

# **Dekohärenz und Dissipation in Quantensystemen**

**J. Ankerhold, Stand: 03/2010**

**nach dem Vorlesungsmanuskript erstellt von Selina Rohrer**

**NOCH VORLÄUFIG; KEINE GEWÄHR FÜR DRUCKFEHLER ETC**

2. Mai 2010

# Inhaltsverzeichnis

<b>I). Klassische Dissipation: Relaxation und Fluktuationen</b>	<b>3</b>
I).1. harmonischer Oszillator . . . . .	3
I).2. Absorbierte Energie . . . . .	5
I).3. Fluktuationen . . . . .	7
I).4. Langevingleichung . . . . .	9
<b>II). Offene Quantensysteme 1</b>	<b>13</b>
II).1. Modellierung . . . . .	13
II).2. Liouville von Neumann Gleichung . . . . .	13
II).3. Wechselwirkungsbild . . . . .	14
II).4. Mastergleichung . . . . .	15
II).5. Gültigkeit . . . . .	16
II).6. Quantum Brownian Motion . . . . .	17
II).7. Quanten-Brownsche-Dynamik: Darstellung . . . . .	24
II).8. Quantenoptische Mastergleichung . . . . .	26
II).9. Zwei-Niveau-System . . . . .	31
<b>III). gedämpfter HO- Langevingleichung</b>	<b>37</b>
III).1. klassisches System-Bad-Modell . . . . .	37
III).2. Quantenmechanischer HO . . . . .	39
III).3. Fluktuations-Dissipations-Theorem . . . . .	43
<b>IV) Offene Quantensysteme: Pfadintegraldarstellung</b>	<b>45</b>
IV).1. Formalismus . . . . .	45
IV).2. Harmonischer Oszillator . . . . .	47
IV).3. Imaginärzeitpfadintegral . . . . .	51
IV).4. Einfluss eines linear gekoppelten Oszillators . . . . .	53
IV).5. Übergang zum Oszillatorbad . . . . .	57
<b>V). Dissipatives Tunneln</b>	<b>60</b>
V).1. Qualitative Betrachtung, $\text{Im}F$ Methode . . . . .	60
V).2. Zerfallsrate für hohe Temperaturen . . . . .	63
V).3. Tunnelrate, Bounce . . . . .	64

# I). Klassische Dissipation: Relaxation und Fluktuationen

## I).1. harmonischer Oszillator

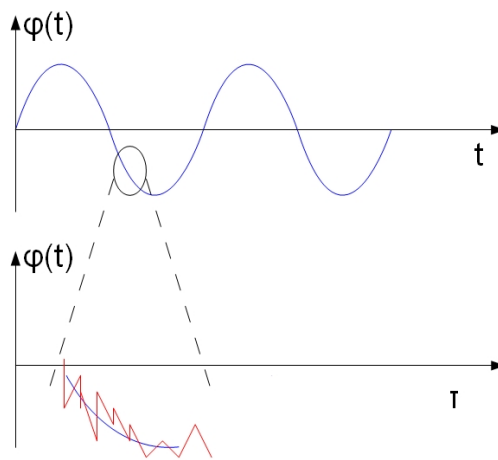


Abbildung I).1.: harmonischer Oszillator mit Fluktuationen

$$V(q) = \frac{m\omega_0^2}{2}q^2 \quad (\text{I}.1)$$

$$\dot{q} = \frac{p}{m} \quad (\text{I}.2)$$

$$\dot{p} = -V'(q) = -m\omega_0^2q \quad (\text{I}.3)$$

$$\Rightarrow m\ddot{q} + m\omega_0q + \dot{q}m\gamma = 0 \quad \Rightarrow q(t) = q(0)e^{-\lambda t} \quad \Rightarrow \lambda_{1/2} = \frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{4} - \omega_0^2} \quad (\text{I}.4)$$

mit  $\frac{\gamma}{2} < \omega_0$  : gedämpfte Oszillation

mit  $\frac{\gamma}{2} > \omega_0$  : keine Oszillation

äußere Kraft  $F(t)$ :

$$m\ddot{q} + m\omega_0^2q + m\gamma\dot{q} = F(t) \quad (\text{I}.5)$$

Fouriertrafo:

$$q(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{q}(\omega) e^{-i\omega t} \quad (\text{I}.6)$$

$$F(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{F}(\omega) e^{-i\omega t} \quad (\text{I.7})$$

in Gleichung I).5:

$$[-m\omega^2 + m\omega_0^2 - im\gamma\omega] \tilde{q}(\omega) = \tilde{F}(\omega) \quad (\text{I.8})$$

$$\Rightarrow \tilde{q}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \tilde{F}(\omega) = \tilde{\chi}(\omega) \tilde{F}(\omega) \quad (\text{I.9})$$

$\tilde{\chi}$  Antwortfunktion/Responsefunktion: unabhängig von Anregungskraft  
auch: dynamische Suszeptibilität vgl. elmag Suszeptibilität.

$$\chi(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{\chi}(\omega) e^{-i\omega t} \quad (\text{I.10})$$

Lösungsansatz: Residuensatz

Pole von  $\tilde{\chi}(\omega)$ :

$$\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega = 0 \quad \omega_{\pm} = -i\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}} \quad (\text{I.11})$$

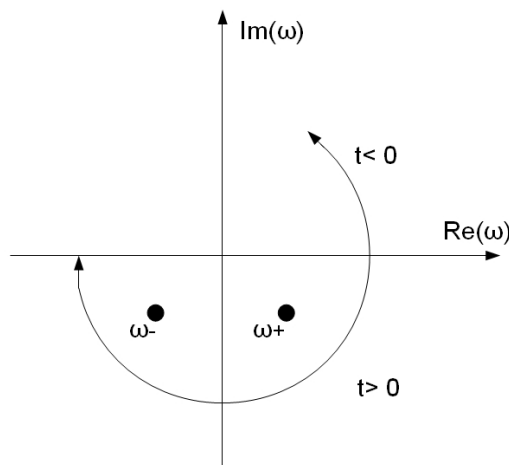


Abbildung I).2.: Pole

$$\Rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \underbrace{\frac{1}{(\omega - \omega_+)(\omega - \omega_-)}}_{?=-m\tilde{\chi}(\omega)} = \frac{2\pi i}{2\pi} \sum_{\text{Re mit Im}(\omega) < 0, \text{ da } t > 0} \frac{e^{-i\omega t}}{(\omega - \omega_+)(\omega - \omega_-)} \quad (\text{I.12})$$

betrachte:  $e^{-i\omega t}$ :

- $t > 0$ :  $\text{Im } \omega < 0$
- $t < 0$ :  $\text{Im } \omega > 0$

$$\Rightarrow \chi(t)|_{t < 0} = 0 \quad (\text{I.13})$$

$$\Rightarrow \omega_{\pm} = -i\frac{\gamma}{2} \pm \zeta \quad (\text{I.14})$$

mit  $\zeta = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}}$  für  $t > 0$

$$\Rightarrow \chi(t) = -\frac{1}{m} \frac{1}{\zeta} e^{-\frac{\gamma t}{2}} \sin(\zeta t) \quad (\text{I.15})$$

(bessere Formulierung mit Stufenfkt  $\Theta(t)$ )

$\tilde{q}(\omega) = \tilde{\chi}(\omega)\tilde{F}(\omega)$  ist Faltung

$$q(t) = \int_{-\infty}^{\infty} ds \underbrace{\chi(t-s)}_{\text{beschreibt Energieaufnahme/-abgabe-Verhältnis}} F(s)$$

$F(s) \neq 0$  nur für  $s \geq 0$

$$\Rightarrow q(t) = \int_0^{\infty} ds \chi(t-s)F(s) = \int_0^t ds \chi(t-s)F(s) \quad (\text{I.16})$$

, da  $\chi(t-s) = 0$  für  $s > t$  (Kausalität)

betrachte:

$$\tilde{\chi}(\omega) = \underbrace{\tilde{\chi}'(\omega)}_{\text{dispersiver Anteil}} + i \underbrace{\tilde{\chi}''(\omega)}_{\text{absorb. Anteil}} \quad (\text{I.17})$$

mit:

$$\tilde{\chi}'(\omega) = \frac{1}{m} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \quad (\text{I.18})$$

$$\tilde{\chi}''(\omega) = \frac{1}{m} \frac{\gamma}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \quad (\text{I.19})$$

## I).2. Absorbierte Energie

betrachte Kraft:

$$F(t) = F_0 \cos(\nu t) \quad \nu = \frac{2\pi}{T} \quad (\text{I.20})$$

für  $m\ddot{q} + m\omega_0^2 q + \gamma m\dot{q} = F(t)$  mit  $q(0) = 0$  und  $\dot{q}(0) = 0$

$$|\cdot q \Rightarrow \frac{d}{dt} E(t) = \underbrace{qF(t)}_{\text{Energiezufluss}} - \underbrace{\gamma m\dot{q}^2}_{\text{Energieabfluss}} \quad (\text{I.21})$$

Mittlere absorbierte Energie:

$$\frac{1}{T} \int_0^T dt \dot{q}(t)F(t) = \bar{W} \quad (\text{I.22})$$

$$\tilde{F}(\omega) = \frac{F_0}{2} (\delta(\omega + \nu) + \delta(\omega - \nu)) \quad (\text{I.23})$$

$$\tilde{q}(\omega) = \frac{F_0}{2} [\tilde{\chi}(\omega)\delta(\omega - \nu) + \tilde{\chi}(\omega)\delta(\omega + \nu)] = \frac{F_0}{2} [\tilde{\chi}(\nu)\delta(\omega - \nu) + \tilde{\chi}(-\nu)\delta(\omega + \nu)] \quad (\text{I.24})$$

$$q(t) = \frac{F_0}{2} \left[ \underbrace{\tilde{\chi}(\nu)}_{\tilde{\chi}'(\nu) + i\tilde{\chi}''(\nu)} e^{i\nu t} + \underbrace{\tilde{\chi}(-\nu)}_{\tilde{\chi}^{*\prime}(\nu) = \tilde{\chi}'(\nu) - i\tilde{\chi}''(\nu)} e^{-i\nu t} \right] \quad (\text{I.25})$$

$$= \frac{F_0}{2} \tilde{\chi}'(\nu) \chi \cos(\nu t) - i \frac{F_0}{2} \tilde{\chi}''(\nu) \chi i \sin(\nu t) = \dots \quad (\text{I.26})$$

es gilt:

$$\tilde{\chi}(\nu) = \tilde{\chi}^*(-\nu),$$

$$\text{da } \chi(t) \in \mathbb{R} \quad ; \quad \chi(t) = \int \tilde{\chi}(\nu) e^{-i\nu t} = \int \tilde{\chi}^*(\nu) e^{i\nu t} = \int \tilde{\chi}^*(-\nu) e^{-i\nu t}$$

$$\tilde{\chi}(-\nu) = \tilde{\chi}^*(\nu)$$

$$\dots = \tilde{\chi}'(\nu) F(t) - \tilde{\chi}(\nu) \frac{F''(t)}{\nu} \quad (\text{I.27})$$

neues Potential:

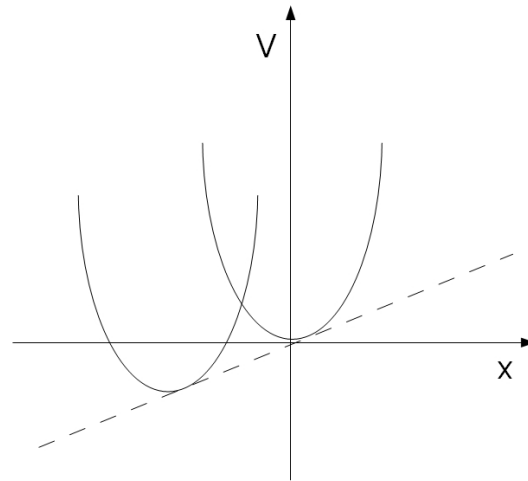


Abbildung I.3.: neues Pot

$$\frac{m\omega_0^2}{2} q^2 + Fq = \frac{m\omega_0^2}{2} \underbrace{\left(q + \frac{F}{m\omega_0^2}\right)^2}_{\text{Verzerrung}} - \underbrace{\frac{F^2}{m\omega_0^2}}_{\text{Verschiebung}} \quad (\text{I.28})$$

Also gilt:

$$\bar{W} = \frac{1}{T} \int_0^T dt \dot{q}(t) F(t) = -\frac{1}{T} \int_0^T dt \left[ \underbrace{F(t) \dot{F}(t)}_{\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} F(t)^2} \tilde{\chi}'(\nu) - \dot{F}^2(t) \frac{\tilde{\chi}''(\nu)}{\nu} \right] \quad (\text{I.29})$$

$$\bar{W} = -\frac{1}{T} \frac{1}{2} \underbrace{[F(t)^2 - F(0)^2]}_{=0} \tilde{\chi}'(\nu) + \underbrace{\frac{\nu}{2} F_0^2 \tilde{\chi}''(\nu)}_{F(t)=F_0 \cos(\nu t) \text{ einsetzen, integrieren}} \quad (\text{I.30})$$

$$\Rightarrow \bar{W} = \frac{\nu}{2} F_0^2 \tilde{\chi}''(\nu) > 0 \quad (\text{I.31})$$

klassisch gilt für  $m\ddot{q} + m\omega_0^2 q + \gamma m\dot{q} = 0$ ; Fall  $t \rightarrow \infty$  :

$$q(t) \rightarrow 0 \quad , \quad \dot{q}^2(t) \rightarrow 0$$

$$p(t) \rightarrow 0 \quad , \quad p^2(t) \rightarrow 0$$

letzte Zeile weg kopiert.

### I).3. Fluktuationen

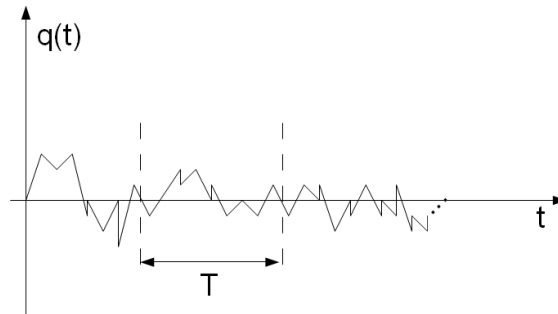


Abbildung I).4.: Fluktuationen

#### Zeitmittel

$$\bar{q}(T) = \frac{1}{T} \int_0^T dt q(t) \rightarrow 0 \quad \text{für } T \rightarrow \infty \quad (\text{I.32})$$

aber:  $\bar{q}^2(T) \neq 0$ , da negative Werte hier addiert werden.

#### Ensemblemittel

N Oszillatoren, die alle zu einem definierten Zeitpunkt betrachtet werden.

$$\langle q(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i(t) \rightarrow 0 \quad \text{für } N \rightarrow \infty \quad (\text{I.33})$$

aber:

$$\langle q^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i^2(t) \neq 0 \quad (\text{I.34})$$

Ergodenhypothese: Scharmittel=Zeitmittel für  $N \rightarrow \infty$

betrachte:

$$m\ddot{q}(t) + m\omega_0^2 q(t) + m\gamma\dot{q}(t) = 0 \quad (\text{I.35})$$

beschreibt Mittelwerte, also Übergang

↷

$$m \langle \ddot{q}(t) \rangle + m\omega_0^2 \langle q(t) \rangle + m\gamma \langle \dot{q}(t) \rangle = 0 \quad \text{ist korrekt} \quad (\text{I.36})$$

$$\Rightarrow \langle q(t) \rangle = \int_0^t ds \chi(t-s) F(s) \quad (\text{I.37})$$

im Gleichgewicht:

$$\langle \frac{p^2}{2m} \rangle_\beta = \frac{kT}{2} \quad (\text{I.38})$$

$$\langle \frac{m\omega_0^2 q^2}{2} \rangle_\beta = \frac{kT}{2} \quad (\text{I.39})$$

$$\langle pq \rangle = 0 \quad (\text{I.40})$$

$p > 0$  gleich wahrscheinlich wie  $p < 0$ . kein Nettostrom.

## Korrelationen

$$\langle q(t)q(t') \rangle_\beta = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i(t)q_i(t') = \langle q(t')q(t) \rangle_\beta \quad (\text{I.41})$$

Erwartung: im thermodynamischen GGW: (Stationarität, Ergebnis hängt nur von Zeitdauer und nicht von Zeitpunkt ab)

$$\langle q(t)q(t') \rangle_\beta = \langle q(t-t')q(0) \rangle_\beta \quad (\text{I.42})$$

$$\langle q(t+s)q(s) \rangle_\beta = \langle q(t)q(0) \rangle_\beta \quad (\text{I.43})$$

$$\frac{\partial}{\partial s} \langle q(t+s)q(s) \rangle_\beta = 0 \quad (\text{I.44})$$

## Onsagersche Regressionshypothese

(1931 - gilt nicht für QM) Abweichung vom Gleichgewicht in Folge spontaner Fluktuationen zerfallen im Mittel wie Abweichungen in Folge äußerer Einwirkungen. (vgl. Markov-Eigenschaft: das Verhalten eines Systems wird durch Orte, Impulse zu diesem Zeitpunkt, nicht aber zu früheren Zeitpunkten bestimmt)

(d.h. kein "Gedächtnis" von Systemen, wie sie in den Zustand gekommen sind. Gilt nur klassisch)

$$\langle q(t) \rangle = A(t) \langle q(0) \rangle + B(t) \langle p(0) \rangle \quad \text{durch äußere Kräfte} \quad (\text{I.45})$$

mit

$$A(t) = e^{-\frac{\gamma t}{2}} \left[ \cos \zeta t + \frac{\gamma}{2\zeta} \sin \zeta t \right] \quad (\text{I.46})$$

$$B(t) = \frac{1}{m\zeta} e^{-\frac{\gamma t}{2}} \sin \zeta t \quad (\text{I.47})$$

$$\zeta = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{m}} \quad (\text{I.48})$$

aus Gleichung I).45 folgt mit onsagerscher Regressionshypothese:

$$\langle q(t)q(0) \rangle_\beta = A(t) \underbrace{\langle q(0)q(0) \rangle_\beta}_{\frac{kT}{m\omega_0^2}} + B(t) \underbrace{\langle p(0)q(0) \rangle_\beta}_{=0} \quad (\text{durch spontane Fluktuation}) \quad (\text{I.49})$$

$$\Rightarrow C_{qq}(t) = \langle q(t)q(0) \rangle = \frac{kT}{m\omega_0^2} A(t) \quad (\text{I.50})$$

$$\Rightarrow C_{qp}(t) = \langle q(t)p(0) \rangle = M \langle q(t+s)\dot{q}(s) \rangle \quad (\text{I.51})$$

$$= M \underbrace{\left[ \frac{\partial}{\partial s} \langle q(t+s)q(s) \rangle \right]}_{=0} - M \langle \dot{q}(t+s)q(s) \rangle \quad (\text{I.52})$$

$$= - \langle p(t)q(0) \rangle \quad (\text{I.53})$$

$$= -M\dot{C}_{qq}(t) \quad (\text{I.54})$$

aus Vergleich:

**Dissipations-Fluktuations-Theorem:**

$$\chi(t) = \frac{-1}{k_B T} \Theta(t) \ddot{C}_{qq}(t)$$

lässt sich auch im Frequenzraum darstellen:

$$\chi(t) - \chi(-t) = \int d\omega e^{-i\omega t} \tilde{\chi}(\omega) - \underbrace{\int d\omega e^{i\omega t} \tilde{\chi}(\omega)}_{= \int d\omega e^{-i\omega t} \tilde{\chi}(-\omega) = \int d\omega e^{-i\omega t} \tilde{\chi}^*(\omega)} \quad (\text{I.55})$$

$$= 2i \int d\omega e^{-i\omega t} \tilde{\chi}''(\omega) \quad (\text{I.56})$$

$$\Rightarrow \chi(t) - \chi(-t) = 2i \int d\omega e^{-i\omega t} \tilde{\chi}''(\omega) \quad (\text{I.57})$$

$$= \frac{-1}{k_B T} \left[ \Theta(t) \dot{C}_{qq}(t) - \underbrace{\Theta(-t) \dot{C}_{qq}(t)}_{\text{verschwindet für } t>0} \right] \quad (\text{I.58})$$

$$= \frac{i}{k_B T} \int d\omega \tilde{C}_{qq}(\omega) e^{-i\omega t} \omega \quad (\text{I.59})$$

**Dissipations-Fluktuations-Theorem im  $\omega$ -Raum**

$$\tilde{\chi}''(\omega) = \frac{\omega}{2k_B T} \tilde{C}_{qq}(\omega)$$

(Ausblick) quantenmechanisch:  $\tilde{\chi}''(\omega) = \frac{1}{2\hbar} (1 - e^{-\omega\hbar\beta}) \tilde{C}_{qq}(\omega)$

## I).4. Langevingleichung

$$m\ddot{q} + \frac{\partial V}{\partial q} + m\gamma\dot{q} = \xi(t) \quad (\text{I.60})$$

$$q(t) = q_{\text{homogen}}(t) + q_{\text{inh}}(t) \quad (\text{I.61})$$

$$q_{inh}(t) = \int_0^t \chi(t-s)\xi(s)ds \quad (I.62)$$

mit  $\langle \xi(t) \rangle = 0$

$$\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = 2m\gamma k_B T \gamma(t-s) \quad (I.63)$$

$$\langle q(t) \rangle = \langle q_{homogen}(t) \rangle + \underbrace{\langle q_{inh}(t) \rangle}_{=0} \quad (I.64)$$

$$\Rightarrow \langle q(t)q(0) \rangle = \dots \text{Irgendwashypothese (vgl. Übung)} \quad (I.65)$$

**verallgemeinerte Langevingleichung:**

$$m\ddot{q} + \frac{\partial V}{\partial q} + m \int_0^t \underbrace{\gamma(t-s)}_{\text{Gedächtnisfunktion}} \dot{q}(s) = \xi(t) \quad (I.66)$$

mit  $\langle \xi(t) \rangle = 0$

wegen  $\delta$ -Fkt an Grenze:  $\int_0^t ds \delta(t-s) = \frac{1}{2}$

Korrelationen:  $\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = m\gamma(t-s)k_B T$

$\gamma(t-s) = 2\gamma\delta(t-s)$

höhere Momente:  $\langle \xi(t)\xi(t')\xi(t'') \rangle \rightarrow \text{Kumulanten}=0$

┌ **Einschub:Kumulantenentwicklung**

P(x)

$\langle x^k \rangle = \int dx x^k P(x)$

erzeugende Funktion:  $F(\alpha) = \langle e^{i\alpha x} \rangle = \int dx e^{i\alpha x} P(x)$

entspricht Fouriertrafo von P(x)

$$\left(\frac{1}{i} \frac{d}{d\alpha}\right)^k \langle e^{i\alpha x} \rangle |_{\alpha=0} = \langle x^k \rangle \quad (I.67)$$

$$F(\alpha) = e^{\sum_k (c_k/k!)\alpha^k} \quad (I.68)$$

$$\Rightarrow c_k?$$

$c_1 = \langle x \rangle$

$c_2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$

Vorteil von Kumulanten ggü Momente

$$P(x) \propto e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma}} \quad (I.69)$$

$\langle x \rangle = x_0$

$\Rightarrow$  eine Gaußverteilung hat nur 2 Kumulanten, aber unendlich viele Momente

└

## Numerische Realisierung

Langevingl.

