30.5.2007

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

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

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

$$\vdots$$

Kumulantenerzeugende Funktion

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

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

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

$$e^{-K(\chi,t)} \equiv \sum_n p_n(0,t) e^{i\chi X_n}$$

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

Wir hatten $\sum_{n=0}^{\infty} p_n(0,t)\, e^{i\chi n} \propto e^{-\lambda_0(\chi)t}$ $\quad t \to \infty$

$$e^{-K(\chi,t)} \propto e^{-\lambda_0\left(\frac{\chi}{\sigma_t}\right)t - i\chi\frac{\langle n \rangle_t}{\sigma_t}} \quad t \to \infty$$

$$K(\chi,t) = \lambda_0\left(\frac{\chi}{\sigma_t}\right)\cdot t + i\chi\frac{\langle n \rangle_t}{\sigma_t}, \quad t \to \infty$$

Jetzt entwickeln:

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

$$+ i\chi\frac{\langle n \rangle_t}{\sigma_t}$$

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

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

VZ falsch

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

$$e^{-\mathcal{F}} = \sum_n p_n e^{i\chi n} \propto e^{-\lambda_0 t}$$

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

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

$\boxed{\text{Quanten-Regressionstheorem}}$

$$C_{BA}(t,\tau) \equiv \langle \hat{B}(t) \hat{A}(t+\tau) \rangle \equiv$$

$$\equiv \mathrm{Tr}_{\text{total}}\left(\chi(0) B(t) A(t+\tau)\right)$$

Korrelationsfunktion

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

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

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

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

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

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

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

Bornsche Näherung

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

A, B Systemoperatoren

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

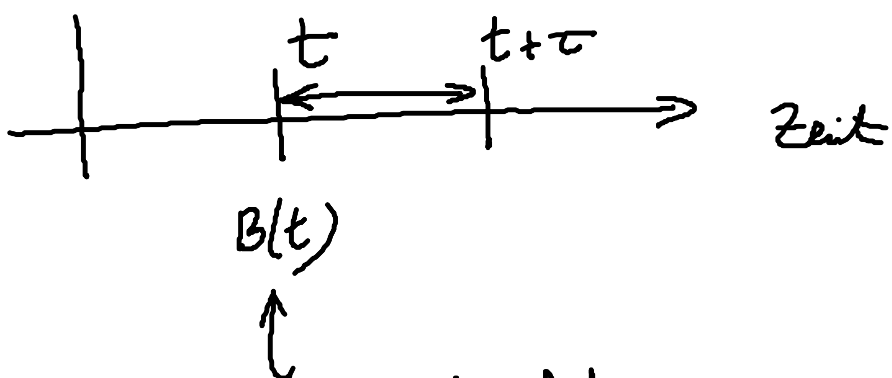
$$= \mathrm{Tr}_S\left(A \, \mathrm{Tr}_{Bad}\left\{e^{-iH\tau} \rho_{B;t} \otimes R_0 \, e^{iH\tau}\right\}\right)$$

$$\underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{}\quad \tau \geq 0$$

Zeitentwicklung im Intervall $[t, t+\tau]$
des Anfangszustands $\varrho_{B;t} \otimes R_0$
zur Zeit $t$

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

Hat die Form eines „normalen" Erwartungswerts zur Zeit $\tau$




Hier neue Anfangsbedingung

Systemoperator $\hat{O}$, z.B. für $\varrho_0$

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

geschrieben als $\quad {}^{d}\!/\!_{d\tau}\, \hat{O}(\tau) \equiv \mathcal{L}_\tau \hat{O}(\tau)$

Beispiel: Mastergleichung $\quad \frac{d}{d\tau} \hat{\varrho}(\tau) = \mathcal{L}_\tau \hat{\varrho}(\tau)$

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

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

$A = |\beta\rangle\langle\alpha|$

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

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

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

<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

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

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

$$\tau > 0.$$

## Quanten-Regressionstheorem (QRT)

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

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

- 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 Fokker-Planck-Gleichung $\longleftarrow$ PI für Wigner-Funktion

## Einfache Pfadintegrale

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

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

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

Ortsdarstellung $\langle x|\Psi(t)\rangle = \int dx' \underbrace{\langle x|e^{-iHt}|x'\rangle}_{} \langle x'|\Psi(0)\rangle$

Propagator $G(x, t; x' t'=0)$

$\lambda \equiv it \; (\hbar = 1)$

- $e^{-\lambda(T+V)} \neq e^{-\lambda T} e^{\lambda V}$, 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.

$$x(t) = e^{-iHt} x(0) e^{+iHt}$$