30.5.2007

$$e^{-\mathcal{F}(\chi,t)} = \sum_{n=0}^{\infty} p_n(0,t)\, e^{i\chi n}$$

$$C_1 \equiv \langle n \rangle_t = -(-i)^{1} \frac{\partial}{\partial \chi} \mathcal{F}(\chi,t)\Big|_{\chi=0}$$

$$C_2 \equiv \langle n^2 \rangle_t - \langle n \rangle_t^2 = -(-i)^2 \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \mathcal{F}(\chi,t)\Big|_{\chi=0}$$

$$\vdots$$

kumulantenerzeugende Funktion

$$F(x,t) = \frac{1}{2}x^2 \cdot t$$

Ableiten: Nur C_1 und C_2 bleiben übrig, alle höheren Kumulanten verschwinden – Gauß-Verteilung

Zentraler Grenzwertsatz:

$$X_n \equiv \frac{n - \langle n \rangle_t}{\sigma_t} \; ; \; \sigma_t^2 = \langle n^2 \rangle_t - \langle n \rangle_t^2$$

$$e^{-K(x,t)} \equiv \sum_n p_n(0|t) e^{ixX_n}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} p_n(0|t) e^{ix\left[\frac{n - \langle n \rangle_t}{\sigma_t}\right]}$$

Wir hatten $\sum_{n=0}^{\infty} p_n(0|t) e^{ixn} \propto e^{-\lambda_0(x)t}$

$t \to \infty$

$$e^{-K(x,t)} \propto e^{-\lambda_0\left(\frac{x}{\sigma_t}\right)t - ix\frac{\langle n \rangle_t}{\sigma_t}}$$

$t \to \infty$

$$K(x,t) = \lambda_0\left(\frac{x}{\sigma_t}\right) \cdot t + ix\frac{\langle n \rangle_t}{\sigma_t} \, , \; t \to \infty$$

Jetzt entwickeln:

$$K(x,t) = t\left\{\underset{=0}{\lambda_0(0)} + \frac{x}{\sigma_t}\lambda_0'(0) + \frac{1}{2!}\frac{x^2}{\sigma_t^2}\lambda_0''(0) + \dots\right\}$$

$$+ ix\frac{\langle n \rangle_t}{}$$

$$= -t\left\{\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3!}\underbrace{\left(\frac{x}{\sigma_t}\right)^3}_{t^{-3/2}}\lambda_0'''(0) + \dots\right\}$$

$$c_1 = \langle n\rangle_t = \frac{1}{t}(-i)\frac{\partial}{\partial x}\lambda_0(x)\Big|_{x=0}$$

VZ falsch

$$= -\frac{1}{2}x^2\cdot t + O\left(\frac{1}{\sqrt{t}}\right)$$

$$e^{-F} = \sum_n p_n e^{ixn} \propto e^{-\lambda_0 t}$$

Neue Variable x_n ist gauß-verteilt für $t \to \infty$.

- Analog zur Äquivalenz der thermodynamischen Ensembles für große Teilchenzahlen N.

Quanten-Regressionstheorem

$$C_{BA}(t,\tau) = \left\langle \hat{B}(t)\,\hat{A}(t+\tau)\right\rangle = \mathrm{Tr}_{\text{total}}\left(\chi(0)\,B(t)\,A(t+\tau)\right)$$

Korrelationsfunktion

$$\chi(t) = e^{-iHt}\,\chi(0)\,e^{iHt}$$

$$B(t) = e^{iHt}\,B\,e^{-iHt};$$

$$C_{BA}(t,\tau) = \mathrm{Tr}\left(\chi(0)\,B(t)\,A(t+\tau)\right)$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\underbrace{\chi(0) e}\,^{iHt} B e^{-iHt} A(t+\tau)\right)$$

$$= \mathrm{Tr}\left(e^{iHt}\chi(t) B e^{-iHt} e^{iH(t+\tau)} A e^{-iH(t+\tau)}\right)$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\chi(t) B e^{iH\tau} A e^{-iH\tau}\right)$$

$$= \mathrm{Tr}\left(e^{-iH\tau} \underbrace{\chi(t)}_{\rho(t) \otimes R_0} B e^{iH\tau} A\right)$$