$q_0, p_0$  bei  $t=0$ .

$q(t), p(t)$

Es gibt keine Bewegungsgleichung zu  $\xi \rightarrow$  Zufallsrealisierungen

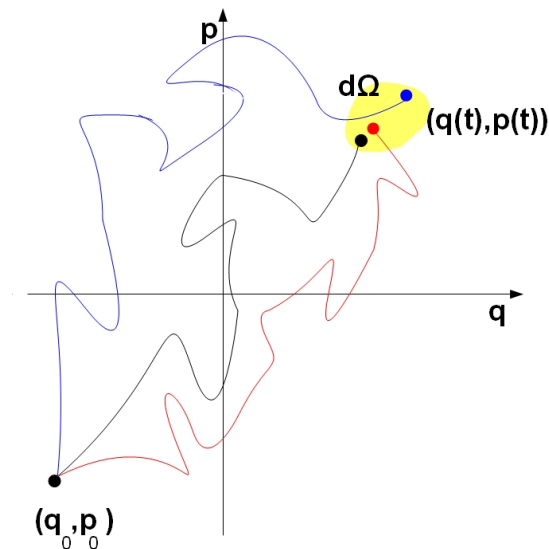
Mittelwert über Realisierungen  $=0$

$\dot{q}(t_j) = \frac{q(t_{j+1}) - q(t_j)}{t_{j+1} - t_j}$  einsetzen in Langevin gl.

$\Rightarrow q_\xi(t), q_{\bar{\xi}}(t), q_{\tilde{\xi}}(t)$

$\Rightarrow \langle q(t) \rangle$

**Gibt es eine Bewegungsgleichung, die Mittelwert schon eingebaut hat?**



$$\langle q(t) \rangle = \int q W(p, q, t) dq dp$$

$$W(p, q, t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} W_\beta(p, q) \propto e^{-\beta H(p, q)}$$

Bewegungsgleichung für  $W$ : Fokker-Planck-Gleichung

Wie sieht  $W(q, p, t)$  aus?

- $W(p, q, t) = \int dq_0 dp_0 W(p_0, q_0, 0) \delta(q - q(t)) \delta(p - p(t))$   
mit stochastischer Kraft:  
 $W(p, q, t) = \int dq_0 dp_0 W(p_0, q_0, 0) \langle \delta(q - q(t)) \delta(p - p(t)) \rangle$   
 $\int dq dp W(p, q, t) = \int dq_0 dp_0 \langle 1 \rangle_\xi W(p_0, q_0, 0) = 1$
- $W(p, q, t) \geq 0$

Resultat: Die Dynamik von  $W(p, q, t)$  besteht aus einer Drift (deterministisch) und einem Diffusionsanteil (zufällig)

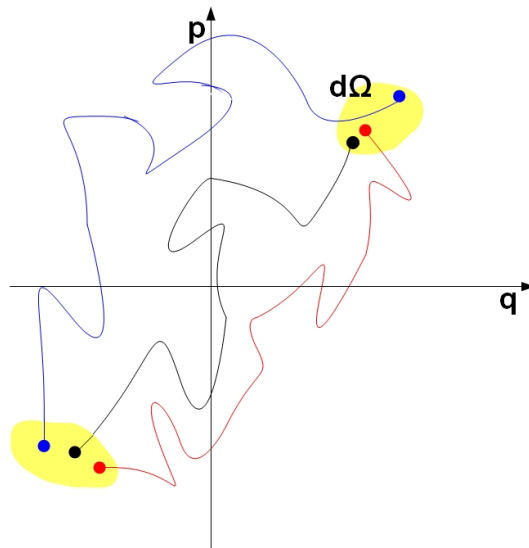


Abbildung I).5.: Space

### Drift

$$\frac{dW}{dt}|_{Drift} = \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial W}{\partial q} \dot{q} \stackrel{\text{Liouville}}{=} 0 \quad (\text{I}.70)$$

mit

$$\dot{q} = \frac{p}{m} \quad \dot{p}|_{Drift} = -V'(q) - \gamma p \quad (\text{I}.71)$$

$$\Rightarrow \frac{dW}{dt}|_{Drift} = \frac{-p}{m} \frac{\partial W}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial p} [V'(q) + \gamma p] W \quad (\text{I}.72)$$

### Diffusion

vgl Seminar:

$$\frac{\partial W(p, q, t)}{\partial t} = \left( \frac{-p}{m} \frac{\partial}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial p} [V'(q) + \gamma p] + \underbrace{\frac{k_B T \gamma m}{\int_0^t d\tau \langle \xi(t) \xi(0) \rangle}}_{\text{diffusion}} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right) W(p, q, t) \quad (\text{I}.73)$$

### Gleichgewicht

$$\frac{\partial W_\beta}{\partial t} = 0 \quad \checkmark \quad (\text{I}.74)$$

# II). Offene Quantensysteme 1

## II).1. Modellierung

Wie beschreibt man in der QM Dissipation konsistent?  
 Schrödingergl modifizieren: addiere Dämpfung + Fluktuationen  
 → nicht konsistent  $\nexists$

$$H(p,q) \rightarrow H(\hat{p}, \hat{q}) \quad [\hat{p}, \hat{q}] = \frac{\hbar}{i}$$

### System+ Reservoir Modell

$$H = H_S + H_B + H_I$$

- Bad im thermodyn GGW
- Quantisierung  $\checkmark$
- $[H_S, H_B] = 0 \quad [H_S, H_I] \neq 0 \quad [H_B, H_I] \neq 0$

## II).2. Liouville von Neumann Gleichung

$$i\hbar|\dot{\Psi}(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow \Psi(t) = U(t, t_0)\Psi(t_0) \text{ mit } U(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$$

Ensemble von Zuständen: Dichtematrix

$$\rho(t_0) = \sum_{\alpha} P_{\alpha} |\Psi_{\alpha}(t_0)\rangle \langle \Psi_{\alpha}(t_0)| \quad (\text{II}.1)$$

$\{|\Psi_{\alpha}(t)\rangle\}$  sei vollständige Basis.

$\hat{A}$  Observable:  $\langle \Psi_{\alpha} | \hat{A} | \Psi_{\alpha} \rangle = A_{\alpha}$

$$\langle \hat{A} \rangle_{t_0} = Sp\{\hat{A}\rho(t_0)\} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \langle \Psi_{\alpha}(t_0) | \hat{A} | \Psi_{\alpha}(t_0) \rangle = \sum_{\alpha} P_{\alpha} A_{\alpha} \quad (\text{II}.2)$$

$$P_{\alpha} \geq 0 \quad Sp\{\rho(t_0)\} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} = 1$$

Bsp für  $P_{\alpha}$  in Thermodynamik:

$$P_{\alpha} = \frac{e^{-\beta E_{\alpha}}}{Z} \quad (\text{II}.3)$$

$$\rho(t) = \sum_{\alpha} P_{\alpha} U(t, t_0) |\Psi_{\alpha}(t_0)\rangle \langle \Psi_{\alpha}(t_0)| U(t, t_0)^{\dagger} = U(t, t_0) \rho(t_0) U(t, t_0)^{\dagger} \quad (\text{II}.4)$$

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = i\hbar \left( \frac{-i}{\hbar} \right) H\rho(t) - \rho(t)H \quad (\text{II}.5)$$

$$\boxed{i\hbar \dot{\rho}(t) = [H, \rho(t)]}$$

### II).3. Wechselwirkungsbild

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_I \\ U(t, t_0) &= e^{\frac{-i}{\hbar} H(t-t_0)} \\ U_0(t, t_0) &= e^{\frac{-i}{\hbar} H_0(t-t_0)} \\ U_I(t, t_0) &= U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) \end{aligned}$$

$$\langle A(t) \rangle = Sp\{U^\dagger(t, t_0) A(t_0) U(t, t_0) \rho(t_0)\} \quad (\text{II}.6)$$

$$= Sp\{A(t_0) U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0)\} \quad (\text{II}.7)$$

$$= Sp\{U_0^\dagger(t, t_0) A(t_0) U_0(t, t_0) U_I(t, t_0) \rho(t_0) U_I^\dagger(t, t_0)\} \quad (\text{II}.8)$$

$$A_I(t) = U_0^\dagger(t, t_0) A(t_0) U_0(t, t_0) \quad (\text{II}.9)$$

$$\rho_I(t) = U_I(t, t_0) \rho(t_0) U_I^\dagger(t, t_0) \quad (\text{II}.10)$$

$$i\hbar \frac{d\rho_I(t)}{dt} = ? \quad (\text{II}.11)$$

$$i\hbar \frac{dU_I(t, t_0)}{dt} = -H_0 U_I(t, t_0) + \underbrace{U_0^\dagger H_I U_0}_{H_I(t)} U_I + H_0 U_I = H_I(t) U_I(t, t_0) \quad (\text{II}.12)$$

Liouville von Neumanngleichung im Wechselwirkungs-Bild:

$$\boxed{i\hbar \frac{d\rho_I(t)}{dt} = [H_I(t), \rho_I(t)]}$$

$$\rho_I(t) = \rho_I(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' [H_I(t'), \rho_I(t')] \quad (\text{II}.13)$$

$$\frac{d}{dt} \rho_I(t) = \frac{-i}{\hbar} [H_I(t), \rho_I(t_0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' [H_I(t), [H_I(t'), \rho_I(t')]] \quad (\text{II}.14)$$

= Potenzreihe in  $H_I$ .

Annahme:  $H_I$  sehr klein  $\rightarrow$  entwickeln bis 2. Ordnung

reduzierter Dichteoperator:  $\boxed{\rho_{S,I}(t) = Sp\{\rho_I(t)\}}$

$$\langle \hat{A}_S \rangle = Sp_S\{Sp_B\{\hat{A}_{S,I}(t) \rho_I(t)\}\} = Sp_S\{\hat{A}_{S,I}(t) \rho_{I,S}(t)\} \quad (\text{II}.15)$$

## II).4. Mastergleichung

Annahmen:

- Fluktuation des Bades ist Gaußförmig  $\rightarrow$  ZGWS
- Bad ist so riesig, dass es im thermodynamischen Gleichgewicht bleibt und nicht vom System gestört wird.

Aus der Integration der Liouville von Neumann Gleichung folgt die Bewegungsgleichung der Dichtematrix im Wechselwirkungsbild:

$$\frac{d}{dt}\rho_{S,I}(t) = \underbrace{\frac{-i}{\hbar} Sp_B\{[H_I(t), \rho_I(t_0)]\}}_{=0 \text{ (siehe *)}} - \frac{1}{\hbar^2} Sp_B\left\{\int_{t_0}^t dt' [H_I(t), [H_I(t'), \rho_I(t')]]\right\} \quad (\text{II.16})$$

\*:

$$Sp_B\{H_I(t), \rho_I(t_0)\} = Sp_B\{e^{\frac{i}{\hbar}H_S(t-t_0)} e^{\frac{i}{\hbar}H_B(t-t_0)} H_I(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}H_S(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar}H_B(t-t_0)} \rho_S(t_0) \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B}\} \quad (\text{II.17})$$

$$= Sp_B\{e^{\frac{i}{\hbar}H_S(t-t_0)} H_I(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}H_S(t-t_0)} \rho_S(t_0) \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B}\} \quad (\text{II.18})$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}H_S(t-t_0)} \underbrace{Sp\{H_I(t_0) \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B}\}}_{\langle H_I(t_0) \rangle_B = \langle H_I(t) \rangle_B = 0} e^{-\frac{i}{\hbar}H_S(t-t_0)} \rho_S(t_0) \quad (\text{II.19})$$

im Mittel verschwindet der Einfluss des Bades auf das System

### Markov-Näherung

$$\frac{d}{dt}\rho_{S,I}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} Sp_B\left\{\int_{t_0}^t dt' [H_I(t), [H_I(t'), \rho_I(t')]]\right\} \quad (\text{II.20})$$

2. Ordnung Störungstheorie:  $\rightarrow$  Störoperator  $H_I$  taucht in 2. Ordnung auf

$$\Rightarrow \rho_I(t') \approx \rho_{I,S}(t') \rho_{I,B}(t') = \rho_{I,S}(t') \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B}$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{S,I}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' Sp_B\left\{[H_I(t), [H_I(t'), \rho_{I,S}(t') \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B}]]\right\} \quad (\text{II.21})$$

$\Rightarrow \frac{d}{dt}\rho_{S,I}(t)$  bestimmt durch  $\rho_{S,I}(t')$ ,  $t_0 \leq t' \leq t$ : "nicht markovsche Dynamik", retardierte Dynamik

$$t' \rightarrow t - t', \quad t_0 = 0$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{S,I}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' Sp_B\left\{[H_I(t), [H_I(t-t'), \rho_{S,I}(t-t') \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B}]]\right\} \quad (\text{II.22})$$

Annahme: Wechselwirkung sei nur durch kleinen Bereich der Vergangenheit definiert → kleine memory time. Einfluss des Bades ist bestimmt auf der Gedächtniszeit  $\tau_B$

**Markov-Näherung**  $\int_0^t dt' \dots \approx \int_0^{\tau_B} dt' \dots$

$\rho_{S,I}(t, t') \approx \rho_{S,I}$  falls die Dynamik von  $\rho_S$  langsamer ist.  
 $\tau_B \ll$  relevante Zeitskala von  $\rho_{S,I}$

**Redfieldgleichung:**  $\frac{d}{dt} \rho_{S,I}(t) = -\frac{i}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' Sp\{[H_I(t), [H_I(t-t'), \rho_{S,I}(t) \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B}]]\}$

**Vereinfachungen**

- "Born"  $\rho_I(t-t')$   
 $\rho_I(t-t') \approx \rho_{S,I}(t-t') \rho_{B,\beta}$
- "Markov", coarse graining

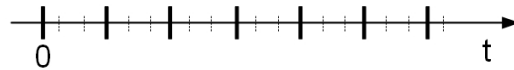


Abbildung II).1.: Space

$\rho_{S,I}(t-t') \approx \rho_{S,I}(t)$

⇒ Born-Markov-Näherung

Redfieldgleichung:  $\frac{d}{dt} \rho_{S,I}(t) = -\frac{i}{\hbar^2} \int_0^{t \rightarrow \infty} dt' Sp_B\{[H_I(t), [H_I(t-t'), \rho_{S,I}(t) \rho_{B,\beta}]]\}$

im Schrödingerbild:  $\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_S, \rho_S(t)] - \underbrace{\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' Sp_B\{[H_I, [H_I(-t'), \rho_S(t) \rho_{B,\beta}]]\}}_{K[\rho_S]}$

**II).5. Gültigkeit**

memory-Zeit des Bades  $\tau_B \ll \tau_R$

$\tau_B = \frac{1}{\omega_c}$  cut-off Frequenz

quantenmechanische Zeitskala:  $\tau_B = \hbar\beta$

→  $\tau_B = \max\{\frac{1}{\omega_c}, \hbar\beta\}$

welches ist die typische Zeitskala auf der harmonischer Oszillator abfällt?

→  $\tau_R = \frac{1}{\gamma}$

$$\gamma \hbar \beta \ll 1; \quad \frac{\gamma}{\omega_c} \ll 1$$

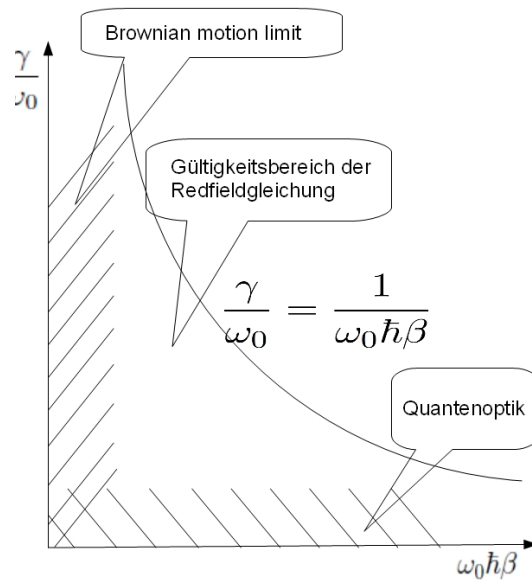


Abbildung II).2.: Gültigkeitsbereich

### Quantenoptik

$$\frac{\gamma}{\omega_0} \ll 1 \text{ (z.B. } 10^{-6}\text{)}$$

$\omega_0 \hbar \beta$  groß

Redfieldgleichung weiter vereinfachbar zu quantenoptischer Mastergleichung.

