*. Springer Series in Synergetics. Springer, dritte Auflage, 2004.
- [20] Theis, W.: *Grundzüge der Quantentheorie: Mit Exemplarischen Anwendungen*. Teubner Studienbücher Physik. Vieweg+Teubner Verlag, 1985.
- [21] Kühnel, W.: *Matrizen und Lie-Gruppen: Eine geometrische Einführung*. Vieweg+Teubner Verlag, 2010.
- [22] Reed, M. und B. Simon: *Functional analysis*, Band 1 der Reihe *Methods of Modern Mathematical Physics*. Academic Press, 1980.
- [23] Mehta, C.L.: *Sudarshan diagonal coherent state representation: Developments and applications*. Journal of Physics: Conference Series, 196(1):012014, 2009. <http://stacks.iop.org/1742-6596/196/i=1/a=012014>.
- [24] Birman, S. und Z. Solomjak: *Spectral Theory of Self-Adjoint Operators in Hilbert Space*. Mathematics and Its Applications. D. Reidel Publishing Company, 1987.
- [25] Husimi, K.: *Some Formal Properties of the Density Matrix*. Nippon Sugaku-Buturiggakkwai Kizi Dai 3 Ki, 22(4):264–314, 1940, ISSN 0370-1239.
- [26] Mehta, C.L.: *Diagonal Coherent-State Representation of Quantum Operators*. Phys. Rev. Lett., 18:752–754, May 1967. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.18.752>.
- [27] Wigner, E.: *On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium*. Phys. Rev., 40:749–759, Jun 1932. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.40.749>.
- [28] Duistermaat, J.J. und J.A.C. Kolk: *Distributions: Theory and Applications*. Cornerstones Series. Birkhäuser, 2010.
- [29] Breuer, H.P. und F. Petruccione: *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford University Press, 2002.
- [30] Alicki, R.: *Invitation to Quantum Dynamical Semigroups*. In: Garbaczewski, Piotr und Robert Olkiewicz (Herausgeber): *Dynamics of Dissipation*, Band 597 der Reihe *Lecture Notes in Physics*, Seiten 239–264. Springer Berlin / Heidelberg, 2002.
- [31] Gorini, V., A. Kossakowski und E.C.G. Sudarshan: *Completely positive dynamical semigroups of N-level systems*. Journal of Mathematical Physics, 17(5):821–825, 1976. <http://link.aip.org/link/?JMP/17/821/1>.
- [32] Lindblad, G.: *On the generators of quantum dynamical semigroups*. Communications in Mathematical Physics, 48:119–130, 1976.
- [33] Rivas, Á. und S.F. Huelga: *Open Quantum Systems: An Introduction*. SpringerBriefs in Physics. Springer, 2011.

- 
- [34] Diu, B., C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet und F. Marschner: *Grundlagen der Statistischen Physik: Ein Lehrbuch mit Übungen*. De Gruyter, 1994.
- [35] Fellah, D.: *Return to Thermal Equilibrium*. Letters in Mathematical Physics, 80:101–113, 2007, ISSN 0377-9017. <http://dx.doi.org/10.1007/s11005-007-0157-z>.
- [36] Spohn, H.: *Entropy production for quantum dynamical semigroups*. Journal of Mathematical Physics, 19(5):1227–1230, 1978. <http://link.aip.org/link/?JMP/19/1227/1>.
- [37] Bužek, V., C.H. Keitel und P.L. Knight: *Sampling entropies and operational phase-space measurement. II. Detection of quantum coherences*. Phys. Rev. A, 51:2594–2601, Mar 1995. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.51.2594>.
- [38] Orłowski, A., H. Paul und G. Kastelewicz: *Dynamical properties of a classical-like entropy in the Jaynes-Cummings model*. Phys. Rev. A, 52:1621–1628, Aug 1995. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.52.1621>.
- [39] Keitel, C.H. und K. Wódkiewicz: *On the information entropy of squeezed states and the entropic uncertainty relation*. Physics Letters A, 167(2):151 – 160, 1992, ISSN 0375-9601. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037596019290220G>.
- [40] Watson, J.B., C.H. Keitel, P.L. Knight und K. Burnett: *Entropic measure of wave-packet spreading and ionization in laser-driven atoms*. Phys. Rev. A, 54:729–735, Jul 1996. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.54.729>.
- [41] Gnutzmann, S. und K. Zyczkowski: *Rényi-Wehrl entropies as measures of localization in phase space*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 34(47):10123, 2001. <http://stacks.iop.org/0305-4470/34/i=47/a=317>.
- [42] Hardy, G.H., J.E. Littlewood und G. Pólya: *Inequalities*. Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press, 1988.
- [43] Wehrl, A.: *On the relation between classical and quantum-mechanical entropy*. Reports on Mathematical Physics, 16(3):353 – 358, 1979, ISSN 0034-4877. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0034487779900703>.
- [44] Lieb, E.H.: *Proof of an entropy conjecture of Wehrl*. Communications in Mathematical Physics, 62:35–41, 1978, ISSN 0010-3616. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01940328>.
- [45] Lieb, E.H. und J.P. Solovej: *Proof of an entropy conjecture for Bloch coherent spin states and its generalizations*. <http://arxiv.org/abs/1208.3632>, arXiv:1208.3632 [math-ph], 2012.
- [46] Chaichian, M. und A.P. Demichev: *Path Integrals in Physics: Stochastic processes and quantum mechanics*. Series in Mathematical and Computational Physics. Institute of Physics, 2001.
- [47] Sekimoto, K.: *Langevin Equation and Thermodynamics*. Progress of Theoretical Physics Supplement, 130:17–27, 1998. <http://ptp.ipap.jp/link?PTPS/130/17/>.
- [48] Bustamante, C., J. Liphardt und F. Ritort: *The Nonequilibrium Thermodynamics of Small Systems*. Physics Today, 58(7):43–48, 2005. <http://link.aip.org/link/?PTO/58/43/1>.
- [49] Seifert, U.: *Stochastic thermodynamics*. In: *Lecture Notes: 'Soft Matter. From Synthetic to Biological Materials'*, 2008, ISBN 978-3-89336-517-3. [http://www.theo2.physik.uni-stuttgart.de/pdfgalerie/b5\\_seifert\\_web.pdf](http://www.theo2.physik.uni-stuttgart.de/pdfgalerie/b5_seifert_web.pdf).
- [50] Maes, C. und K. Netočný: *Time-Reversal and Entropy*. Journal of Statistical Physics, 110:269–310, 2003, ISSN 0022-4715. <http://dx.doi.org/10.1023/A:1021026930129>.