Bornsche Näherung

$$= \mathrm{Tr}\left(e^{-iH\tau} \rho(t) R_0 B e^{iH\tau} A\right)$$

A, B Systemoperatoren

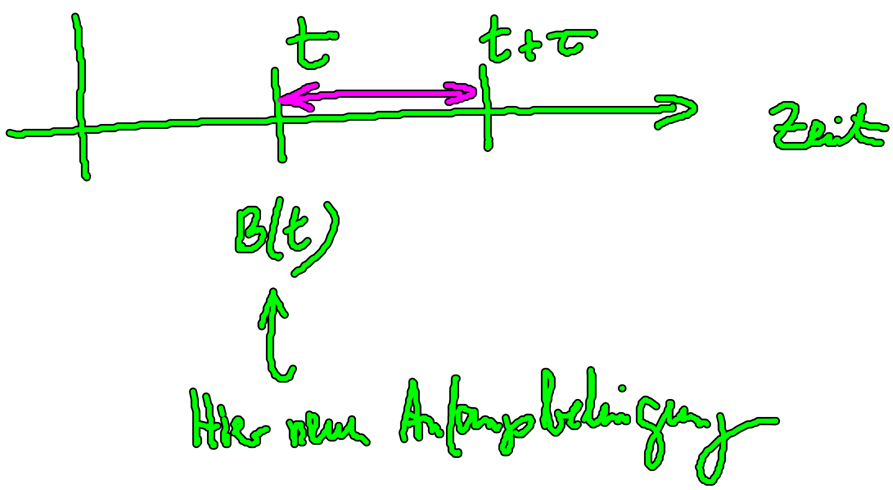
$$= \mathrm{Tr}_S\left(A \,\mathrm{Tr}_{Bad}\left\{e^{-iH\tau} \underbrace{\rho(t) B}_{=\rho_{B,t}} R_0 e^{iH\tau}\right\}\right)$$

$$= \mathrm{Tr}_S\left(A \,\mathrm{Tr}_{Bad}\left\{e^{-iH\tau} \rho_{B,t} \otimes R_0 e^{iH\tau}\right\}\right)$$

$$\underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad\tau \geq 0}_{\text{Zeitentwicklung im Intervall } [t,\, t+\tau] \text{ des Anfangszustands } \varrho_{B,t} \otimes R_0 \text{ zur Zeit } t}$$

$$= \mathrm{Tr}_S\left(A \; \varrho_{B,t}(\tau) \right)$$

Hat die Form eines „normalen" Erwartungswerts zur Zeit τ



Systemoperator $\hat{O}$, z.B. für ϱ_0

$$\hat{O}(\tau) = \mathrm{Tr}_B\left(e^{-iH\tau} \, \hat{O} R_0 \, e^{iH\tau} \right), \quad \tau \geq 0$$

geschrieben als $\frac{d}{d\tau} \hat{O}(\tau) = \Sigma_\tau \hat{O}(\tau)$

<u>Beispiel</u>: Mastergleichung $\frac{d}{d\tau} \hat{\varrho}(\tau) = \Sigma_\tau \hat{\varrho}(\tau)$

Annahme: $\{|\alpha\rangle\}$ Systembasis

$\langle\alpha|\mathcal{I}_\tau\hat{\rho}(\tau)|\beta\rangle$, $\mathcal{I}_\tau$ ist linear

Wir definieren

$$\langle\alpha|\mathcal{I}_\tau\hat{O}(\tau)|\beta\rangle = \sum_{\gamma\delta}\int_0^\tau M^{\alpha\beta}_{\gamma\delta}(\tau,\tau')\langle\gamma|\hat{O}(\tau')|\delta\rangle d\tau'$$

„Redfield-Tensor"

Für die Operatoren schreiben wir $A = |\beta\rangle\langle\alpha|$ etc.