### Brownian motion limit

$$\frac{\gamma}{\omega_0} \text{ groß, } \omega_0 \hbar \beta \ll 1$$

klassischer Bereich:  $\hbar \rightarrow 0$

geht über in Fokker-Planck-Gleichung

## II).6. Quantum Brownian Motion

$$H_S = \frac{p^2}{2m} + V(q) \tag{II).23}$$

$$[p, q] = -i\hbar \tag{II).24}$$

$$H_I = \underbrace{Q}_{\text{Systemoperator}} \cdot \underbrace{X}_{\text{Badoperator}} \tag{II).25}$$

im Folgenden  $Q = q$

$$K[\rho_S] = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt \text{Sp}_B \{ -\rho_{B,\beta} \quad XX(-\tau)QQ(-\tau)\rho_S(t) \} \quad (\text{II}.26)$$

$$+\rho_{B,\beta} \quad X(-\tau)XQ\rho_S(t)Q(-\tau) \quad (\text{II}.27)$$

$$+\rho_{B,\beta} \quad XX(-\tau)Q(-\tau)\rho_S(t)Q \quad (\text{II}.28)$$

$$-\rho_{B,\beta} \quad X(-\tau)X\rho_S(t)Q(-\tau)Q \quad (\text{II}.29)$$

$$(\text{II}.30)$$

### Gleichgewichtskorrelationsfkt

$$\langle XX(-\tau) \rangle = \text{Sp}_B \left\{ \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B} XX(-\tau) \right\} \quad (\text{II}.31)$$

$$= \frac{1}{2} \langle XX(-\tau) + X(-\tau)X \rangle + \frac{1}{2} \langle XX(-\tau) - X(-\tau)X \rangle \quad (\text{II}.32)$$

$$= C_+(\tau) - iC_-(\tau) \quad (\text{II}.33)$$

$$C_+(\tau) = \frac{1}{2} \langle \{X, X(-\tau)\} \rangle \quad (\text{II}.34)$$

$$C_-(\tau) = \frac{i}{2} \langle [X, X(-\tau)] \rangle \quad (\text{II}.35)$$

$$K[\rho_S] = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \left\{ \frac{i}{2} C_-(\tau) [Q, \{Q(-\tau), \rho_S(t)\}] - \frac{1}{2} C_+(\tau) [Q, [Q(-\tau), \rho_S(t)]] \right\} \quad (\text{II}.36)$$

**Fall:**  $\frac{\gamma}{\omega_0}$  groß,  $\omega_0 \hbar \beta \ll 1$

$$Q(-\tau) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_S \tau} Q e^{\frac{i}{\hbar} H_S \tau} \approx Q - \frac{i}{\hbar} [H_S, Q] \tau$$

**Fall:**  $\frac{\gamma}{\omega_0} \ll 1$

$$Q(-\tau) \approx Q - \frac{p}{m} \tau$$

$$K[\rho_S] = \underbrace{\frac{i}{2\hbar^2} \int_0^\infty d\tau C_-(\tau)[Q, \{Q, \rho_S(t)\}]}_{d_-} \quad (\text{II.37})$$

$$- \underbrace{\frac{i}{2\hbar^2 m} \int_0^\infty d\tau C_-(\tau) \tau [Q, \{P, \rho_S(t)\}]}_{d_-^r} \quad (\text{II.38})$$

$$- \underbrace{\frac{1}{2\hbar^2} \int_0^\infty d\tau C_+(\tau)[Q, \{Q, \rho_S(t)\}]}_{d_+} \quad (\text{II.39})$$

$$+ \underbrace{\frac{1}{2\hbar^2 m} \int_0^\infty d\tau C_+(\tau) \tau [Q, \{P, \rho_S(t)\}]}_{d_+^r} \quad (\text{II.40})$$

$$(\text{II.41})$$

$$[Q, \{Q, \rho_S\}] = [Q^2, \rho_S] \quad (\text{II.42})$$

$$K[\rho_S] = \frac{i}{\hbar} \frac{d_-}{2\hbar} [Q^2, \rho_S] - \frac{i}{2m\hbar^2} d_-^r [Q, \{P, \rho_S(t)\}] - \frac{1}{2\hbar^2} d_+ [Q, [Q, \rho_S(t)]] + \frac{1}{2m\hbar^2} d_+^r [Q, [P, \rho_S(t)]] \quad (\text{II.43})$$

$$H_B = \sum_n \frac{P_n^2}{2m_n} + \frac{m_n \omega_n^2}{2} X_n^2 \quad (\text{II.44})$$

$$H_I = Q \cdot \underbrace{\sum_n \kappa_n X_n}_X \rightarrow \langle H_I \rangle_B = 0 \quad (\text{II.45})$$

Modellierung durch Reservoir aus harm Oszillatoren  
 $\Leftrightarrow$  Bad gehorcht Gaußscher Statistik

$$\langle XX(-\tau) \rangle = \sum_{n,n'} \kappa_n \kappa_{n'} \langle X_n X_{n'}(-\tau) \rangle \quad (\text{II.46})$$

$$= \sum_n \kappa_n^2 \langle X_n X_n(-\tau) \rangle \quad (\text{II.47})$$

$$= \sum_n \kappa_n^2 \left\{ \frac{1}{2} \langle X_n X_n(-\tau) + X_n(-\tau) X_n \rangle + \frac{1}{2} \langle X_n X_n(-\tau) - X_n(-\tau) X_n \rangle \right\} \quad (\text{II.48})$$

$$X_n(\tau) = X_n(0) \cos \omega_n \tau + \frac{P_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n \tau) \quad (\text{II.49})$$

[ Nebenrechnung:

$$[X_n, X_n(-\tau)] = -[X_n(0), \frac{P_n(0)}{m_n \omega_n}] \sin \omega_n \tau = -i\hbar \frac{\sin \omega_n \tau}{m_n \omega_n} \quad (\text{II.50})$$

$$\langle [X_n, X_n(-\tau)] \rangle = Sp_B \left\{ [X_n, X_n(-\tau)] \frac{e^{-\beta H_B}}{Z} \right\} = -i\hbar \frac{\sin \omega_n \tau}{m_n \omega_n} \quad (\text{II}.51)$$

$$\langle \{X_n, X_n(-\tau)\} \rangle = 2 \langle X_n(0)^2 \rangle \cos(\omega_n \tau) - \underbrace{\langle X_n(0)P_n(0) + P_n(0)X_n(0) \rangle}_{=0} \frac{\sin(\omega_n \tau)}{m_n \omega_n} \quad (\text{II}.52)$$

$$\langle X_n(0)^2 \rangle = \frac{\hbar}{m_n \omega_n} \coth\left(\frac{\omega_n \hbar \beta}{2}\right) \quad (\text{II}.53)$$

$\omega_n \hbar \beta \rightarrow 0$ :

$$\frac{\hbar}{m_n \omega_n} \frac{2}{\omega_n \hbar \beta} = \frac{1}{m_n \omega_n^2 \beta} \quad (\text{II}.54)$$

$$\langle \{X_n X_n(-\tau)\} \rangle = \frac{\hbar}{m_n \omega_n} \coth\left(\frac{\omega_n \hbar \beta}{2}\right) \cos(\omega_n \tau) \quad (\text{II}.55)$$

]

$$\langle XX(-\tau) \rangle = \sum_n \frac{\kappa_n^2}{2} \left\{ \frac{\hbar^2}{m_n \omega_n} \coth\left(\frac{\omega_n \hbar \beta}{2}\right) \cos(\omega_n \tau) - \frac{i\hbar}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n \tau) \right\} \quad (\text{II}.56)$$

### spektrale Dichte

$$J(\omega) = \sum_n \frac{\pi \kappa_n^2}{2\omega_n m_n} \delta(\omega - \omega_n) \quad (\text{II}.57)$$

$$\sum_n f(\omega_n) \rightsquigarrow \int d\omega J(\omega) f(\omega) \quad (\text{II}.58)$$

$$\langle XX(-\tau) \rangle = \frac{1}{2} C_+(\tau) - \frac{i}{2} C_-(\tau) \quad (\text{II}.59)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_n i c_n^2 \left\{ \frac{\hbar}{m_n \omega_c} \coth\left(\frac{\omega_n \hbar \beta}{2}\right) \cos(\omega_n t) - \frac{i\hbar}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t) \right\} \quad (\text{II}.60)$$

$$\langle XX(-\tau) \rangle = \hbar \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left[ \coth\left(\frac{\omega \hbar \beta}{2}\right) \cos(\omega \tau) - i \sin(\omega \tau) \right] \quad (\text{II}.61)$$

wähle  $J(\omega)$  so, dass  $\langle XX(-\tau) \rangle$  hinreichend schnell zerfällt.

### hohe Temperaturen

$\hbar \beta \rightarrow 0$

$$\langle XX(-\tau) \rangle = \frac{\hbar 2}{\hbar \beta} \int_0^{\text{inf ty}} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left[ \frac{\cos(\omega \tau)}{\omega} - i \frac{\hbar \beta}{2} \sin(\omega \tau) \right] \approx \frac{2}{\beta} \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega \tau) \quad (\text{II}.62)$$

$J(\omega) \propto \omega$

$$\langle XX(-\tau) \rangle \propto \frac{2}{\beta} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \cos(\omega\tau) \quad (\text{II.63})$$

[ Nebenrechnung:

$$\int_0^{\infty} d\omega \cos(\omega\tau) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} (e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau}) \quad (\text{II.64})$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega\tau} \quad (\text{II.65})$$

$$= \frac{1}{2} 2\pi\delta(\tau) \quad (\text{II.66})$$

↳  
 → erlaubte spektrale Baddichten verhalten sich für kleinere  $\omega$  wie  $J(\omega) \propto \omega$  und besitzen einen "großen" cut off  $\omega_c \gg \gamma$   
 glattes  $J(\omega)$  bedeutet Poincarésche Wiederkehrzeit  $\rightarrow \infty$

$J(\omega) = m\gamma\omega$  eventuell bis zu einer cut-off-Frequenz  $\omega_c$

"d"s berechnen

- $d_-$

$$d_- = \int_0^{\infty} d\tau C_-(\tau) \quad (\text{II.67})$$

$$= 2\hbar m\gamma \int_0^{\infty} d\tau \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \omega \sin(\omega\tau) \quad (\text{II.68})$$

$$= 2\hbar m\gamma \int_0^{\infty} d\tau \left(-\frac{d}{d\tau}\right) \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \cos(\omega\tau)}_{\delta(\tau)} \quad (\text{II.69})$$

$$= 2\hbar m\gamma \int_0^{\infty} d\tau \left[-\frac{d}{d\tau} \delta(\tau)\right] \quad (\text{II.70})$$

$$= 2\hbar m\gamma \left[-\delta(\tau)\Big|_0^{\infty} + \underbrace{\int_0^{\infty} d\tau \delta(\tau) \frac{d}{d\tau} 1}_{=0}\right] \quad (\text{II.71})$$

$$= "2\hbar m\gamma \delta(\tau = 0)" \quad (\text{II.72})$$

[ Einschub:

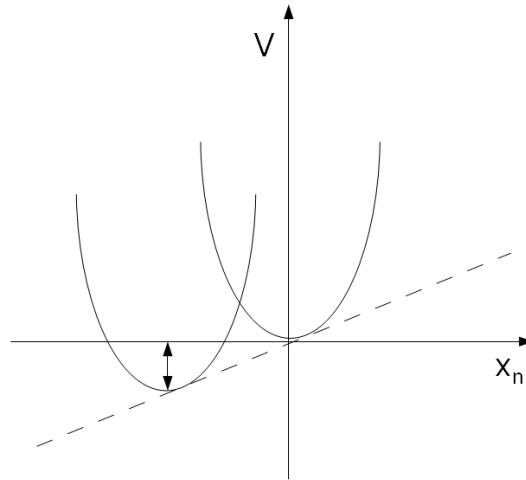


Abbildung II).3.: Renormierung

$$\frac{m_n \omega_n^2}{2} x_n^2 + Q x_n \kappa_n = \frac{m_n \omega_n^2}{2} \left( x_n + \frac{Q \kappa_n}{m_n \omega_n^2} \right)^2 - \frac{Q^2 \kappa_n^2}{m_n \omega_n^2} \quad (\text{II).73}$$

↔ in Skizze

└

•

$$d_-^\tau = \int_0^\infty d\tau \tau C_-(\tau) = 2\hbar m \gamma \int_0^\infty d\tau \tau \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \omega \sin(\omega \tau) \quad (\text{II).74}$$

$$= 2\hbar m \gamma \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \omega \pi \left[ -\frac{d}{d\omega} \delta(\omega) \right] \quad (\text{II).75}$$

$$= 2\hbar m \gamma \underbrace{\int_0^\infty d\omega \delta(\omega)}_{\frac{1}{2}} \quad (\text{II).76}$$

$$= \hbar m \gamma \quad (\text{II).77}$$

•

$$d_+ = \int_0^\infty d\tau C_+(\tau) = 2\hbar m \gamma \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \omega \coth\left(\frac{\omega \hbar \beta}{2}\right) \delta(\omega) \pi \quad (\text{II.78})$$

$$= 2\hbar m \gamma \frac{1}{2} \underbrace{\lim_{\omega \rightarrow 0} \omega \coth\left(\frac{\omega \hbar \beta}{2}\right)}_{\frac{2}{\hbar \beta}} \quad (\text{II.79})$$

$$= \frac{2m\gamma}{\beta} \quad (\text{II.80})$$

•

$$d_+^\tau = \int_0^\infty d\tau C_+(\tau) \tau = 2\hbar m \gamma \int_0^\infty d\tau \tau \int_0^{\infty \rightsquigarrow \omega_c} \frac{d\omega}{\pi} \omega \coth\left(\frac{\omega \hbar \beta}{2}\right) \cosh(\omega \tau) \quad (\text{II.81})$$

$$\omega_c \hbar \beta \ll 1 \quad (\text{II.82})$$

$$d_+^\tau \approx 2\hbar m \gamma \frac{2}{\hbar \beta} \int_0^\infty d\tau \tau \underbrace{\int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \cos(\omega \tau)}_{\text{siehe NR}} \quad (\text{II.83})$$

[ Nebenrechnung:

$$= \text{Re} \int_0^{\omega_c} \frac{d\omega}{\pi} e^{i\omega \tau} e^{-\epsilon \omega} \quad (\text{II.84})$$

$$= \text{Re} \left\{ \frac{1}{\pi} \frac{1}{\epsilon - i\tau} (1 - e^{-(\epsilon - i\tau)\omega_c}) \right\} \quad (\text{II.85})$$

$$\approx \frac{1}{\pi} \text{Re} \left\{ \frac{1}{\epsilon - i\tau} \right\} = \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{\epsilon^2 + \tau^2} \quad (\text{II.86})$$

$$\int_0^\infty \frac{d\tau}{\pi} \tau \frac{\epsilon}{\epsilon^2 + \tau^2} = \frac{\epsilon}{\pi} \int_0^\infty d\tau \frac{\tau}{\epsilon^2 + \tau^2} = \frac{\epsilon}{\pi} f_\epsilon \quad (\text{II.87})$$

└

$$d_+^\tau \approx \frac{2\hbar m \gamma 2}{\hbar \beta} \frac{\epsilon}{\pi} f_\epsilon = \frac{4m\gamma}{\beta} \frac{\epsilon}{\pi} f_\epsilon \quad (\text{II.88})$$

→ zu vernachlässigen

⇒ **Caldeira-Leggett-Mastergleichung:**  $\boxed{\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_S, \rho_S] - \frac{i\gamma}{2\hbar} [Q, \{P, \rho_S\}] - \frac{m\gamma k_B T}{\hbar^2} [Q, [Q, \rho_S]]}$

$$\tilde{H}_S = \frac{p^2}{2m} + \tilde{V}(Q), \quad \tilde{V}(Q) = V(Q) - m\gamma \delta(0) Q^2 \quad (\text{II.89})$$

Renormiere das Potential  $V \rightarrow \tilde{V}$  und betrachte  $\tilde{V}$  als das eigentliche Potential

## II).7. Quanten-Brownsche-Dynamik: Darstellung

in Ortsdarstellung:

$$\langle q|\rho_S(t)|q'\rangle = \rho_S(q, q', t) \quad Q|q\rangle = q|q\rangle \quad (\text{II}).90$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_S(q, q', t) = \left[ \frac{i\hbar}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{\partial^2}{\partial q'^2} \right) - \frac{i}{\hbar} [V(q) - V(q')] - \frac{\gamma}{2}(q - q') \left( \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q'} \right) - \frac{m\gamma}{\hbar^2\beta} (q - q')^2 \right] \rho_S(q, q', t) \quad (\text{II}).91$$

$$r = \frac{q + q'}{2} \quad x = q - q'$$

$$\Leftrightarrow q = r + \frac{x}{2}, \quad q' = r - \frac{x}{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_S(x, r, t) = \left[ \frac{i\hbar}{m} \frac{\partial^2}{\partial x \partial r} - \frac{i}{\hbar} [V(r + \frac{x}{2}) - V(r - \frac{x}{2})] - \gamma x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{m\gamma}{\hbar^2\beta} x^2 \right] \rho_S(x, r, t) \quad (\text{II}).92$$

### klassischer limes

$x \rightarrow 0 \quad \hbar \rightarrow 0$ : Term mit  $\frac{m\gamma}{\hbar^2\beta} x^2$  wird dominant

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_S(x, r, t) \approx -\frac{m\gamma}{\hbar^2\beta} x^2 \rho_S(x, r, t) \quad (\text{II}).93$$

$$\rho_S(x, r, t) = e^{-\frac{m\gamma}{\hbar^2\beta} x^2 t} \rho_S(x, r, 0) \quad (\text{II}).94$$

Zeitskala:

$$\tau_D \propto \frac{\hbar^2\beta}{m\gamma x^2} = \frac{2}{\gamma} \left( \frac{\lambda_B}{x} \right)^2 = 2\tau_R \left( \frac{\lambda_B}{x} \right)^2 \quad (\text{II}).95$$

mit:  $\lambda_B = \frac{\hbar}{\sqrt{2mk_B T}}$

Zeitskala auf der anfängliche Nichtdiagonalelemente (Kohärenzen) zerfallen.

### Wigner-Verteilung

$$W(p, q, t) = \int \frac{dx}{2\pi\hbar} \rho(x, r, t)|_{r=q} e^{-ip\frac{x}{\hbar}} \quad (\text{II}).96$$

[ Schreibweise:

$$\rho = \sum P_\alpha |\Psi_\alpha\rangle \langle \Psi_\alpha| \quad (\text{II}).97$$

$$\langle q|\rho|q'\rangle = \sum_\alpha P_\alpha \Psi_\alpha(q) \Psi_\alpha^*(q') \quad (\text{II}).98$$

]

$$\int \frac{dx}{2\pi\hbar} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, q, t) \right] e^{-ip\frac{x}{\hbar}} = - \int \frac{dx}{2\pi\hbar} \rho(x, q, t) \frac{\partial}{\partial x} e^{-ip\frac{x}{\hbar}} \quad (\text{II}).99$$

$$= - \int \frac{dx}{2\pi\hbar} \rho(x, q, t) \left( -\frac{i}{\hbar} p \right) e^{-ip\frac{x}{\hbar}} \quad (\text{II}).100$$

$$= \frac{ip}{\hbar} W(p, q, t) \quad (\text{II}).101$$

Übersetzung:  $x, r \rightarrow p, q$ :

$$\frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \frac{i}{\hbar} p \quad (\text{II}).102$$

$$x \rightarrow \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial p} \quad (\text{II}).103$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \rightarrow \frac{\partial}{\partial q} \quad (\text{II}).104$$

$$r \rightarrow q \quad (\text{II}).105$$

einsetzen:

$$\frac{\partial}{\partial t} W(p, q, t) = \left[ -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{i}{\hbar} \left\{ V\left(q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right) - V\left(q - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right) \right\} + \gamma \frac{\partial}{\partial p} p + \frac{m\gamma}{\beta} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right] W(p, q, t) \quad (\text{II}).106$$

$\hbar \rightarrow 0$ :

$$V\left(q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right) - V\left(q - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right) = V'(q) \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} + V'(q) \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{1}{2} V''(q) \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} - V''(q) \left(\frac{-i\hbar}{2}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} + \dots \quad (\text{II}).107$$

niedrigste Ordnung in  $\hbar$ : für Reservoir mit Gaußscher Statistik

**klassische Fokker-Planck-Gleichung:**

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} W(p, q, t) = \left[ -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial q} \{V'(q) + \gamma p\} + \frac{m\gamma}{\beta} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right] W(p, q, t) + O(\hbar)}$$

$l_0 =$  natürliche Längenskala

$$\text{harm Osz: } l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$$

$$\frac{m\gamma}{\hbar^2\beta} x^2 = \frac{m\gamma l_0^2}{\hbar^2\beta} \left(\frac{x}{l_0}\right)^2 = \frac{\gamma}{\omega_0 \omega_0 \hbar \beta} \left(\frac{x}{l_0}\right)^2 \omega_0 \quad (\text{II}).108$$

$\hbar \rightarrow 0$  heißt  $\omega_0 \hbar \beta \rightarrow 0$

$\omega_0 \hbar \beta \rightarrow 0$  und  $\rho(x, r, t = 0)$  hat Nichtdiagonalanteile,

d.h.  $\frac{x}{l_0} \approx 1 \Rightarrow$  für kurze Zeiten

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_S(x, r, t) \approx \frac{\gamma}{\omega_0 \omega_0 \hbar \beta} \left(\frac{x}{l_0}\right)^2 \omega_0 \rho_S(x, r, t) \quad (\text{II}).109$$

$$\rho_S(x, r, t) \approx e^{\frac{-\gamma}{\omega_0 \omega_0 \hbar \beta} \left(\frac{x}{l_0}\right)^2 \omega_0 t} \rho_S(x, r, 0) \quad (\text{II}).110$$

Abbildung II).4.: "Folie"

Dekohärenzzeit:

$$\tau_D \omega_0 \propto \frac{\omega_0 \hbar \beta}{\frac{\gamma}{\omega_0} \left(\frac{x}{l_0}\right)^2} \quad (\text{II}).111$$

## II).8. Quantenoptische Mastergleichung

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_S, \rho_S(t)] - \underbrace{\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau Sp_B \{ [H_I, [H_I(-\tau), \rho_S(t) \rho_{B,\beta}]] \}}_{*} \quad (\text{II}).112$$

$$\gamma \hbar \beta \ll 1 \quad \frac{\gamma}{\omega_0} \ll 1$$

$\omega_0 \hbar \beta$  auch groß möglich

$$\text{typisch: } \frac{\gamma}{\omega_0} \propto 10^{-6} \quad \omega_0 \hbar \beta \dots \lesssim 10^5 \hat{=} T \approx 0$$

$H_S |n\rangle = E_n |n\rangle$  Eigenzustände des isolierten Systems

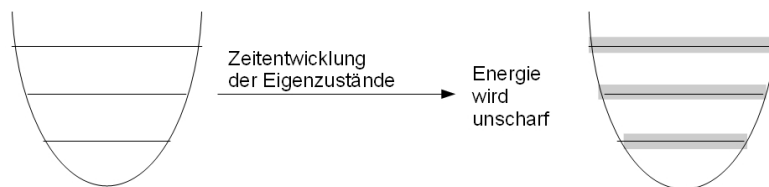


Abbildung II).5.: Bänder

$$H_I = QX$$

$$X = \sum_{\alpha} C_{\alpha} X_{\alpha}$$

$$\star = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau S \rho_B \{ - \rho_{B,\beta} X X(-\tau) Q Q(-\tau) \rho_S(t) \} \quad (\text{II}).113$$

$$+ \rho_{B,\beta} X(-\tau) X Q \rho_S(t) Q(-\tau) \quad (\text{II}).114$$

$$+ \rho_{B,\beta} X X(-\tau) Q(-\tau) \rho_S(t) Q \quad (\text{II}).115$$

$$- \rho_{B,\beta} X(-\tau) X \rho_S(t) Q(-\tau) Q \} \quad (\text{II}).116$$

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (\text{II}).117$$

$$\rho_{nm}(t) = \langle n | \rho_S(t) | m \rangle \quad (\text{II}).118$$

$$Q(-\tau) = \sum_{k,l=0}^\infty e^{-i\omega_{kl}\tau} |k\rangle Q_{kl} \langle l| \quad (\text{II}).119$$

$$Q_{kl} = \langle k | Q | l \rangle \quad (\text{II}).120$$

$$Q(-\tau) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_S \tau} Q e^{\frac{i}{\hbar} H_S \tau} \quad (\text{II}).121$$