- [51] Horowitz, J.M.: *Quantum-trajectory approach to the stochastic thermodynamics of a forced harmonic oscillator*. Phys. Rev. E, 85:031110, Mar 2012. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.85.031110>.
- [52] Klauder, John R.: *Continuous-Representation Theory. I. Postulates of Continuous-Representation Theory*. Journal of Mathematical Physics, 4(8):1055–1058, 1963. <http://link.aip.org/link/?JMP/4/1055/1>.
- [53] Klauder, John R.: *Continuous-Representation Theory. II. Generalized Relation between Quantum and Classical Dynamics*. Journal of Mathematical Physics, 4(8):1058–1073, 1963. <http://link.aip.org/link/?JMP/4/1058/1>.
- [54] Gilmore, Robert: *Geometry of symmetrized states*. Annals of Physics, 74(2):391 – 463, 1972.
- [55] Zhang, W., D.H. Feng und R. Gilmore: *Coherent states: Theory and some applications*. Rev. Mod. Phys., 62:867–927, Oct 1990. <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.62.867>.
- [56] Delbourgo, R. und J.R. Fox: *Maximum weight vectors possess minimal uncertainty*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 10(12):L233, 1977. <http://stacks.iop.org/0305-4470/10/i=12/a=004>.
- [57] Lang, S.: *Real and Functional Analysis*. Graduate Texts in Mathematics. Springer-Verlag, 1993.
- [58] Boixo, S., L. Viola und G. Ortiz: *Generalized coherent states as preferred states of open quantum systems*. EPL (Europhysics Letters), 79(4):40003, 2007. <http://stacks.iop.org/0295-5075/79/i=4/a=40003>.
- [59] Barnum, H., E. Knill, G. Ortiz und L. Viola: *Generalizations of entanglement based on coherent states and convex sets*. Phys. Rev. A, 68:032308, Sep 2003. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.68.032308>.
- [60] Radcliffe, J.M.: *Some properties of coherent spin states*. Journal of Physics A: General Physics, 4(3):313, 1971. <http://stacks.iop.org/0022-3689/4/i=3/a=009>.
- [61] Kleinbach, K.: *Entropieproduktion in Zwei-Niveau-Systemen*. Bachelorarbeit, Universität Stuttgart, II. Institut für Theoretische Physik, 2011.
- [62] Narducci, L. M., C. M. Bowden, V. Bluemel, G. P. Garrazana und R. A. Tuft: *Multitime-correlation functions and the atomic coherent-state representation*. Phys. Rev. A, 11:973–980, Mar 1975. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.11.973>.
- [63] Yaffe, L.G.: *Large  $N$  limits as classical mechanics*. Rev. Mod. Phys., 54:407–435, Apr 1982. <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.54.407>.
- [64] Stinespring, W. Forrest: *Positive Functions on  $C^*$ -Algebras*. Proceedings of the American Mathematical Society, 6(2):pp. 211–216, 1955, ISSN 00029939. <http://www.jstor.org/stable/2032342>.



# Danksagung

Abschließend möchte ich mich noch bei den Professoren Seifert und Griesemer dafür bedanken, dass sie es mir ermöglicht haben, bei ihnen diese kooperative Bachelorarbeit anzufertigen; außerdem natürlich für eine Vielzahl von Korrekturen und kritischen Kommentaren zum Inhalt der Arbeit. Sehr großer Dank gebührt auch meinem Betreuer Kay Brandner, der vom manchmal stundenlangen Erklären und Diskutieren niemals müde wurde, der mir aber bei der Anfertigung der Arbeit auch eine große Freiheit für eigene Interessen ließ. Für eine sehr angenehme Arbeitsatmosphäre und dafür, dass sie immer ein offenes Ohr für Fragen hatten, danke ich auch den anderen Mitgliedern des II. Instituts für Theoretische Physik und im Speziellen meinem Büronachbarn Julian Stark. Schließlich möchte ich an dieser Stelle noch meine Eltern nennen, ohne deren Unterstützung dieses Studium kaum möglich wäre, und meine Freundin Dominique Dočkal, die mir wann immer nötig eine große seelische Unterstützung war.