Betrachte $C_{BA}(t,\tau) = \mathrm{Tr}_S\left(A\rho_{B;t}(\tau)\right)$

$$= \langle\alpha|\rho_{B;t}(\tau)|\beta\rangle$$

$|\beta\rangle\langle\alpha|$

$$\frac{d}{d\tau}C_{BA}(t,\tau) = \langle\alpha|\mathcal{I}_\tau\rho_{B;t}(\tau)|\beta\rangle$$

$$= \sum_{\gamma\delta}\int_0^\tau d\tau'\, M^{\alpha\beta}_{\gamma\delta}(\tau,\tau')\langle\gamma|\rho_{B;t}(\tau')|\delta\rangle$$

$$= \sum_{\gamma\delta}\int_0^\tau d\tau'\, M^{\alpha\beta}_{\gamma\delta}(\tau,\tau')\; C_{B\,|\delta\rangle\langle\gamma|}(t,\tau')$$

<u>Definiere</u> $k \equiv (\alpha\beta)$; $l \equiv (\gamma\delta)$

$$A_k \equiv |\beta\rangle\langle\alpha|\;;\; \underset{\tau}{M^{\alpha\beta}_{\gamma\delta}} \equiv M_{kl}$$

$$\frac{d}{d\tau} C_{B,A_k}(t,\tau) = \sum_l \int_0 d\tau' \, M_{kl}(\tau,\tau') \, C_{B,A_l}(t,\tau')$$

Jetzt in Vektorform, $\underline{A} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$

Damit

$$\frac{d}{d\tau} \langle B(t) A_k(t+\tau) \rangle = \int_0^\tau d\tau' \sum_l M_{kl}(\tau,\tau') \langle B(t) A_l(t+\tau') \rangle$$

$$\Rightarrow \left\| \frac{d}{d\tau} \langle B(t) \underline{A}(t+\tau) \rangle = \int_0^\tau d\tau' \, \underline{\underline{M}}(\tau,\tau') \langle B(t) \underline{A}(t+\tau') \rangle, \right.$$

$$\tau > 0.$$

Quanten-Regressionstheorem (QRT)

- Zur Berechnung der Korrelationsfunktion benötigt man nur die Matrix $\underline{\underline{M}}$, die bereits in der Mastergleichung auftritt.

$$\frac{d}{d\tau} \rho = \int_0^\tau d\tau' \, \underline{\underline{M}}(\tau,\tau') \rho(\tau')$$

- Normalerweise nur benutzt für Markovsche Mastergleichung, $\frac{d}{d\tau} \rho(\tau) = \underline{\underline{M}} \, \rho(\tau)$
- QRT nur gültig für Markovsche Mastergleichung.
- Nicht-Markovsche Mastergleichungen: kompliziert.

Feynman-Vernon Influenzfunktionaltheorie

Liouville, voll QM $\longrightarrow$ Doppelte Pfadintegrale (PI) für Systemdichtematrix (exakt)

$\downarrow$

Semiklassik $\longleftarrow$ PI für Wigner-Funktion

Fokker-Planck-Gleichung $\leftarrow$

Einfache Pfadintegrale

Modell: Teilchen der Masse M im Potential $V(x)$

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(x) = T + V$$

Schrödingergl.: $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(0)\rangle$; $t \geq 0$

Ortsdarstellung

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \int dx' \underbrace{\langle x| e^{-iHt} |x'\rangle}_{\text{Propagator } G(x,t;x't'=0)} \langle x'|\psi(0)\rangle$$

- $e^{-\lambda(T+V)} \neq e^{-\lambda T} e^{\lambda V}$ $\quad \lambda = it \; (\hbar = 1)$

weil $[T,V] \neq 0$.

$$e^{-\lambda(T+V)} = \left(e^{-\frac{\lambda}{N}(T+V)}\right)^N$$

Trotter Produkt-Formel

$$= \lim_{N\to\infty} \left(e^{-\frac{\lambda}{N}T} e^{-\frac{\lambda}{N}V}\right)^N$$

für $N \to \infty$

(ohne Beweis. Vgl. L. S. Schulman
Feynman, Hibbs)

Jetzt in Propagator einsetzen.

$$\chi(t) = e^{-iHt}\chi(0)\, e^{+iHt}$$