### ein Matrixelement

$$\dot{\rho}_{mn}(t) = -i\omega_{mn} \rho_{mn}(t) \quad (\text{II}).122$$

$$+ \frac{1}{\hbar^2} \sum_{k,l=0}^\infty [-Q_{mk} Q_{kl} \rho_{ln} \xi_{kl}^+ + Q_{nk} Q_{kl} \rho_{ml} \xi_{kl}^- + Q_{lm} Q_{nk} \rho_{lk} \xi_{ml}^+ - Q_{km} Q_{nl} \rho_{kl} \xi_{ml}^-] \quad (\text{II}).123$$

$$\xi_{kl}^+ = \int_0^\infty d\tau \langle X X(-\tau) \rangle_B e^{-i\omega_{kl}\tau} \quad (\text{II}).124$$

$$\xi_{kl}^- = -(\xi_{kl}^+)^* = \int_0^{-\infty} d\tau \langle X X(-\tau) \rangle e^{-i\omega_{kl}\tau} \quad (\text{II}).125$$

$$\langle X X(-\tau) \rangle = \langle X(\tau) X \rangle \quad (\text{II}).126$$

$$\langle X X(-\tau) \rangle = \text{Tr} \left\{ x e^{-\frac{i}{\hbar} H_B \tau} x e^{\frac{i}{\hbar} H_B \tau} \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B} \right\} = \langle X(\tau) X \rangle \quad (\text{II}).127$$

exakt:  $\dot{\rho}_{mn}(t) = -i\omega_{mn} \rho_{mn}(t) + \sum_{k,l=0}^\infty R_{mnkl} \rho_{kl}(t)$

Redfieldtensor:

$$R_{mnkl} = -\delta_{nl} \sum_{r=0}^\infty \Gamma_{mrrk}^+ - \delta_{mk} \sum_{r=0}^\infty \Gamma_{lrrn}^- + \Gamma_{lnmk}^+ + \Gamma_{lnmk}^- \quad (\text{II}).128$$

$$\Gamma_{kl ij}^+ = \frac{1}{\hbar^2} Q_{kl} Q_{ij} \xi_{ij}^+ \quad (\text{II}).129$$

$$\Gamma_{kl ij}^- = \frac{-1}{\hbar^2} Q_{kl} Q_{ij} \xi_{ij}^- \quad (\text{II}).130$$

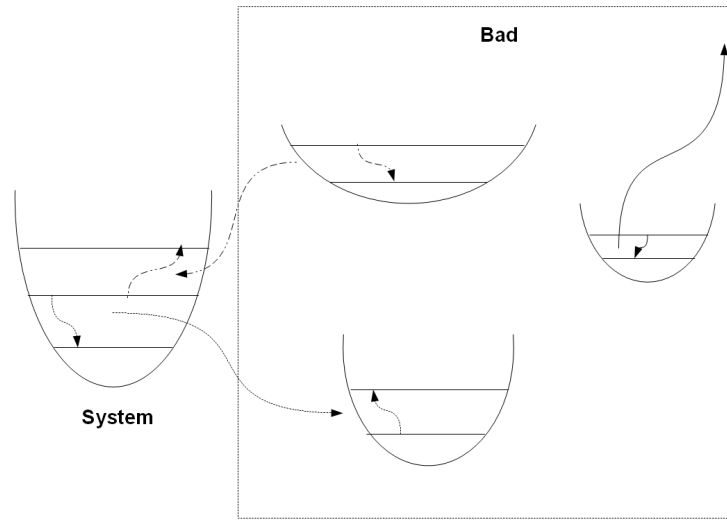


Abbildung II).6.: Oszillatorbad

### Darstellung im Wechselwirkungsbild

$$\rho_{I,mn}(t) \equiv \tilde{\rho}_{mn}(t) = e^{i\omega_{mn}t} \rho_{mn}(t) \quad (\text{II}).131$$

$$\Rightarrow \dot{\tilde{\rho}}_{mn}(t) = \sum_{k,l=0}^{\infty} R_{mnkl} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m + E_l - E_n - E_k)t} \tilde{\rho}_{mn}(t) \quad (\text{II}).132$$

typische Zeitskala von  $\tilde{\rho}_{mn}$  ist  $\frac{1}{\gamma}$

$\frac{1}{\hbar}(E_m + E_l - E_n - E_k) \frac{1}{\gamma} \rightarrow$  riesig, wenn  $(E_m + E_l - E_n - E_k) \neq 0$

$\hookrightarrow$  Beitrag ist im Mittel 0

dominanter Beitrag:  $e^{\frac{i}{\hbar}(0) \frac{1}{\gamma}} = e^0 = 1 \Leftrightarrow m = n$  und  $k = l$  oder  $m=k$  und  $l=n$

$\Rightarrow$  Resonanzbedingung

**”Rotating - wave-approximation”, ”secular approximation”**

**genähert:**  $\tilde{\rho}_{mn}(t) = \delta_{mn} \sum_{k \neq n, k=0}^{\infty} W_{nk} \tilde{\rho}_{kk}(t) - \Gamma_{mn}^c \tilde{\rho}_{nn}(t)$

$$W_{nk} = \Gamma_{knnk}^+ + \Gamma_{knnk}^- = \frac{1}{\hbar^2} |Q_{nk}|^2 (\xi_{nk}^+ - \xi_{nk}^-) \quad (\text{II}).133$$

$$\Gamma_{mn}^c = \Gamma_{mn} - i\tilde{\omega}_{mn} \quad (\text{II}).134$$

$$\xi_{nk}^{\pm} = \int_0^{\pm\infty} d\tau \langle X(\tau)X \rangle e^{-i\omega_{nk}\tau} \quad (\text{II}).135$$

$$\xi_{nk}^+ - \xi_{nk}^- = \xi_{nk}^+ + (\xi_{nk}^+)^* = 2\text{Re}\{\xi_{nk}^+\} \quad (\text{II}).136$$

$$D(\hbar\omega) \equiv 2\text{Re}\{\xi_{nk}^+\} \quad (\text{II}).137$$

$$\tilde{D}(\hbar\omega) \equiv 2\text{Im}\{\xi_{nk}^+\} \quad (\text{II}).138$$

## Lamb-shift

$$\Gamma_{mn}^c = \Gamma_{mn} - i\tilde{\omega}_{mn} \quad (\text{II.139})$$

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \quad (\text{II.140})$$

Nichtdiagonalelemente im Schrödingerbild

$$\tilde{\rho}_{mn}(t) = e^{-i\omega_{mn}t} \rho_{mn}(t) \quad (\text{II.141})$$

$$\Rightarrow \dot{\rho}_{mn}(t) = [-\Gamma_{mn} - i(\omega_{mn} - \underbrace{\tilde{\omega}_{mn}}_{\text{Lamb-Shift}})] \rho_{mn}(t) \quad (\text{II.142})$$

$$\tilde{\omega}_{mn} = \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{r=0}^{\infty} [-|Q_{mr}|^2 \tilde{D}(\hbar\omega_{rm}) + |Q_{nr}|^2 \tilde{D}(\hbar\omega_{mn})] \quad (\text{II.143})$$

$$\tilde{\omega}_{mm} = 0 \quad (\text{II.144})$$

$$\Gamma_{mn} = \underbrace{\frac{\Gamma_{mm} + \Gamma_{nn}}{2}}_{\text{Relaxation}} + \underbrace{\frac{D(0)}{2\hbar^2} (\langle m|Q|m\rangle - \langle n|Q|n\rangle)^2}_{\text{Dephasierung}} \quad (\text{II.145})$$

$$\Gamma_{mm} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{r=0, r \neq m}^{\infty} |Q_{mr}|^2 D(\hbar\omega_{rm}) = \sum_{r=0, r \neq m}^{\infty} W_{mr} \quad (\text{II.146})$$

Population des Zustandes n:

$$\rho_{nn}(t) = P_n(t) \quad (\text{II.147})$$

**Pauli-Mastergleichung:**  $\dot{P}_n(t) = \sum_{m=0}^{\infty} [W_{nm}P_m(t) - W_{mn}P_n(t)]$

## Eigenschaften

- für  $t \rightarrow \infty$  geht  $P_n$  gegen die Gleichgewichtsverteilung. D.h. es existiert ein vom Anfangszustand unabhängiger stationärer Zustand.  
stationärer Zustand: für ergodische Bäder  
→ quasi-kontinuum an Badmoden

•

$$\langle X(\tau)X \rangle = \langle XX(\tau + i\hbar\beta) \rangle \quad (\text{II.148})$$

$$\langle XX(\tau + \hbar\beta) \rangle = \text{Sp}_B \left\{ X e^{i\tau \frac{H_B}{\hbar}} e^{-\beta H_B} X e^{-i\tau \frac{H_B}{\hbar}} e^{\beta H_B} \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B} \right\} \quad (\text{II.149})$$

$$= \text{Sp}_B \left\{ e^{i\tau \frac{H_B}{\hbar}} X e^{-i\tau \frac{H_B}{\hbar}} X \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B} \right\} \quad (\text{II.150})$$

$$= \langle X(\tau)X \rangle \quad (\text{II.151})$$

•

$$D(\hbar\omega) = 2\text{Re}\left\{\int_0^\infty d\tau \langle X(\tau)X \rangle e^{-i\omega\tau}\right\} \quad (\text{II}).152$$

$$= \int_0^\infty d\tau \langle X(\tau)X \rangle e^{-i\omega\tau} + \int_0^\infty d\tau \langle X(\tau)X \rangle^* e^{i\omega\tau} \quad (\text{II}).153$$

$$\langle X(\tau)X \rangle^* = \langle XX(\tau) \rangle = \langle X(-\tau)X \rangle$$

$$D(\hbar\omega) = \int_{-\infty}^\infty d\tau \langle X(\tau)X \rangle e^{-i\omega\tau} \quad (\text{II}).154$$

$$D(-\hbar\omega) = \int_{-\infty}^\infty d\tau \langle X(\tau)X \rangle e^{i\omega\tau} \quad (\text{II}).155$$

$$= \int_{-\infty}^\infty d\tau \langle XX(\tau + i\hbar\beta) \rangle e^{i\omega\tau} \quad (\text{II}).156$$

$$= \int_{-\infty}^\infty d\sigma \underbrace{\langle XX(\sigma) \rangle}_{\langle X(-\sigma)X \rangle} e^{i\omega\sigma} e^{\omega\hbar\beta} \quad (\text{II}).157$$

$$= e^{\beta\hbar\omega} D(\hbar\omega) \quad (\text{II}).158$$

$$D(\hbar\omega) = e^{-\beta\hbar\omega} D(-\hbar\omega) \quad (\text{II}).159$$

$\rightarrow \omega > 0, \omega\beta\hbar \rightarrow \infty (\tau \rightarrow 0)$   
 $D(\hbar\omega) \rightarrow 0$

$D(\hbar\omega > 0)$  beschreibt Absorption des Systems  
 $D(\hbar\omega < 0)$  beschreibt Emission des Systems

•

$$W_{mn} = \frac{1}{\hbar^2} |Q_{mn}|^2 D(\hbar\omega_{mn}) \quad (\text{II}).160$$

$$W_{nm} = \frac{1}{\hbar^2} |Q_{mn}|^2 D(\hbar\omega_{nm}) = e^{\beta\hbar\omega_{mn}} W_{mn} \quad (\text{II}).161$$

$$\Rightarrow W_{nm} = e^{\beta\hbar\omega_{mn}} D(\hbar\omega_{mn}) \quad (\text{II}).162$$

**detaillierte Bilanz:**  $W_{nm}e^{-\beta E_m} = W_{mn}e^{-\beta E_n}$

$t \rightarrow \infty : \dot{P}_n(t) \rightarrow 0$

$$\sum_{m=0}^\infty [W_{nm}P_m^\infty - W_{mn}P_n^\infty] = 0 \quad \forall n, m \quad (\text{II}).163$$

$$\frac{P_m^\infty}{P_n^\infty} = \frac{W_{mn}}{W_{nm}} = e^{-\beta(E_m - E_n)} \quad (\text{II}).164$$

$$P_m^\infty = ce^{-\beta E_m} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_m} \quad (\text{II}).165$$

## II).9. Zwei-Niveau-System

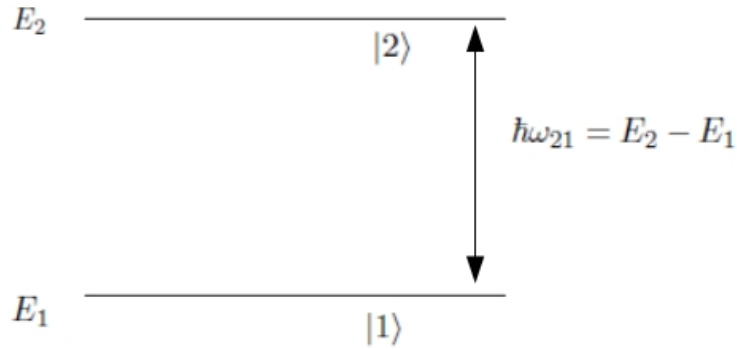


Abbildung II).7.: zwei Niveau Atom

$$H_S|1\rangle = E_1|1\rangle \quad H_S|2\rangle = E_2|2\rangle \quad (\text{II}).166$$

$$\begin{pmatrix} E_2 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix} = \frac{E_1 + E_2}{2} \mathbb{I} + \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & -\epsilon \end{pmatrix} \quad (\text{II}).167$$

$$\epsilon = \frac{E_2 - E_1}{2} \quad (\text{II}).168$$

$$H_S = \frac{E_1 + E_2}{2} \mathbb{I} + \epsilon \sigma_z \quad (\text{II}).169$$

Wähle anderen Energienullpunkt:

$$H_S = \epsilon \sigma_z = \frac{2\epsilon}{\hbar} S_z = B_z S_z \quad (\text{II}).170$$

mit

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad (\text{II}).171$$

$$H_I = qX \quad (\text{II}).172$$

$$q = \alpha \sigma_z + \delta \sigma_x \quad (\text{II}).173$$

$$H = H_s + H_I + H_B = \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega_{2,1}}{2} + \alpha X & \delta X \\ \delta X & -\frac{\hbar\omega_{2,1}}{2} - \alpha X \end{pmatrix} + H_B \mathbb{I} + \frac{E_2 + E_1}{2} \mathbb{I} \quad (\text{II}).174$$

⇒ Mastergleichung:

$$\dot{\rho}_{11}(t) = W_{12}\rho_{22}(t) - W_{11}\rho_{11}(t) \quad (\text{II}).175$$

$$\dot{\rho}_{22}(t) = W_{21}\rho_{11}(t) - W_{22}\rho_{22}(t) \quad (\text{II}).176$$

$$\dot{\rho}_{12}(t) = -(\omega_{12} - \tilde{\omega}_{12})\rho_{12} - \Gamma_{12}\rho_{12} \quad (\text{II}).177$$

$$\dot{\rho}_{21}(t) = -(\omega_{21} - \tilde{\omega}_{21})\rho_{21} - \Gamma_{21}\rho_{21} \quad (\text{II}).178$$

$$W_{12} = \Gamma_{22}, \quad W_{11} = \Gamma_{11} \quad (\text{II}).179$$

**Nichtdiagonalelemente:**

$$\rho_{12}(t) = e^{i(\omega_{21} + \tilde{\omega}_{12})t} e^{-\Gamma_{12}t} \rho_{12}(0) \quad (\text{II}).180$$

$$\Gamma_{12} = \frac{1}{2}(\Gamma_{11} + \Gamma_{22}) + \frac{D(0)}{2\hbar^2} (Q_{11} - Q_{22})^2 \quad (\text{II}).181$$

$$\Gamma_{11} = \frac{1}{\hbar^2} |Q_{12}|^2 D(\hbar\omega_{21}) \quad (\text{II}).182$$

$$Q_{11} = \langle 1 | \alpha \sigma_z + \delta \sigma_x | 1 \rangle = -\alpha \quad (\text{II}).183$$

$$Q_{22} = \alpha \quad (\text{II}).184$$

$$Q_{12} = \langle 1 | \delta \sigma_z | 2 \rangle = \delta = Q_{21} \quad (\text{II}).185$$

$$\Gamma_{11} = \frac{\delta^2}{\hbar^2} D(\hbar\omega_{21}) \quad (\text{II}).186$$

$$\Gamma_{22} = \frac{\delta^2}{\hbar^2} D(-\hbar\omega_{21}) \quad (\text{II}).187$$

$$D(\hbar\omega_0) = 2\text{Re}\left\{ \int_0^\infty d\tau \langle X(\tau)X \rangle e^{-i\omega_0\tau} \right\} \quad (\text{II}).188$$

dazu:

$$\text{Re}\left\{ \int_0^\infty d\tau \cos(\omega\tau) e^{-i\omega_0\tau} \right\} = \int_0^\infty d\tau \cos(\omega\tau) \cos(\omega_0\tau) \quad (\text{II}).189$$

$$= \frac{1}{4} \int_0^\infty d\tau \{ (e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau})(e^{i\omega_0\tau} + e^{-i\omega_0\tau}) \} \quad (\text{II}).190$$

$$= \frac{1}{4} \int_0^\infty d\tau \{ e^{i(\omega+\omega_0)\tau} + e^{i(\omega-\omega_0)\tau} \} \quad (\text{II}).191$$

$$= \frac{1}{4} 2\pi \{ \delta(\omega + \omega_0) + \delta(\omega - \omega_0) \} \quad (\text{II}).192$$

$$\langle X(\tau)X \rangle = \hbar \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left[ \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos(\omega\tau) - i \sin(\omega\tau) \right] \quad (\text{II}).193$$

$$\text{Re} \left\{ \int_0^\infty d\tau \langle X(\tau)X \rangle e^{-i\omega_0\tau} \right\} \quad (\text{II}).194$$

$$= \hbar \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \frac{\pi}{2} [\delta(\omega + \omega_0) - \delta(\omega - \omega_0)] \quad (\text{II}).195$$

$$- \hbar \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \frac{\pi}{2} [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)] \quad (\text{II}).196$$

dazu:

$$\text{Re}\left\{i \int_0^{\infty} d\tau \sin(\omega\tau) e^{-i\omega_0\tau}\right\} = \frac{-\pi}{2} [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)] \quad (\text{II}).197$$

$$D(\hbar\omega_0) = \frac{2}{2} \hbar J(\omega_0) \coth\left(\frac{\omega_0 \hbar \beta}{2}\right) - 2 \hbar J(\omega_0) \frac{1}{2} \quad (\text{II}).198$$

$$= \hbar J(\omega_0) [\coth\left(\frac{\omega_0 \hbar \beta}{2}\right) - 1] \quad (\text{II}).199$$

[ **Nebenrechnung:**

$$\coth\left(\frac{\omega_0 \hbar \beta}{2}\right) - 1 = \frac{\cosh\left(\frac{x}{2}\right)}{\sinh\left(\frac{x}{2}\right)} - 1 = \frac{e^{\frac{x}{2}} - e^{-\frac{x}{2}}}{e^{\frac{x}{2}} + e^{-\frac{x}{2}}} - 1 = \frac{e^x + 1}{e^x - 1} - 1 = \frac{2}{e^x - 1} \quad (\text{II}).200$$

]

$$D(\hbar\omega) = \hbar J(\omega_0) 2 \frac{1}{e^{\omega_0 \hbar \beta} - 1} = \hbar J(\omega_0) 2 n_{\beta}(\omega_0) \quad (\text{II}).201$$

$$D(-\hbar\omega) = 2 \hbar J(-\omega_0) n_{\beta}(-\omega_0) \quad (\text{II}).202$$

mit  $n_{\beta}(-\omega_0) = -(n_{\beta}(\omega_0) + 1)$

und  $J(-\omega_0) = -J(\omega_0)$

$$D(-\hbar\omega_0) = 2 \hbar J(\omega_0) [n_{\beta}(\omega_0) + 1] \quad (\text{II}).203$$

→ erfüllt detaillierte Bilanz.

### hohe Temperaturen

$\omega_0 \hbar \beta \ll 1$

$$n_{\beta} \approx \frac{1}{(1 + \omega_0 \hbar \beta + \dots) - 1} \approx \frac{1}{\omega_0 \hbar \beta} \gg 1 \quad (\text{II}).204$$

$$\Rightarrow D(\hbar\omega_0) \approx 2 \hbar \frac{J(\omega_0)}{\omega_0 \hbar \beta} \approx D(-\hbar\omega_0) \quad (\text{II}).205$$

### tiefe Temperaturen

$\omega_0 \hbar \beta \gg 1$

$$n_{\beta} \approx e^{-\omega_0 \hbar \beta} \ll 1 \quad (\text{II}).206$$

$$D(\hbar\omega_0) \approx 0 \quad (\text{II}).207$$

$$D(-\hbar\omega_0) \approx 2 \hbar J(\omega_0) \quad (\text{II}).208$$

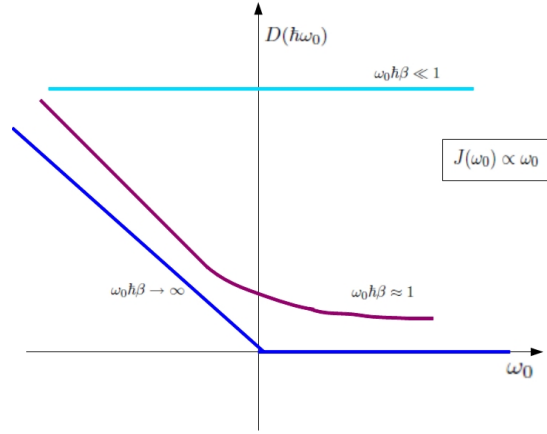


Abbildung II).8.:  $D(\hbar\omega_0)$

$\Gamma$

$$\Gamma_{11} = \frac{2\delta^2}{\hbar} J(\omega_0) n_\beta(\omega_0) \quad (\text{II}).209$$

$$\Gamma_{22} = \frac{2\delta^2}{\hbar} J(\omega_0) [n_\beta(\omega_0) + 1] \quad (\text{II}).210$$

$$\Gamma_{12} = \frac{1}{2}(\Gamma_{11} + \Gamma_{22}) + \Gamma_\Phi \quad (\text{II}).211$$

$$\Gamma_\Phi = \frac{2D(0)}{\hbar^2} \alpha^2 \quad (\text{II}).212$$

$$D(0) = \lim_{\omega_0 \rightarrow 0} 2 \frac{J(\omega_0)}{\omega_0} \frac{1}{\beta} \quad (\text{II}).213$$

Temperatur  $\rightarrow 0$ :

$$\Gamma \rightarrow 0, \quad \Gamma_{22} \rightarrow \frac{2\delta^2}{\hbar} J(\omega_0), \quad \Gamma_\Phi \rightarrow 0, \quad \Gamma_{12} \rightarrow \frac{\Gamma_{22}}{2} \quad (\text{II}).214$$

**Dekohärenzzeit**  $T_2$  : Zerfall der Nichtdiagonalelemente

$$T_2 = \frac{1}{\Gamma_{12}} \quad (\text{II}).215$$

**Relaxationszeit**  $T_1$ : Relaxation (in das thermische Gleichgewicht) der Diagonalelemente

$$T_1 = \frac{1}{\Gamma_{11} + \Gamma_{22}} \quad (\text{II}).216$$

$$\Rightarrow \frac{1}{T_2} = \frac{1}{2T_1} + \frac{1}{T_\Phi} > \frac{1}{2T_1} \quad (\text{II}).217$$

$$\Rightarrow \boxed{T_2 \leq 2T_1}$$

## Lamb-Shift

$$\tilde{\omega}_{12} = \frac{\delta^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} [-\tilde{D}(-\hbar\omega_{12}) + \tilde{D}(\hbar\omega_{12})] \quad (\text{II}).218$$

$$\tilde{\omega}_{21} = -\tilde{\omega}_{12} \quad (\text{II}).219$$

$$\tilde{D}(\hbar\omega_0) = 2\text{Im}\left\{ \int_0^\infty d\tau \langle X(\tau)X \rangle e^{-i\omega_0\tau} \right\} \quad (\text{II}).220$$

$$= 2 \int_0^\infty d\tau \langle X(\tau)X \rangle \sin(\omega_0\tau) - M[\omega\gamma \sin(\omega_0) - \gamma(0)] \quad (\text{II}).221$$

$$J(\omega) = M\omega \int_0^\infty ds \gamma(s) \cos(\omega s) \quad (\text{II}).222$$

$$\gamma(s) \equiv \text{klassische Dämpfungsfunktion} \quad (\text{II}).223$$

Langevingleichung verallgemeinert:

$$M\ddot{q} + V'(q) + M \int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{q}(s) = \xi(t) \quad (\text{II}).224$$

$$M\ddot{q} + V'(q) + M\gamma\dot{q} = \xi(t) \quad , \text{ falls } \gamma(t) = 2\gamma\delta(t) \quad (\text{II}).225$$

$$J(\omega)|_{\gamma=\text{Ohmsch}} = M\omega 2\gamma \underbrace{\int_0^\infty ds \delta(s) \cos(\omega s)}_{=\frac{1}{2}} = M\gamma\omega \quad (\text{II}).226$$

$$\gamma \sin(\omega) = \int_0^\infty ds \gamma(s) \sin(\omega_0 s) \quad (\text{II}).227$$

$$\tilde{D}(\hbar\omega_0) = \gamma \sin(\omega_0) M\omega \coth\left(\frac{\omega_0 \hbar\beta}{2}\right) - \frac{4M\omega_0}{\hbar\beta} \sum_{n=1}^\infty \frac{\nu_n \hat{\gamma}(\nu_n)}{\omega_0^2 + \nu_n^2} - M[\omega_0\gamma \sin(\omega_0) - \gamma(0)] \quad (\text{II}).228$$

$$\hat{\gamma}(z) = \int_0^\infty dt \gamma(t) e^{-zt} \quad (\text{II}).229$$

$$\nu_n = \frac{2\pi n}{\hbar\beta} \quad \text{”Matsubara frequenz”} \quad (\text{II}).230$$

**Bsp**

$$\gamma(t) = 2\gamma\delta(t) \quad (\text{II}).231$$

eventuell versehen mit einem großen cut-off  $\omega_c$

$$J(\omega) = M\gamma\omega \quad (\text{II}).232$$

$$\tilde{D}(\hbar\omega_0) = \frac{-4M\omega_0\gamma}{\hbar\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n}{\omega_0^2 + \nu_n^2} + M\gamma(0) \quad (\text{II}).233$$

$\omega_0\hbar\gamma \ll 1, \frac{\nu_n}{\omega_0} \gg 1$ :

$$\tilde{D}(\hbar\omega_0) \rightarrow \frac{-4M\omega_0\gamma}{\hbar\beta} \frac{1}{\nu_1} + M\gamma(0) = \frac{-2M\omega_0\gamma}{\pi} + M\gamma(0) \quad (\text{II}).234$$

$$\dot{\rho}_{11} = -\Gamma_{11}\rho_{11} + \Gamma_{22}\rho_{22} \quad (\text{II}).235$$

$$\dot{\rho}_{22} = -\Gamma_{22}\rho_{22} + \Gamma_{11}\rho_{11} \quad (\text{II}).236$$

$$\dot{\rho}_{11} + \dot{\rho}_{22} = 0 \quad (\text{II}).237$$

$$T \rightarrow: \Gamma_{11} = 0, \quad \dot{\rho}_{11} = \Gamma_{22}\rho_{22}, \quad \dot{\rho}_{22} = -\Gamma_{22}\rho_{11} \quad (\text{II}).238$$

$$\rho_{22}(0) = 1 \quad \rho_{11}(0) = 0 \quad (\text{II}).239$$

$$1 = \rho_{11} + \rho_{22} \quad \rightarrow \rho_{22} = 1 - \rho_{11} \quad (\text{II}).240$$

$$\Rightarrow \dot{\rho}_{11} = \Gamma_{22}(1 - \rho_{11}) = -\Gamma_{22}\rho_{11} + \Gamma_{22} \quad (\text{II}).241$$

$$\rho_{11} = \underbrace{\rho_{11}^{(homo)}}_{e^{-\Gamma_{22}t}\rho_{11}(0)=0} + \underbrace{\rho_{11}^{(inhomo)}}_{e^{-\Gamma_{22}t} \int_0^t ds e^{\Gamma_{22}s} \Gamma_{22}} \quad (\text{II}).242$$

$$\rho_{11} = e^{-\Gamma_{22}t}[e^{\Gamma_{22}t} - 1] = 1 - e^{-\Gamma_{22}t} \quad (\text{II}).243$$

$$\rho_{11}(t) = 1 - e^{-\Gamma_{22}t} \quad (\text{II}).244$$

$$\rho_{22}(t) = e^{-\Gamma_{22}t} \quad (\text{II}).245$$

## III). gedämpfter HO- Langevingleichung

### III).1. klassisches System-Bad-Modell

$$H = H_S + H_I + H_B \quad (\text{III}).1$$

$$H_S = \frac{p^2}{2M} + V_0(q) \quad (\text{III}).2$$

$$H_B = \sum_{j=1}^N \left( \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} x_j^2 \right) \quad (\text{III}).3$$

$$H_I = \sum_{j=1}^N c_j x_j q \quad (\text{III}).4$$

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{M} \quad (\text{III}).5$$

$$\dot{p} = \frac{-\partial H}{\partial q} = -V_0'(q) - \sum_{j=1}^N c_j x_j \quad (\text{III}).6$$

$$\dot{x}_j = \frac{p_j}{m_j} \quad (\text{III}).7$$

$$\dot{p}_j = -\omega_j^2 m_j x_j - c_j q \quad (\text{III}).8$$

$$x_j(t) = x_j(0) \cos(\omega_j t) + \frac{\dot{x}_j(0)}{\omega_j} \sin(\omega_j t) - \int_0^t ds \frac{\sin(\omega_j(t-s))}{\omega_j} \frac{c_j}{m_j} q(s) \quad (\text{III}).9$$

$$\ddot{q} = \frac{-1}{M} V_0''(q) - \sum_{j=1}^N \frac{c_j}{M} \left\{ x_j(0) \cos(\omega_j t) + \frac{\dot{x}_j(0)}{\omega_j} \sin(\omega_j t) - \int_0^t ds \frac{\sin(\omega_j(t-s))}{\omega_j} \frac{c_j}{m_j} q(s) \right\} \quad (\text{III}).10$$

$$\int_0^t ds \frac{\sin(\omega_j(t-s))}{\omega_j} \frac{c_j}{m_j} q(s) = \frac{c_j}{m_j \omega_j^2} q(t) - \frac{c_j}{m_j \omega_j^2} q(0) \cos(\omega_j t) - \int_0^t ds \frac{\cos(\omega_j(t-s))}{\omega_j^2} \frac{c_j}{m_j} \dot{q} \quad (\text{III}).11$$

$$\Rightarrow \ddot{q} = \frac{-1}{M} V_0''(q) + \underbrace{\sum_{j=1}^N \frac{c_j^2}{M \omega_j^2 m_j}}_{const.} q(t) - \int_0^t ds \sum_{j=1}^N \frac{c_j^2}{M m_j \omega_j^2} \cos(\omega_j(t-s)) \dot{q}(s) + \frac{1}{M} \xi(t) \quad (\text{III}).12$$

$$\xi(t) = - \sum_{j=1}^N c_j \left\{ (x_j(0) + \frac{c_j}{m_j \omega_j^2} q(0)) \cos(\omega_j t) + \frac{\dot{x}_j}{\omega_j} \sin(\omega_j t) \right\} \quad (\text{III.13})$$

HO:

$$V(x_j) = \frac{m}{2} \omega_j^2 x_j^2 + c_j x_j q \quad (\text{III.14})$$

$$V'(x_j) = 0 = m \omega_j^2 x_j + c_j q \quad (\text{III.15})$$

$$\Rightarrow x_j^{\min} = \frac{-c_j}{m_j \omega_j^2} q \quad (\text{III.16})$$

$$V(x_j^{\min}) = \frac{-c_j^2}{2m_j \omega_j^2} q^2 \quad (\text{III.17})$$

Umbenennungen:

$$V(q) = V_0(q) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{c_j^2}{\omega_j m_j} q^2 \quad (\text{III.18})$$

$$\gamma(t) = \sum_{j=1}^N \frac{c_j^2}{M m_j \omega_j^2} \cos(\omega_j t) \quad (\text{III.19})$$

$$\Rightarrow \ddot{q}(t) = \frac{-1}{M} V'(q) - \int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{q}(s) + \frac{1}{M} \xi(t) \quad (\text{III.20})$$

$$H = \frac{p^2}{2M} + \sum_j \frac{p_j^2}{2m_j} + \sum_j \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 \left( x_j + \frac{c_j}{m_j \omega_j^2} q \right)^2 + \underbrace{V_0(q) - \sum_j \frac{1}{2} \frac{c_j^2}{m_j \omega_j^2} q^2}_{V(q)} \quad (\text{III.21})$$

Eigenschaften von  $\xi$

$$W_\beta(p, p_j, q, x_j) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \quad (\text{III.22})$$

daraus folgt mit dem Gleichverteilungssatz:

$$\langle p^2 \rangle = M k_B T \quad (\text{III.23})$$

$$\langle p_j^2 \rangle = m_j k_B T \quad (\text{III.24})$$

$$\langle \dot{x}_j^2 \rangle = \frac{k_B T}{\omega_j} \quad (\text{III.25})$$

$$\langle p \rangle = \langle p_j \rangle = 0 \quad (\text{III.26})$$

$$\langle p_j p_k \rangle = \delta_{jk} \langle p_j^2 \rangle \quad (\text{III.27})$$

$$\langle p q \rangle = \langle p x_j \rangle = \langle p_k q \rangle = 0 \quad (\text{III.28})$$

$$\langle (x_j + \frac{c_j}{m_j \omega_j^2} q)(x_k + \frac{c_k}{m_k \omega_k^2} q) \rangle = \delta_{jk} \frac{k_B T}{m_j \omega_j^2} \quad (\text{III.29})$$

$$\Rightarrow \langle \xi(t) \rangle_\beta = 0 \quad (\text{III.30})$$

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle_\beta = \sum_j c_j^2 \left\{ \frac{k_B T}{m_j \omega_j^2} \cos(\omega_j t) \cos(\omega_j t') + \frac{k_B T}{m_j \omega_j^2} \sin(\omega_j t) \sin(\omega_j t') \right\} \quad (\text{III.31})$$

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = k_B T \sum_j \frac{c_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos(\omega_j (t - t')) = M k_B T \gamma(t - t') \quad (\text{III.32})$$

### spektrale Baddichte

$$I(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_j \frac{c_j^2}{m_j \omega_j} \delta(\omega - \omega_j) \quad (\text{III.33})$$

Einheit:  $\frac{\text{Energie}}{\text{Länge}^2}$

$$\sum_j \frac{c_j^2}{m_j \omega_j} f(\omega_j) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} I(\omega) f(\omega) \quad (\text{III.34})$$

$$\gamma(t) = \frac{2}{M} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{I(\omega)}{\omega} \cos(\omega t) \quad (\text{III.35})$$

$$I(\omega) = M\omega \int_0^\infty dt \gamma(t) \cos(\omega t) \quad \omega \geq 0 \quad (\text{III.36})$$

### Potentialnormierung

$$V(q) = V_0(q) - \frac{M}{2} \mu^2 q^2 \quad (\text{III.37})$$

mit

$$\mu^2 = \sum_j \frac{c_j^2}{M m_j \omega_j^2} = \gamma(0) = \frac{2}{M} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{I(\omega)}{\omega} \quad (\text{III.38})$$

Caldera-Leggett- Hamiltonian: 
$$H = \frac{p^2}{2M} + V(q) + \sum_j \left\{ \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} \left( x_j + \frac{c_j}{m_j \omega_j^2} q \right)^2 \right\}$$

$$\gamma(t) = \frac{2}{M} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega t) \quad (\text{III.39})$$

$$\Rightarrow M\ddot{q} + V'(q) + M \int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{q}(s) = \xi(t) \quad (\text{III.40})$$

## III).2. Quantenmechanischer HO

äußere Kraft  $F(t)$

$$\langle \ddot{q}(t) \rangle + \int_0^t dt' \gamma(t-t') \langle \dot{q}(t') \rangle + \omega_0^2 \langle q(t) \rangle = \frac{1}{M} F(t) \quad (\text{III.41})$$

$$F(t) = 0 \quad \text{für } t < 0 \quad (\text{III.42})$$

$$\langle q(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{cl}(t-t') F(t') \quad (\text{III.43})$$

$$\tilde{\chi}_{cl}(\omega) = \frac{1}{M} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\tilde{\gamma}(\omega)} = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega) \quad (\text{III.44})$$

$$C_{qq}(t) = \langle q(t)q(0) \rangle_{\beta} \quad (\text{III.45})$$

Fluktuations - Dissipations Theorem:

$$\chi''(\omega) = \frac{1}{2\hbar} (1 - e^{-\omega\beta\hbar}) \tilde{C}_{qq}(\omega) \quad (\text{III.46})$$

Herleitung: Weiß 3.1.4

Beh:

$$C_{qq}(t) = S(t) + iA(t) = \frac{1}{2} \langle \{q(t), q(0)\} \rangle_{\beta} + \frac{1}{2} \langle [q(t), q(0)] \rangle_{\beta} \quad (\text{III.47})$$

$$S(t) = \frac{1}{2} \langle q(t)q(0) + q(0)q(t) \rangle_{\beta} \quad (\text{III.48})$$

$$= \frac{1}{2} Sp \{ e^{\frac{i}{\hbar}Ht} q e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} q W_{\beta} + q e^{\frac{i}{\hbar}Ht} q e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} q \} \quad (\text{III.49})$$

$$S^{\dagger}(t) = \frac{1}{2} Sp \{ W_{\beta} q e^{\frac{i}{\hbar}Ht} q e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} + W_{\beta} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} q e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} q \} \quad (\text{III.50})$$

$$= S(t) \quad (\text{III.51})$$

$$A(t) = \frac{1}{2i} \langle [q(t), q(0)] \rangle_{\beta} \quad (\text{III.52})$$

$$C_{qq}(t) = S(t) + iA(t) \quad (\text{III.53})$$

$$\tilde{C}_{qq}(\omega) = \tilde{S}(\omega) + i\tilde{A}(\omega) \quad (\text{III.54})$$

$$\Rightarrow \tilde{S}(\omega) = \hbar \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \tilde{\chi}''(\omega) \quad (\text{III.55})$$

(gilt allgemein, nur FDT gebraucht)

$$\chi(t) = \frac{-2}{\hbar} \Theta(t) A(t) \quad (\text{III.56})$$

**HO:**

$$\tilde{\chi}''(\omega) = \tilde{\chi}_{cl}''(\omega) \quad (\text{III.57})$$

$$\Rightarrow \tilde{S}(\omega) = \hbar \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \tilde{\chi}_{cl}''(\omega) \quad (\text{III.58})$$

$$C_{qq}(t) = \frac{\hbar}{\pi} \int d\omega \chi_{cl}''(\omega) \frac{e^{-i\omega t}}{1 - e^{-\omega\beta\hbar}} \quad (\text{III.59})$$

$$S(t) = \frac{\hbar}{2\pi} \int d\omega \tilde{\chi}_{cl}''(\omega) \coth\left(\frac{\omega\beta\hbar}{2}\right) \quad (\text{III.60})$$

$$A(t) = \frac{-\hbar}{2\pi} \int d\omega \tilde{\chi}_{cl}''(\omega) \sinh(\omega t) \quad (\text{III.61})$$

$$C_+(t) = \langle \{x(t), x(0)\} \rangle_\beta = \hbar \int \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos(\omega t) \quad (\text{III.62})$$

$$C_-(t) = i \langle [x(t), x(0)] \rangle_\beta \quad (\text{III.63})$$

$$\Rightarrow \tilde{\chi}''(\omega) = 2J(\omega) = 2M\omega\tilde{\gamma}(\omega) \quad (\text{III.64})$$

$$C_{qq} = \frac{\hbar}{\pi} \int d\omega \chi_{cl}''(\omega) \frac{e^{-i\omega t}}{1 - e^{-\omega\hbar\beta}} \quad (\text{III.65})$$

$$\tilde{\chi}_{cl}''(\omega) = \frac{1}{M} \frac{\omega\tilde{\gamma}'(\omega)}{[\omega^2 - \omega_0^2 - \omega\tilde{\gamma}''(\omega)]^2 + \omega^2\tilde{\gamma}'(\omega)^2} \quad (\text{III.66})$$

### Fall ohmsche Dämpfung

$$J(\omega) = M\gamma\omega \quad (\text{III.67})$$

$$\rightarrow \tilde{\gamma}(\omega) = \gamma \quad (\text{III.68})$$

$$\Rightarrow \chi_{cl}''(\omega) = \frac{1}{M} \frac{\omega\gamma}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \omega^2\gamma^2} \quad (\text{III.69})$$

$$C_{qq}(t) = S(t) + iA(t) \quad (\text{III.70})$$

$$A(t) = \frac{-\hbar}{2\pi M} \int d\omega \frac{\omega\gamma \sin(\omega t)}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \omega^2\gamma^2} \quad (\text{III.71})$$

Pole:

$$(\lambda^2 - \omega_0^2)^2 + \lambda^2\gamma^2 = 0 \quad (\text{III.72})$$

$$\lambda^4 - 2\omega_0^2\lambda^2 + \omega_0^4 + \lambda^2\gamma^2 = \lambda^4 + \lambda^2(\gamma^2 - 2\omega_0^2) + \omega_0^4 = 0 \quad (\text{III.73})$$

$$\lambda_{\pm}^2 = \frac{-(\gamma^2 - 2\omega_0^2) \pm \sqrt{(\gamma^2 - 2\omega_0^2)^2 - 4\omega_0^4}}{2} \quad (\text{III.74})$$

$$\lambda_{\pm}^2 = \omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^4}{4} - \omega_0^2\gamma^2} \quad (\text{III.75})$$

Fall  $\omega_0 > \frac{\gamma}{\sqrt{2}}$ :

$$\Rightarrow A(t) = \frac{\hbar}{2M} \frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}}} e^{-\gamma\frac{|t|}{2}} \sin\left(\sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}} t\right) \quad (\text{III.76})$$

$$M \langle \ddot{\hat{q}}(t) \rangle + M\omega_0^2 \langle \hat{q}(t) \rangle + \int^t ds \gamma(t-s) \langle \dot{\hat{q}}(s) \rangle = f(s) \quad (\text{III.77})$$

$$\langle \hat{q}(t)^2 \rangle \neq \langle \hat{q}(t) \rangle^2 \quad (\text{III.78})$$

Antwortfunktion identisch zur klassischen Antwortfunktion

$$\langle \hat{q}(t) \rangle - \langle \hat{q}(0) \rangle = \int ds \chi_{cl}(t-s) f(s) \quad (\text{III.79})$$

$$\tilde{\chi}_{cl}(\omega) \equiv \tilde{\chi}_{qq}(\omega) = \frac{1}{M} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\tilde{\gamma}(\omega)} \quad (\text{III.80})$$

$$\langle q(t)q(0) \rangle = ? \quad (\text{III.81})$$

$$C_{qq}(t) = \langle q(t)q(0) \rangle = S(t) + iA(t) \quad (\text{III.82})$$

$$\tilde{\chi}_{qq}''(\omega) = \frac{1}{2\hbar}(1 - e^{-\omega\hbar\beta})\tilde{C}_{qq}(\omega) \quad (\text{III.83})$$

$$\tilde{S}(\omega) = \hbar \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right)\tilde{\chi}_{qq}''(\omega) \quad (\text{III.84})$$

### Bsp

Ohmsche Dissipation (weißes Rauschen)

$$\tilde{\gamma}(\omega) = \gamma \quad (\text{III.85})$$

$$S(t) = \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\omega\gamma}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \omega^2\gamma^2} \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos(\omega t) \quad (\text{III.86})$$

$$\Rightarrow S(t) = \frac{\hbar}{4M\sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}}} \quad (\text{III.87})$$

$$[\coth(i\bar{\lambda}_2^{(+)}\hbar\frac{\beta}{2})e^{-\bar{\lambda}_2^{(+)}t} - \coth(i\bar{\lambda}_1^{(+)}\hbar\frac{\beta}{2})e^{-\bar{\lambda}_1^{(+)}t}] - \Gamma(t) \quad (\text{III.88})$$

$$\Gamma(t) = \frac{2\gamma}{M\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n e^{-i\nu_n t}}{(\omega_0^2 - \nu_n^2)^2 - \gamma^2\nu_n^2} \quad (\text{III.89})$$

Diskussion von S(t) für  $\gamma < 2\omega_0$

- $k_B T \gg \frac{\hbar\gamma}{4\pi}$   
 $\nu_1 = \frac{2\pi}{\hbar\beta}$   
 $\rightarrow e^{-\frac{\gamma}{2}t} \gg e^{-\nu_1 t}$   
 $\rightarrow S(t)$  zerfällt "klassisch"
- $0 > k_B T > \frac{\hbar\gamma}{4\pi}$   
 $\rightarrow e^{-\frac{\gamma}{2}t} < e^{-\nu_1 t}$   
 $\rightarrow S(t)$  zerfällt wie  $e^{-\nu_1 t}$

$$T \rightarrow 0 : \nu_n = \frac{2\pi}{\hbar\beta}n = \nu_1 \cdot n$$

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n \geq 1} \dots = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n \geq 1} \quad (\text{III.90})$$

$$\rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} d\nu \frac{\nu e^{-\nu t}}{(\omega_0^2 + \nu^2)^2 - \nu^2\gamma^2} \quad (\text{III.91})$$

für Zeiten  $\omega_0 t \gg 1$  ( $\omega_0 > \gamma$ ):

$$\approx \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} d\nu \nu \frac{e^{-\nu t}}{\omega_0^4} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega_0^4} \frac{1}{t^2} \quad (\text{III.92})$$

$$\Rightarrow \Gamma(t)|_{\text{lange Zeiten}} \rightarrow \frac{\gamma t_1}{\pi M \omega_0^4} \frac{1}{t^2} \quad (\text{III}).93$$

→ S(t) zerfällt algebraisch wie  $\frac{1}{t^2}$

Allgemeiner:

$$J(\omega)|_{\omega \rightarrow 0} \propto \omega^{1+\alpha} \quad (\text{III}).94$$

d.h.

$$\tilde{\gamma}(\omega)|_{\omega \rightarrow 0} \propto \gamma_0 \omega^\alpha \quad (\text{III}).95$$

in Fluktuations-Dissipations-Theorem:

$$\tilde{S}(\omega)|_{T=0} = \hbar \tilde{\chi}_{qq}''(\omega) \quad (\text{III}).96$$

$$\tilde{\chi}_{qq}''(\omega \rightarrow 0) \propto \frac{\omega \gamma_0 \omega^\alpha}{\omega_0^4} \propto \frac{\gamma_0}{\omega_0^4} \omega^{1+\alpha} \quad (\text{III}).97$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^{1+\alpha} e^{i\omega t} \stackrel{x=\omega t}{=} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx x^{1+\alpha} e^{ix}}_{const} \frac{1}{t^{2+\alpha}} \quad (\text{III}).98$$

### III).3. Fluktuations-Dissipations-Theorem

Verknüpfung zwischen Gleichgewichtsfuktuationen und der linearen Antwort auf eine externe Störung

$$H = H_0 + \Delta H \quad , \quad \Delta H = -f(t)q \quad (\text{III}).99$$

im Allgemeinen:  $-f(t) \cdot B$

$$\Delta q(t) = \langle q(t) \rangle - \langle q(0) \rangle = \langle q(t) \rangle - \langle q \rangle_\beta \quad (\text{III}).100$$

für kleine Störungen:

$$\Delta q(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{qq}(t-t') f(t') \quad (\text{III}).101$$

$$\chi_{qq}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [q(t), q(0)] \rangle_\beta \quad (\text{III}).102$$

$$C_{qq}(t) = \langle q(t)q(0) \rangle_\beta \equiv C_+(t) \quad (\text{III}).103$$

$$C_{qq}(-t) = \langle q(0)q(t) \rangle_\beta \equiv C_-(t) = \frac{\text{Tr}\{e^{-\beta H_0} qq(t)\}}{Z} \quad (\text{III}).104$$

$$C_\pm(t) = S(t) \pm iA(t) = \frac{1}{2} \langle \{q(t), q(0)\} \rangle_\beta \pm \frac{1}{2} \langle [q(t), q(0)] \rangle_\beta \quad (\text{III}).105$$

$$A(t) = \frac{1}{2i} \langle [q(t), q(0)] \rangle_\beta \quad (\text{III}).106$$

$$\Rightarrow \chi_{qq}(t) = \frac{-2}{\hbar} \Theta(t) A(t) \quad (\text{III}).107$$

Fouriertrafo:

$$\tilde{C}_{\pm}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} C_{\pm}(t) \quad (\text{III}).108$$

$$\tilde{\chi}_{qq}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} \chi_{qq} \quad (\text{III}).109$$

$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ :

$$\tilde{C}_+(\omega) = \frac{2\pi\hbar}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} \langle n|q|m\rangle \langle m|q|n\rangle \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) \quad (\text{III}).110$$

$$\tilde{C}_-(\omega) = \frac{2\pi\hbar}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n|q|m\rangle \langle m|q|n\rangle \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) \quad (\text{III}).111$$

$$q(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} q e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (\text{III}).112$$

$$\int dt e^{i\omega t} \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} e^{iE_m \frac{t}{\hbar}} \langle m|q|n\rangle e^{-iE_n \frac{t}{\hbar}} \langle n|q|m\rangle \quad (\text{III}).113$$

$$= \int dt e^{i(\hbar\omega + E_m - E_n) \frac{t}{\hbar}} \quad (\text{III}).114$$

$$= 2\pi\hbar \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) \quad (\text{III}).115$$

$$\rightarrow \tilde{C}_+(\omega) = e^{-\omega\hbar\beta} \tilde{C}_-(\omega) \quad (\text{III}).116$$

$$\tilde{\chi}_{qq}''(\omega) = \left(\frac{-2}{\hbar}\right) \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dt A(t) \Theta(t) e^{i\omega t} \quad (\text{III}).117$$

$$= \left(\frac{-2}{\hbar}\right) \text{Im} \int_0^{\infty} dt A(t) e^{i\omega t} \quad (\text{III}).118$$

$$= \left(\frac{-2}{\hbar}\right) \int_0^{\infty} dt A(t) \sin(\omega t) \quad (\text{III}).119$$

$$= \left(\frac{-2}{\hbar}\right) \frac{1}{2i} \left[ \int_0^{\infty} dt A(t) e^{i\omega t} - \int_0^{\infty} dt A(t) e^{-i\omega t} \right] \quad (\text{III}).120$$

$$= \left(\frac{-2}{\hbar}\right) \frac{1}{2i} \left[ \int_0^{\infty} dt A(t) e^{i\omega t} + \int_{-\infty}^0 dt A(t) e^{+i\omega t} \right] \quad (\text{III}).121$$

$$= \frac{i}{\hbar} \tilde{A}(\omega) \quad (\text{III}).122$$

$$\tilde{\chi}_{qq}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \tilde{A}(\omega) = \frac{1}{2\hbar} [\tilde{C}_+(\omega) - \tilde{C}_-(\omega)] = \frac{1}{2\hbar} (1 - e^{-\omega\hbar\beta}) \tilde{C}_+(\omega) \quad (\text{III}).123$$

$$\tilde{S}(\omega) = \frac{1}{2} [\tilde{C}_+(\omega) + \tilde{C}_-(\omega)] \quad (\text{III}).124$$

$$\Rightarrow \tilde{S}(\omega) = \hbar \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \tilde{\chi}_{qq}''(\omega) \quad (\text{III}).125$$

$$\omega\hbar\beta \rightarrow 0 : \hbar \frac{2}{\omega\hbar\beta} = \frac{2}{\omega\beta}$$

# IV). Offene Quantensysteme: Pfadintegraldarstellung

## IV).1. Formalismus

$$H = H_S + H_B + H_{SB}$$

$$H_S = \frac{p^2}{2M} + V(q)$$

$$H_B + H_{SB} = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{m_i \omega_i^2}{2} \left( x_i - \frac{c_i}{m_i \omega_i^2} q \right)^2 \right\}$$

$$\rho_S(t) = Sp_B \{ e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar} H t} \} \quad (IV).1$$

$$[H_S, H_B + H_{SB}] \neq 0 \quad (IV).2$$

$$\langle q'_f | \rho_S(t) | q_f \rangle = \int d\vec{x}_f \langle \vec{x}_f, q'_f | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar} H t} | \vec{x}_f, q_f \rangle \quad (IV).3$$

$$[\vec{x}_f = (x_{1f}, x_{2f}, \dots, x_{Nf})]$$

$$= \int d\vec{x}_f d\vec{x}_i d\vec{x}'_i dq_i dq'_i \langle \vec{x}_f, q'_f | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \vec{x}_i, q_i \rangle \langle \vec{x}_i, q_i | \rho(0) | \vec{x}'_i, q'_i \rangle \langle \vec{x}'_i, q'_i | e^{\frac{i}{\hbar} H t} | \vec{x}_f, q_f \rangle \quad (IV).4$$

Feynman (1947)

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_T + V(q) \quad (IV).5$$

$$\Rightarrow \langle q | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | q' \rangle \propto \int D[q] e^{\frac{i}{\hbar} S[q]} \quad (IV).6$$

$$S[q] = \int_0^t ds \left[ \frac{m}{2} \dot{q}^2(s) - V(q) \right] \quad (IV).7$$

$$G(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \quad (IV).8$$

$$G(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = \underbrace{\left( e^{-\frac{i}{\hbar} H \epsilon} e^{-\frac{i}{\hbar} H \epsilon} \dots \right)}_{N \text{ mal}} \quad (IV).9$$

$$= \left( e^{-\frac{i}{\hbar} H \epsilon} \right)^N \quad (IV).10$$

$$= \left[ e^{-\frac{i}{\hbar} T \epsilon} e^{-\frac{i}{\hbar} V \epsilon} e^{-\frac{i}{\hbar^2} \epsilon^2 \hat{x}} \right]^N \quad (IV).11$$

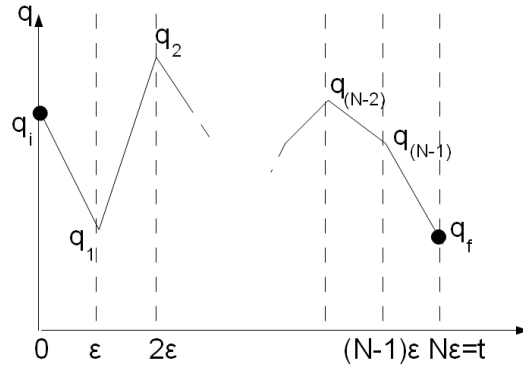


Abbildung IV).1.: Pfade

mit (Baker Campbell Hausdorff)

$$\hat{x} = \frac{i}{2}[T, V] - \frac{\epsilon}{\hbar}[\dots] \quad (\text{IV}).12$$

Trotter-Produktformel:  $N \rightarrow \infty$   $N\epsilon = \text{const.}$ :

$$[e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon T} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon V}]^N \quad (\text{IV}).13$$

$$\Rightarrow \langle q_f | G(t) | q_i \rangle = \langle q_f | \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H} \dots e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H}}_{N \text{ mal}} | q_i \rangle \quad (\text{IV}).14$$

$$= \int dq_1 \dots dq_{N-1} \langle q_f | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H} | q_{N-1} \rangle \dots \langle q_1 | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H} | q_i \rangle \quad (\text{IV}).15$$

$$\langle q_k | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon H} | q_{k-1} \rangle = \langle q_k | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon T} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon V} | q_{k-1} \rangle \quad (\text{IV}).16$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}V(q_{k-1})} \langle q_k | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon \frac{p^2}{2m}} | q_{k-1} \rangle \quad (\text{IV}).17$$

$$\langle q_k | e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon \frac{p^2}{2m}} | q_{k-1} \rangle = \int dp' dp'' \langle q_k | p' \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon \frac{p'^2}{2m}} \delta(p' - p'') \langle p'' | q_{k-1} \rangle \quad (\text{IV}).18$$

$$= \int dp' e^{\frac{i}{\hbar}p'(q_k - q_{k-1})} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon \frac{p'^2}{2m}} \quad (\text{IV}).19$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} e^{i\frac{m}{2\hbar\epsilon}(q_k - q_{k-1})^2} \quad (\text{IV}).20$$

$$= \int \underbrace{\lim_{\text{siehe } \blacklozenge} \frac{dq_1}{\sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}} \frac{dq_2}{\sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}} \dots \frac{dq_{N-1}}{\sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}}}_{D[q]} \cdot \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \sum_{k=1}^N \epsilon \frac{(q_k - q_{k-1})^2 m}{2\epsilon^2} - \epsilon V(q_{k-1}) \right] \right\} \quad (\text{IV}).21$$

$$= \int D[q] e^{\frac{i}{\hbar}S[q]} \quad (\text{IV}).22$$

$$\blacklozenge = N \rightarrow \infty ; N\epsilon = \text{const.} ; q_0 = q_i ; q_N = q_f \quad (\text{IV}).23$$

$$S[q] = \int_0^t ds \left[ \frac{\dot{q}^2 m}{2} - V(q) \right] \quad (\text{IV}).24$$

Summe über Polygonzüge  $\rightarrow$  Summe über Pfade

## IV).2. Harmonischer Oszillator

Zerlege:

$$q(s) = q_{kl}(s) + y(s) \quad (\text{IV}).25$$

$$q_{kl}(0) = q_i \quad q_{kl}(t) = q_f \quad (\text{IV}).26$$

$$y(0) = y(t) = 0 \quad (\text{IV}).27$$

$$S[q_{kl} + y] = \int_0^t ds \left\{ \frac{m}{2} [\dot{q}_{kl}^2 + 2\dot{q}_{kl}\dot{y} + \dot{y}^2] - \frac{m\omega^2}{2} [q_{kl}^2 + 2q_{kl}y + y^2] \right\} \quad (\text{IV}).28$$

$$\begin{aligned} &\stackrel{\nabla}{=} \int_0^t ds \left\{ \frac{m}{2} \dot{q}_{kl}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 q_{kl}^2 \right\} - \int_0^t ds y \{ m\ddot{q}_{kl} + m\omega^2 q_{kl} \} + \int_0^t ds \left\{ \frac{m}{2} \dot{y}^2 - \frac{m\omega^2}{2} y^2 \right\} \\ &= S[q_{kl}] + S[y] \end{aligned} \quad (\text{IV}).30$$

[  $\nabla$

$$\int_0^t 2\dot{q}_{kl}\dot{y} ds = \underbrace{2\dot{q}_{kl}y}_0^t - \int_0^t ds 2\ddot{q}_{kl}y \quad (\text{IV}).31$$

]

$$\underbrace{\langle q_f | G(t) | q_i \rangle}_{G(q_f, t, q_i)} = e^{\frac{i}{\hbar} S[q_{kl}]} \int_{y(0)=y(t)=0} D[y] e^{\frac{i}{\hbar} S[y]} = e^{\frac{i}{\hbar} S[q_{kl}]} G(0, t, 0) \quad (\text{IV}).32$$

**klassischer Pfad**

$$m\ddot{q}_{kl} + m\omega^2 q_{kl} = 0 \quad (\text{IV}).33$$

$$V(q) = \frac{m}{2} \omega^2 q^2 \quad (\text{IV}).34$$

$$q_{kl}(s) = A \sin(\omega s) + B \cos(\omega s) \quad (\text{IV}).35$$

$$q_{kl}(0) = B = q_i \quad (\text{IV}).36$$

$$q_{kl}(t) = A \sin(\omega t) + q_i \cos(\omega t) \stackrel{!}{=} q_f \quad (\text{IV}).37$$

$$\Rightarrow A = \frac{q_f - q_i \cos(\omega t)}{\sin(\omega t)} \quad (\text{IV}).38$$

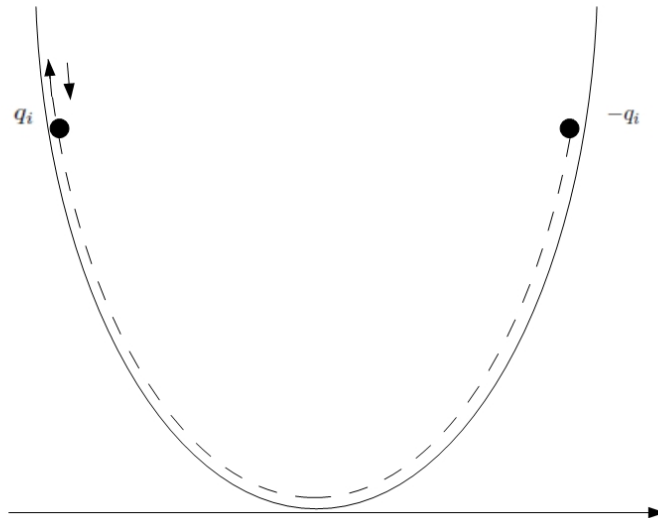


Abbildung IV).2.: klassischer Pfad

### klassische Wirkung

$$S[q_{kl}] = \int_0^t ds \left\{ \frac{m}{2} \dot{q}_{kl}^2(s) - \frac{m}{2} \omega^2 q_{kl}^2(s) \right\} \quad (\text{IV}).39$$

$$= \frac{m}{2} \dot{q}_{kl}(s) q_{kl}(s) \Big|_0^t + \frac{m}{2} \int_0^t ds q_{kl}(s) \underbrace{\{ \ddot{q}_{kl} + \omega^2 q_{kl} \}}_{=0} \quad (\text{IV}).40$$

$$= \frac{m}{2} \{ \dot{q}_{kl}(t) q_f - \dot{q}_{kl}(0) q_i \} \quad (\text{IV}).41$$

$$= \frac{m\omega}{2 \sin(\omega t)} [(q_f^2 + q_i^2) \cos(\omega t) - 2q_i q_f] \quad (\text{IV}).42$$

### wie kommt man daraus auf Energieeigenwerte?

$$\mathbb{I} = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \quad (\text{IV}).43$$

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (\text{IV}).44$$

$$\langle q_f | \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} H t}}_{\mathbb{I} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \mathbb{I}} | q_i \rangle \quad (\text{IV}).45$$

$$\sum_n \phi_n^*(q_f) \phi_n(q_i) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = G(q_f, t, q_i) \quad (\text{IV}).46$$

Resolvente:

$$\tilde{G}(q_f, E, q_i) = \int_0^\infty dt G(q_f, t, q_i) e^{\frac{i}{\hbar}Et - \frac{\epsilon}{\hbar}t} = \frac{\hbar}{i} \sum_n \frac{\phi_n^*(q_f) \phi_n(q_i)}{E_n - E - i\epsilon} \quad (\text{IV}.47)$$

$\epsilon > 0$

$$\int_{-\infty}^\infty dq_f \tilde{G}(q_f, E, q_f) = \sum_n \frac{1}{E_n - E - i\epsilon} \quad (\text{IV}.48)$$

**berechne Integral über alle Pfade**

$$S[y] = \int_0^t ds \left\{ \frac{m}{2} \dot{y}^2(s) - \frac{m}{2} \omega^2 y^2(s) \right\} = \frac{m}{2} \dot{y}(s) y(s) \Big|_0^t - \frac{m}{2} \int_0^t ds y(s) \hat{L}^{(2)} y(s) \quad (\text{IV}.49)$$

$$\hat{L}^{(2)} = -\frac{d^2}{ds^2} - \omega^2 \quad (\text{IV}.50)$$

**[Einschub: Zeit als kontinuierlicher Laufindex**

$$e^{\vec{x} A \vec{x}} \quad (\text{IV}.51)$$

$$\vec{x} \hat{=} y(s_i) \quad A \hat{=} \hat{L}^{(2)} \quad (\text{IV}.52)$$

→ hochdimensionales Gaußintegral

mache aus  $\hat{L}^{(2)}$  Matrix → Projektion in Basis

[  $y(0) = y(t) = 0$  ]

$$\hat{L}^{(2)} \phi_j(s) = \lambda_j \phi_j(s) \quad (\text{IV}.53)$$

$$\phi_j(0) = \phi_j(t) = 0 \quad (\text{IV}.54)$$

$$y(s) = \sum_j c_j \phi_j(s) \quad (\text{IV}.55)$$

$$\phi_j(s) = \sqrt{\frac{2}{t}} \sin\left(\frac{\pi}{t} j s\right) \quad (\text{IV}.56)$$

$$\lambda_j = \frac{\pi^2 j^2}{t^2} - \omega^2 \quad (\text{IV}.57)$$

$$\int_0^t ds \phi_j(s) \phi_k(s) = \delta_{jk} \quad (\text{IV}.58)$$

$$\int D[y] \rightarrow \int dc_1 dc_2 dc_3 \cdot \dots \cdot dc_n \dots \quad (\text{IV}.59)$$

$$S[y = \sum c_j \phi_j] = -\frac{m}{2} \int_0^t ds y(s) \sum_j c_j \underbrace{\hat{L}^{(2)} \phi_j(s)}_{\lambda_j \phi_j(s)} \quad (\text{IV}.60)$$

$$= -\frac{m}{2} \int_0^t ds \sum_{j,j'} c_{j'} \lambda_j c_j \phi_{j'}(s) \phi_j(s) \quad (\text{IV}.61)$$

$$= -\frac{m}{2} \sum_j \lambda_j c_j^2 \quad (\text{IV}.62)$$

$$G(0, t, 0) = \int D[y] e^{\frac{i}{\hbar} S[y]} \quad (\text{IV}.63)$$

$$\propto \int dc_1 \cdots dc_n \cdots e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \sum_j \lambda_j c_j^2} \quad (\text{IV}.64)$$

$$= \int \left( \prod_j dc_j \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \sum_j \lambda_j c_j^2} \quad (\text{IV}.65)$$

$$G(0, t, 0) = N \prod_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} \Big|_{n \rightarrow \infty} \quad (\text{IV}.66)$$

$$\prod_{j=1}^n \frac{1}{\lambda_j} = \prod_j \frac{1}{\frac{\pi^2 j^2}{t^2} - \omega^2} \quad (\text{IV}.67)$$

$$= \left( \prod_{j=1}^n \frac{t^2}{\pi^2 j^2} \right) \underbrace{\prod_j \frac{1}{1 - \left(\frac{\omega t}{\pi j}\right)^2}}_{\frac{\omega t}{\sin(\omega t)}} \quad (\text{IV}.68)$$

$$G(0, t, 0) = \mathcal{N} \left( \prod_{j=1}^n \frac{t^2}{\pi^2 j^2} \right)^{1/2} \cdot \sqrt{\frac{\omega t}{\sin(\omega t)}} = \mathcal{N}' \sqrt{\frac{\omega t}{\sin(\omega t)}} \quad (\text{IV}.69)$$

### berechne Normierung mit Referenzpropagator

Normierung freies Teilchen  $\omega \rightarrow 0$

$$G_0(0, t, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \quad (\text{IV}.70)$$

$$G(0, t, 0)|_{\omega \rightarrow 0} \rightarrow G_0(0, t, 0) \quad (\text{IV}.71)$$

$$\mathcal{N}' = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \quad (\text{IV}.72)$$

$$\mathcal{N} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \left( \prod_j \frac{\hbar^2}{\pi^2 j^2} \right)^{-1/2} \quad (\text{IV}.73)$$

$$\Rightarrow G(q_f, t, q_i) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)}} \cdot \exp\left\{ \frac{im\omega}{2\hbar} \frac{(q_f^2 + q_i^2) \cos(\omega t) - 2q_i q_f}{\sin(\omega t)} \right\}$$

### Nullstellen im Nenner:

$\omega t = n\pi + \eta \quad \eta > 0$  klein

$$G(q_f, t, q_i) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \eta (-1)^n}} \cdot \exp\left\{ \frac{im\omega}{2\hbar} \frac{(q_i - q_f (-1)^n)^2 (-1)^n}{(-1)^n \eta} \right\} \quad (\text{IV}.74)$$

$$= \frac{1}{\underbrace{\sqrt{(-1)^n}}_{e^{-i\frac{\pi}{2}n}}} \delta(q_i - q_f (-1)^n) \quad (\text{IV}.75)$$

$$G(q_f, t, q_i) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar |\sin(\omega t)|}} e^{i\frac{m\omega}{2\hbar}} \cdots e^{\underbrace{i\frac{\pi}{2}n}_{\text{Maslovphase}}} \quad (\text{IV}).76$$

$$\omega t = n\pi + \delta\phi \quad \delta\phi < \pi$$

wie hängt Maslovphase mit Fluktuationen zusammen

$$\lambda_j = \frac{\pi^2 j^2}{t^2} - \omega^2 \quad (\text{IV}).77$$

$$\left(\frac{\pi^2 j^2}{t^2}\right)^2 \left(1 - \left(\frac{\omega t}{\pi j}\right)^2\right) \quad (\text{IV}).78$$

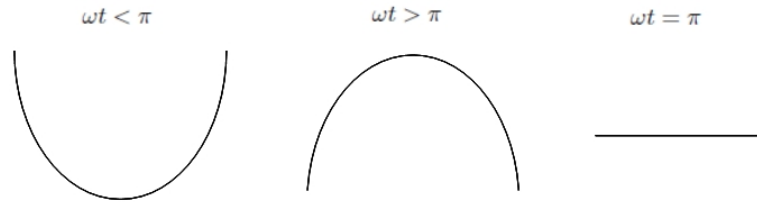


Abbildung IV).3.: Krümmungsbildchen

### IV).3. Imaginärzeitpfadintegral

#### Dynamik

Dynamik:  $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$

Thermodynamik:  $e^{-\beta H}$

Wick-Rotation:  $t \rightarrow -i\hbar\beta$

$$\langle q_f | e^{-\beta H} | q_i \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(\omega\hbar\beta)}} \cdot \exp\left\{ \frac{-m\omega}{2\hbar} \frac{(q_f^2 + q_i^2) \cosh(\omega\hbar\beta) - 2q_i q_f}{\sinh(\omega\hbar\beta)} \right\} \quad (\text{IV}).79$$

$$\sin[\omega(-i)\hbar\beta] = -i \sinh(\omega\hbar\beta) \quad (\text{IV}).80$$

$$\langle q_f | e^{-\beta H} | q_i \rangle = \sum_n \phi_n(q_f) \phi_n(q_i) e^{-\beta E_n} \quad (\text{IV}).81$$

- $\omega\hbar\beta \ll 1$  Kurzzeitpropagation:

$$\rho_\beta(q_f, q_f) \propto e^{-\frac{\beta m \omega^2}{2} q_f^2} = e^{-\beta V(q)}$$

- $\omega\hbar\beta \rightarrow \infty$   $T \rightarrow 0$

$$\rho_\beta(q_f, q_f) \propto e^{-\frac{m\omega}{\hbar} q_f^2} \propto \phi_0(q_f)^2$$

## Euklidische Wirkung

$$\tau \in [0, \hbar\beta]$$

$$S[q] = \int_0^t ds \frac{m}{2} \dot{q}^2(s) - V(q)|_{s=-i\tau} \quad (\text{IV}.82)$$

$$= (-i) \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \left[ \frac{dq(-i\tau)}{d(-i\tau)} \right]^2 - V(q) \right\} \quad \text{mit } [\bar{q}(\tau) = q(-i\tau)] \quad (\text{IV}.83)$$

$$= i \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{\bar{q}}^2(\tau) + V(\bar{q}) \right\} \quad (\text{IV}.84)$$

$$= iS_E[\bar{q}] \quad (\text{IV}.85)$$

$$\langle q_f | e^{-\beta H} | q_i \rangle \equiv \langle q_f | e^{-i \frac{\hbar}{\hbar} H t} | q_i \rangle |_{t=-i\hbar\beta} = \int D[\bar{q}] e^{\frac{i}{\hbar} S_E[\bar{q}]} \quad (\text{IV}.86)$$

Imaginärzeitpfadintegral:

$$\rho_\beta(q_f, q_i) \equiv \int_{\bar{q}(0)=q_i; \bar{q}(\hbar\beta)=q_f} D[\bar{q}] e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[\bar{q}]}$$

## Pfade minimaler Wirkung

$$\delta S_E[\bar{q}_{ma}] = 0 \quad m\ddot{\bar{q}}_{ma} - V'(\bar{q}_{ma}) = 0 \quad (\text{IV}.87)$$

entspricht Newtonscher Mechanik in -V

$$\text{harmonischer Oszillator: } V(\bar{q}) = \frac{m}{2} \omega^2 \bar{q}^2 \quad m\ddot{\bar{q}}^2 - m\omega^2 \bar{q} = 0$$

minimale Wirkungspfade:

$$\bar{q}(\tau) = q_i \cosh(\omega\tau) + \frac{q_f - q_i \cosh(\omega\hbar\beta)}{\sinh(\omega\hbar\beta)} \cdot \sinh(\omega\tau) \quad (\text{IV}.88)$$

Vergleich mit Realzeitlösung:

$$\omega^2 \rightarrow -\omega^2 \quad (\text{IV}.89)$$

$$\omega \rightarrow i\omega \quad (\text{IV}.90)$$

$$\rho_\beta(q_f, q_i) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(\omega\hbar\beta)}} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\pi} \frac{(q_f^2 + q_i^2) \cosh(\omega\hbar\beta) - 2q_i q_f}{\sinh(\omega\hbar\beta)} \right\} \quad (\text{IV}.91)$$

[ Nebenrechnung

$$\frac{\cosh(\omega\hbar\beta) - 1}{\sinh(\omega\hbar\beta)} = \tanh\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \quad (\text{IV}.92)$$

$$\sinh(x) = 2 \sinh\left(\frac{x}{2}\right) \cosh\left(\frac{x}{2}\right) \quad (\text{IV}.93)$$

]

$$P_\beta(q) = \frac{1}{Z_\beta} \rho_\beta(q, q) = \frac{1}{Z_\beta} \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(\omega\hbar\beta)}} \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar} q^2 \tanh\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right)\right\} \quad (\text{IV}).94$$

$$\int dq P_\beta(q) = 1 \quad (\text{IV}).95$$

$$\Rightarrow Z_\beta = \frac{1}{2 \sinh\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right)} \quad (\text{IV}).96$$

$$P_\beta(q) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar} \tanh\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right)} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} \tanh\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) q^2} \quad (\text{IV}).97$$

### Physikalischer Inhalt

- $\omega\hbar\beta \rightarrow 0$   $P_\beta(q) \approx \sqrt{\frac{m\omega^2\beta}{2\pi}} e^{-\underbrace{\beta \frac{m}{2} \omega^2 q^2}_{\beta V(q)}}$

- $\omega\hbar\beta \rightarrow \infty$   $P_\beta(q) \rightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} q^2}$

(Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators)<sup>2</sup> =  $\Psi^2$

$$\langle q^2 \rangle_\beta = \int dq q^2 P_\beta(q) = \frac{\hbar}{2m\omega} \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \quad (\text{IV}).98$$

aus Gleichverteilungssatz:  $\left(\frac{m\omega^2}{2} \langle q^2 \rangle = \frac{kT}{2} \quad \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{kT}{2}\right)$

$$\langle q^2 \rangle_{kl} = \frac{\hbar}{2m\omega} \cdot \frac{2}{\omega\hbar\beta} = \frac{1}{m\omega^2\beta} = \frac{kT}{m\omega^2} \quad (\text{IV}).99$$

## IV).4. Einfluss eines linear gekoppelten Oszillators

$$H = H_S + H_B + H_I$$

$$H_S = \frac{p^2}{2M} + V_0(q)$$

$$H_B = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

$$H_I = cqx$$

Imaginärzeitpfadintegral

$$\tilde{\rho}_\beta(q, x, q', x') = \int_{q(0)=q' | x(0)=x'; q(\hbar\beta)=q | x(\hbar\beta)=x} D[q] D[x] e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[q, x]} \quad (\text{IV}).100$$

$$S_E[q, x] = S_{E,S}[q] + S_{E,B}[x] + S_{E,I}[q, x] \quad (\text{IV}).101$$

$$S_{E,S}[q] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2(\tau) - V_0(q) \right\} \quad (\text{IV}).102$$

$$S_{E,B}[x] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}^2(\tau) + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right\} \quad (\text{IV}).103$$

$$S_{E,I}[q, x] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau c q(\tau) x(\tau) \quad (\text{IV}).104$$

### Reduzierte Dichte

$$\rho_\beta = \frac{\text{Tr}_B \{ \tilde{\rho}_\beta \}}{Z_B} \quad (\text{IV}).105$$

[ für  $c=0$ :  $\rho_\beta = e^{-\beta H_S}$   
 ]

$$\rho_\beta(q, q') = \frac{\int dx \tilde{\rho}_\beta(q, x, q', x)}{Z_B} \quad (\text{IV}).106$$

$$= \frac{1}{Z_B} \int_{q, q'} D[q] \oint D[x] e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[q, x]} \quad (\text{IV}).107$$

, da  $Z_B = \text{Sp}_B \{ e^{-\beta H_B} \}$

$$\rho_\beta(q, q') = \int D[q] e^{-\frac{1}{\hbar} S_E, S[q]} F[q] \quad (\text{IV}).108$$

**Influenzfunktional:**  $F[q] = \frac{\oint D[x] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,B}[x]} e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,I}[q, x]}}{\oint D[x] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,B}[x]}}$  für  $c=0$ ,  $F[q]=1$

Influenzfunktional lässt sich interpretieren als Erwartungswert

$$\langle e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,I}[q, x]} \rangle_B \quad (\text{IV}).109$$

$$F[q] = \frac{\oint}{\oint} \quad (\text{IV}).110$$

$$= \frac{\int dx \int_{x \rightarrow x} D[x] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,B}[x]} e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,I}[q, x]}}{\int dx \int_{x \rightarrow x} D[x] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,B}[x]}} \quad (\text{IV}).111$$

$$S_{E,B} + S_{E,I} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 + c q x \right\} \quad (\text{IV}).112$$

## minimale Wirkungspfade

$$m\ddot{x} - m\omega^2 x - cq = 0 \quad (\text{IV}).113$$

mit  $x(0) = x(\hbar\beta) = x \Rightarrow x_{ma}$

$$x = x_{ma} + y \quad y(0) = y(\hbar\beta) = 0 \quad (\text{IV}).114$$

$$F[q] = \frac{\int dx e^{-\frac{1}{\hbar}[S_{E,B}+S_{E,I}][x_{ma}]} \int D[y] e^{-\frac{1}{\hbar}S_{E,B}[y]}}{\int dx e^{-\frac{1}{\hbar}S_{E,B}[x_{ma}]} \int D[y] e^{-\frac{1}{\hbar}S_{E,B}[y]}} \quad (\text{IV}).115$$

$$(S_{E,B} + S_{E,I})[x_{ma}] = \frac{m}{2} x_{ma}(\tau) \dot{x}_{ma}|_0^{\hbar\beta} \quad (\text{IV}).116$$

## Lösen

Lösung:

$$x_{ma,homogen} = x \cosh(\omega\tau) + \frac{1 - \cosh(\omega\hbar\beta)}{\sinh(\omega\hbar\beta)} x \sinh(\omega\tau) \quad (\text{IV}).117$$

$$x_{ma,inhomogen} = \frac{c}{m} \int_0^\tau d\tau' q(\tau') \frac{\sinh(\omega(\tau - \tau'))}{\omega} \quad (\text{IV}).118$$

verifizieren:

$$\dot{x}_{ma,inhomogen} = \frac{c}{m} \int_0^\tau d\tau' q(\tau') \cosh(\omega(\tau - \tau')) \quad (\text{IV}).119$$

$$\ddot{x}_{ma,inhomogen} = \frac{c}{m} q(\tau) + \omega^2 \underbrace{\frac{c}{m} \int_0^\tau d\tau' q(\tau') \frac{\sinh(\omega(\tau - \tau'))}{\omega}}_{x_{ma,inhomogen}} \quad (\text{IV}).120$$

$$x_{ma}(\tau) \dot{x}_{ma}(\tau)|_0^{\hbar\beta} = x[\dot{x}_{ma}(\hbar\beta) - \dot{x}_{ma}(0)] \quad (\text{IV}).121$$

$$\dot{x}_{ma,homogen}(\tau) = \omega x \left[ \sinh(\omega\tau) + \frac{1 - \cosh(\omega\hbar\beta)}{\sinh(\omega\hbar\beta)} \cosh(\omega\tau) \right] \quad (\text{IV}).122$$

$$\dot{x}_{ma,inhomogen} = \frac{c}{m} \int_0^\tau d\tau' q(\tau') \cosh(\omega(\tau - \tau')) \quad (\text{IV}).123$$

$$\Rightarrow \frac{\int dx e^{-(ax^2+bx)}}{\int dx e^{-ax^2}} \quad (\text{IV}).124$$

$$F[q] = \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' q(\tau) K_1(\tau - \tau') q(\tau') \right\} \quad (\text{IV}).125$$

$$K_1(\tau - \tau') = -\frac{c^2}{2\omega M} \frac{\cosh(\omega(\tau - \tau'))}{\sinh(\omega\hbar\beta/2)} \quad (\text{IV}).126$$

$$\Rightarrow \rho_\beta(q, q') = \int D[q] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S_{E,S}[q] - \frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' q(\tau) K_1(\tau - \tau') q(\tau') \right\} \quad (IV).127$$

$$= \int D[q] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,eff}[q]} \quad (IV).128$$

$$S_{eff} = S_{E,S} + \frac{1}{2} \int \int q(\tau) K_1(\tau - \tau') q(\tau') \quad (IV).129$$

$$= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{q}^2 + V_0(q) + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' q(\tau) K_1(\tau - \tau') q(\tau') \right\} \quad (IV).130$$

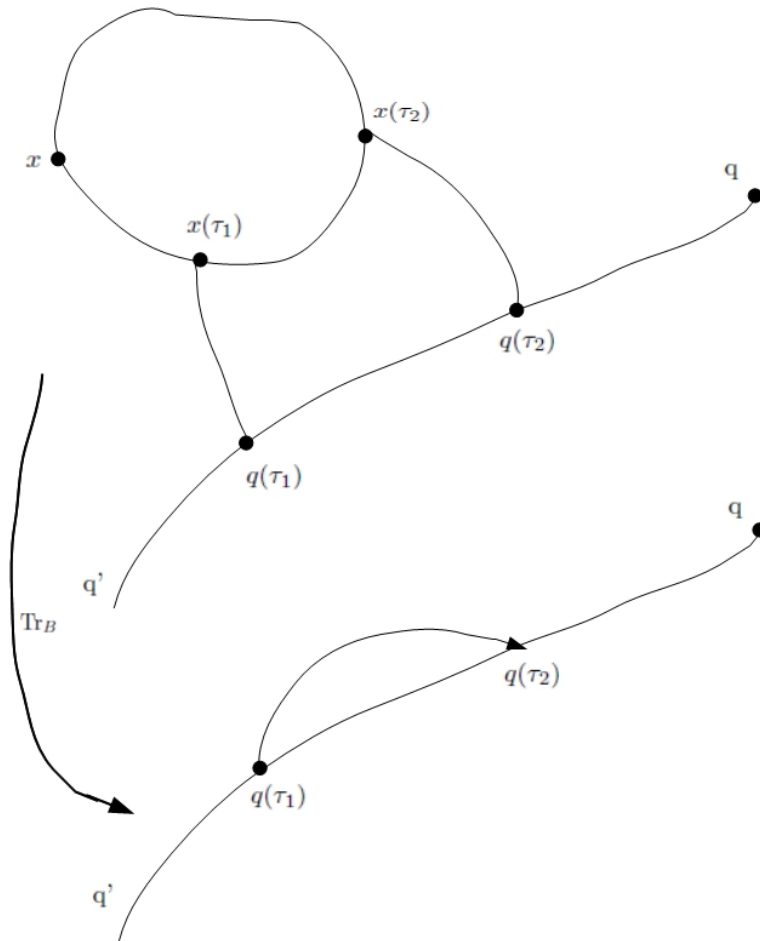


Abbildung IV).4.: Störung

## IV).5. Übergang zum Oszillatorbad

$$H = H_0 \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{m_i \omega_i^2}{2} x_i^2 \right] + q \sum_{i=1}^N c_i x_i \quad (\text{IV}).131$$

$$\rho_\beta(q, q') = \int D[q] \oint D[x_1] \cdots D[x_N] e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[q, \{x\}]} \frac{1}{Z_B} \quad (\text{IV}).132$$

$$= \int D[q] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{E,0}[q]} F_N[q] \quad (\text{IV}).133$$

$$F_N[q] = \prod_{i=1}^N F_i[q] = e^{-\frac{1}{\hbar} \Phi_N[q]} \quad (\text{IV}).134$$

$$\Phi_N[q] = \sum_{i=1}^N \Phi_i[q_i] \quad (\text{IV}).135$$

$$\Phi_N[q] = -\frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' q(\tau) K_N(\tau - \tau') q(\tau') \quad (\text{IV}).136$$

$$K_N(\tau - \tau') = \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{2m_i \omega_i} \frac{\cosh(\omega_i(|\tau - \tau'| - \frac{\hbar\beta}{2}))}{\sinh(\frac{\omega_i \hbar\beta}{2})} \quad (\text{IV}).137$$

definiere:

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i \omega_i} \delta(\omega - \omega_i) \quad (\text{IV}).138$$

$$\sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{2m_i \omega_i} f(\omega_i) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) f(\omega) \quad (\text{IV}).139$$

Übergang zu stetiger Funktion  $J(\omega)$ : Quasikontinuum von Moden  
**Gleichgewichtsverteilung für dissipatives System:**

$$\rho_\beta(q, q') = \int D[q] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{eff}[q]}$$

$$S_{eff}[q] = S_{E,0}[q] - \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau d\tau' K(\tau - \tau') q(\tau) q(\tau')$$

$$K(\tau - \tau') = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \frac{\cosh(\omega(|\tau - \tau'| - \frac{\hbar\beta}{2}))}{\sinh(\frac{\omega \hbar\beta}{2})}$$

**Eigenschaften von  $K(\tau - \tau')$**

- $K(\tau) = K(\hbar\beta - \tau)$
- $K(\tau \rightarrow 0^+) = K(\tau \rightarrow \hbar\beta^-)$

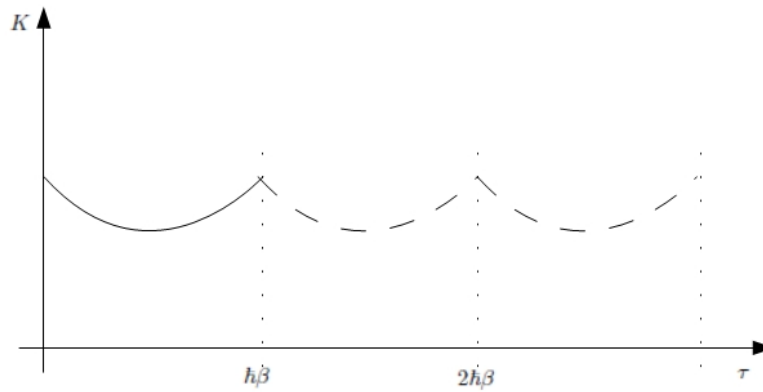


Abbildung IV).5.: Space

- Fourierreihe;  $K(\tau)$  periodisch fortgesetzt

$$K(\tau) = \frac{M}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{i\nu_n \tau} \quad (\text{IV}).140$$

mit  $\nu_n = \frac{2\pi}{\hbar\beta} n$  und  $M$ =Systemmasse

- $K(\tau) = K^*(\tau) = K(-\tau)$

$$\Rightarrow g_n = g_{-n}$$

$$\frac{\cosh(\omega(\tau - \frac{\hbar\beta}{2}))}{\sinh(\frac{\omega\hbar\beta}{2})} = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{2\omega}{\omega^2 + \nu_n^2} e^{i\nu_n \tau}$$

$$\Rightarrow g_n = \frac{1}{M} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \frac{2\omega}{\omega^2 + \nu_n^2}$$

### ohmsche Dichte

$$J(\omega) = M\gamma\omega \quad (\text{IV}).141$$

definiere periodisch fortgesetzte  $\delta$ -Funktion:

$$: \delta(\tau) := \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\tau - m\hbar\beta) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\nu_n \tau} \quad (\text{IV}).142$$

$$\frac{\omega}{\omega^2 + \nu_n^2} = \frac{1}{\omega} - \frac{\nu_n^2}{\omega(\omega^2 + \nu_n^2)} \quad (\text{IV}).143$$

$$g_n = \mu^2 - \xi_n \quad (\text{IV}).144$$

$$\mu^2 = \frac{2}{M} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} \quad (\text{IV}).145$$

$$\xi_n = \frac{1}{M} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} \frac{2\nu_n^2}{\omega^2 + \nu_n^2} \quad (\text{IV}).146$$

$$\Rightarrow K(\tau) = \frac{M}{\hbar\beta} \sum_n g_n e^{i\nu_n \tau} = M\mu^2 : \delta(\tau) : -k(\tau) \quad (\text{IV}).147$$

mit  $k(\tau) = \frac{M}{\hbar\beta} \sum_n \xi_n e^{i\nu_n \tau}$   
 $\xi_0 = 0 :$

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau k(\tau) = 0 \quad (\text{IV}).148$$

$$S_{eff}[q] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} \dot{q}^2(\tau) + \underbrace{V_0(q) - \frac{1}{2}\mu^2 q^2(\tau)}_{V(q)} + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' q(\tau) k(\tau - \tau') q(\tau') \right] \quad (\text{IV}).149$$

### minimale Wirkungspfade

$$M\ddot{q}(\tau) - V'(q) - \int_0^{\hbar\beta} d\tau' k(\tau - \tau') q(\tau') = 0 \quad (\text{IV}).150$$

$$q(\tau) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_n q_n e^{i\nu_n \tau} \quad (\text{IV}).151$$

$$\rho_\beta(q, q') = \int D[q] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{eff}[q]} \quad (\text{IV}).152$$

$$Z_\beta = \int dq \rho_\beta(q, q') = \oint D[q] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{eff}[q]} \quad (\text{IV}).153$$

# V). Dissipatives Tunneln

## V).1. Qualitative Betrachtung, ImF Methode

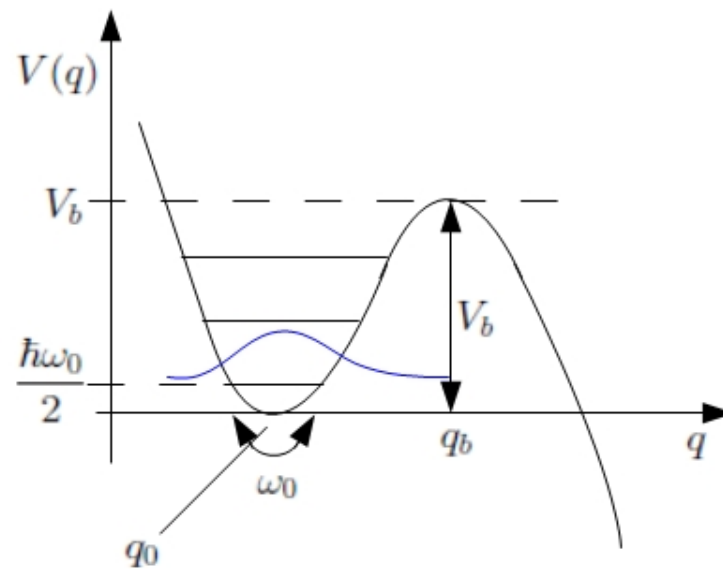


Abbildung V).1.: Pot

Eigenzustände für  $V_b \rightarrow \infty$ :

$$\Psi_n(q, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \phi_n(q) \quad (\text{V}.1)$$

$$|\Psi_n(q, t)|^2 = |\phi_n(q)|^2 \quad (\text{V}.2)$$

Eigenzustände für  $V_b \gg \hbar\omega_0$ ;  $k_B T$  (quasistationär):

$P(t)$  = Population

$$\frac{\dot{P}(t)}{P(t)} = -\Gamma$$

$$P(t) = e^{-\Gamma t} P(0)$$

gilt nur für intermediäre Zeiten

transiente Zeitskalen  $\ll t \ll \frac{1}{\Gamma}$

$$|\Psi_n(q, t)|^2 = e^{-\Gamma_n t} |\phi_n(q)|^2 \quad q \in \text{Mulde} \quad (\text{V}.3)$$

stabil  $\rightarrow$  metastabil

$$E_n \rightarrow E_n - \frac{-i\Gamma_n t}{2} \quad (\text{V}.4)$$

$$\Psi_n(q, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} e^{-\frac{\Gamma_n t}{2}} \phi_n(q) \quad (\text{V.5})$$

Metastabil:  $\Gamma_n \ll \omega_0$

### Zustandsumme

$$Z = \sum_n e^{-\beta(E_n - \frac{i\hbar\Gamma_n}{2})} \quad [\hbar\Gamma_n \ll E_n] \quad (\text{V.6})$$

$$\approx \sum_n e^{-\beta E_n} (1 + \beta \frac{i\hbar\Gamma_n}{2}) \quad (\text{V.7})$$

$$= \sum_n e^{-\beta E_n} + i \frac{\hbar\beta}{2} \sum_n \Gamma_n e^{-\beta E_n} \quad (\text{V.8})$$

$$= \sum_n e^{-\beta E_n} \left[ 1 + i \frac{\hbar\beta}{2} \frac{\sum_n \Gamma_n e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} \right] \quad (\text{V.9})$$

$$Z = Z_0 \left[ 1 + i \frac{\hbar\beta}{2} \langle \Gamma \rangle \right] \quad (\text{V.10})$$

### freie Energie

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (\text{V.11})$$

$$= -\frac{1}{\beta} \ln [Z_0 (1 + i \frac{\hbar\beta}{2} \langle \Gamma \rangle)] \quad (\text{V.12})$$

$$= -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 - \frac{1}{\beta} \ln (1 + i \frac{\hbar\beta}{2} \langle \Gamma \rangle) \quad (\text{V.13})$$

$$\approx -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 - i \frac{\hbar}{2} \langle \Gamma \rangle \quad [\ln(1+x) \approx x; |x| \ll 1] \quad (\text{V.14})$$

$$\text{Im}\{F\} = -\frac{\hbar}{2} \langle \Gamma \rangle \quad (\text{V.15})$$

$$\Rightarrow \langle \Gamma \rangle = -\frac{2}{\hbar} \text{Im}\{F\}$$

$$Z = \oint D[q] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{eff}[q]} \quad (\text{V.16})$$

### ImF Methode für $H_S + H_B + H_I$

$$H = H_S + H_B + H_I$$

$$H_S = \frac{p^2}{2M} + V(q)$$

$$V(q) \approx \begin{cases} \frac{M}{2} \omega_0^2 (q - q_0)^2 & \text{für } q \text{ bei } q_0 \\ V_b - \frac{M}{2} \omega_b^2 (q - q_b)^2 & \text{für } q \text{ bei } q_b \end{cases} \quad (\text{V.17})$$

$$Z = \oint D[q] e^{-\underbrace{S_E[q]}_{\text{effektive Wirkung}}} \quad (\text{V.18})$$

$$= \text{Tr}\{e^{-\beta H}\} \quad (\text{V.19})$$

$$= \text{Tr}_S\{\text{Tr}_B\{e^{-\beta H}\}\} \quad (\text{V.20})$$

### minimale Wirkungspfade

$$M\ddot{q} - V'(q) - \int_0^{\hbar\beta} d\tau' k(\tau - \tau') q(\tau') = 0 \quad (\text{V.21})$$

$$k(\tau) = \frac{M}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \xi_n e^{i\nu_n \tau} \quad (\text{V.22})$$

$\hbar\beta$ -periodisch

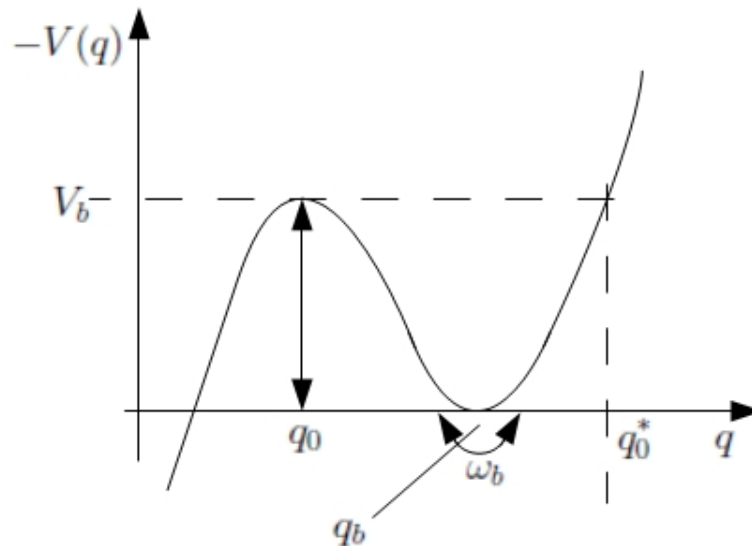


Abbildung V).2.: inverses Potential

- $q_1(\tau) = q_0$
- $q_2(\tau) = q_b$

verifiziere DGL:  $\int_0^{\hbar\beta} d\tau' k(\tau - \tau') = \frac{M}{\hbar\beta} \sum_n \xi_n \underbrace{\int_0^{\hbar\beta} d\tau' e^{i\nu_n(\tau - \tau')} \cdot 1}_{\delta_{n,0} \hbar\beta}$  , aber  $\xi_0 = 0$

- kleine Oszillationen haben Periodendauer  $\frac{2\pi}{\omega_b}$

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{\omega_b} &\leq \hbar\beta \\ 2\pi &\leq \hbar\beta\omega_b: \text{ nicht triviale Pfade} \end{aligned}$$

## V).2. Zerfallsrate für hohe Temperaturen

Wirkung:

$$S_E[q_1] = \hbar\beta V(q_0) \quad (\text{V}).23$$

$$S_E[q_2] = \hbar\beta V(q_b) \quad (\text{V}).24$$

### Fluktuationen

$q(\tau) = q_0 + y(\tau) \rightarrow$  Zustandssumme von harmonischem Muldenpotential

$q(\tau) = q_b + y(\tau)$

Annahme: Fluktuationen  $y(\tau)$  klein ( $\hat{=} V_b$  hinreichend groß)

$$V(q) \approx V(q_b) - \frac{M}{2} \omega_b^2 (q - q_b)^2 \quad (\text{V}).25$$

$$S_E[q_b + y] \approx \hbar\beta V(q_b) + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[ \frac{M}{2} \dot{y}^2(\tau) - \frac{M}{2} \omega_b^2 y^2 + \int_0^{\hbar\beta} d\tau' k(\tau - \tau') y(\tau) y(\tau') \right] \quad (\text{V}).26$$

$$\left[ \left( -\frac{d^2}{d\tau^2} - \omega_b^2 \right) y(\tau) + \frac{1}{M} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' k(\tau - \tau') y(\tau') \right] \equiv \mathcal{L}[y] \quad (\text{V}).27$$

$$\mathcal{L}[\phi_n] = \lambda_n \phi_n \quad (\text{V}).28$$

$$\phi_n(0) = \phi_n(\hbar\beta) \quad (\text{V}).29$$

$$\phi_n \propto e^{i\nu_n \tau} \quad (\text{V}).30$$

$$\mathcal{L}[e^{i\nu_n \tau}] = \lambda_n e^{i\nu_n \tau} \quad (\text{V}).31$$

$$\lambda_n = \nu_n^2 - \omega_b^2 + \xi_n \quad (\text{V}).32$$

$$y(\tau) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} y_n e^{i\nu_n \tau} \quad (\text{V}).33$$

$$y(0) = y(\hbar\beta) \quad (\text{V}).34$$

$$\Rightarrow S_E[q_b + y] = \hbar\beta V(q_b) + \frac{M}{2\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lambda_n y_n y_{-n} \quad (\text{V}).35$$

$$\left[ \int_0^{\hbar\beta} e^{i\nu_n \tau} e^{i\nu_m \tau} d\tau = \hbar\beta \delta_{n+m,0} \right]$$

$$Z = \underbrace{Z_0}_{\text{harmonische Mulde}} + N' \int \prod_{n=-\infty}^{\infty} dy_n e^{-\beta V(q_b)} e^{-\frac{M}{2\hbar^2\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lambda_n y_n y_{-n}} \quad (\text{V}).36$$

### betrachte spezielle Eigenwerte

$$\begin{aligned} \frac{n=0}{\lambda_0} : \lambda_0 y_0^2 &= -\omega_b^2 y_0^2 \\ \lambda_0 &= -\omega_b^2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow Z \propto \int e^{\frac{M}{2\hbar^2\beta}\omega_b^2 y_0^2} \quad (\text{V.37})$$

$$\frac{n=1}{\lambda_1} : \lambda_1 y_1 y_{-1}$$

[  
[

$$y_n = \rho_n e^{i\phi} \quad y_{-n} = \rho_n e^{-i\phi} \quad (\text{V.38})$$

$$\lambda_1 y_1 y_{-1} = \lambda_1 \rho_1^2 = (\nu_1^2 - \omega_b^2 + \xi_1) \rho_1^2 = \left( \underbrace{\frac{2\pi^2}{\hbar^2 \beta^2} - \omega_b^2}_{>0, \text{ wenn } \omega_b \hbar \beta < 2\pi} + \underbrace{\xi_1}_{>0} \right) \rho_1^2 \quad (\text{V.39})$$

### V).3. Tunnelrate, Bounce

$$\lambda_1(\beta) = 0 \quad \Rightarrow \text{crossover ; } \beta^* \text{ crossover-Temperatur} \quad (\text{V.40})$$

$$\int dy_0 e^{\frac{M}{2\hbar^2\beta}\omega_b^2 y_0^2} \xrightarrow{y_0 \rightarrow iy_0} i \int dy_0 e^{-\frac{M}{2\hbar^2\beta}\omega_b^2 y_0^2} \quad (\text{V.41})$$

$$\Rightarrow Z = Z_0 + iZ_b \quad (\text{V.42})$$

$$Z_0 \propto e^{-\beta V(q_0)} \quad Z_b \propto e^{-\beta V(q_b)} \ll Z_0 \quad (\text{V.43})$$

$$\Gamma \propto -\text{Im}\{F\} \quad (\text{V.44})$$

$$= -\text{Im}\left\{-\frac{1}{\beta} \ln(Z_0 + iZ_b)\right\} \quad (\text{V.45})$$

$$= \frac{1}{\beta} \text{Im}\left\{\ln Z_0 + \ln\left(1 + i\frac{Z_b}{Z_0}\right)\right\} \quad (\text{V.46})$$

$$\approx \frac{1}{\beta} \text{Im}\left\{i\frac{Z_b}{Z_0}\right\} \quad (\text{V.47})$$

$$= \frac{1}{\beta} \frac{Z_b}{Z_0} \quad (\text{V.48})$$

$$\Gamma \propto \underbrace{e^{-\beta[V(q_b)-V(q_0)]}}_{\text{Beitrag der minimal action Pfade}} \cdot \underbrace{f_q}_{\text{Beitrag der Fluktuationen}} \quad (\text{V.49})$$

$$f_q = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n^2 + \omega_0^2 + \xi_n}{\nu_n^2 - \omega_b^2 + \xi_n} \quad (\text{V.50})$$

- sehr hohe Temperaturen :  $\nu_n \rightarrow \infty$

$$\Rightarrow f_q \rightarrow 1 \quad (\text{V.51})$$

- $\beta \rightarrow \beta^* : \Rightarrow f_q$  divergiert

- $\beta > \beta^*$ : es existiert weiterer Pfad minimaler Wirkung, der dynamisch ist  $q_B(\tau)$  (bounce)

$$S_E[q_B] < S_E[q_b] \quad (\text{V.52})$$

$$\Gamma \propto e^{-S[q_B]/\hbar} \quad (\text{V.53})$$

– fast temperaturabhängig

–  $S[q_B]$  abhängig von Dissipation

- $T \rightarrow 0$ ,  $\beta \rightarrow \infty$  z.B.: (nicht dissipativ)

$$q_B(\tau) = \frac{q_0^*}{\cosh^2\left(\frac{\omega_0 \tau}{2}\right)} \quad (\text{V.54})$$

# Abbildungsverzeichnis

I).1. harmonischer Oszillator mit Fluktuationen . . . . .	3
I).2. Pole . . . . .	4
I).3. neues Pot . . . . .	6
I).4. Fluktuationen . . . . .	7
I).5. Space . . . . .	12
II).1. Space . . . . .	16
II).2. Gültigkeitsbereich . . . . .	17
II).3. Renormierung . . . . .	22
II).4. "Folie" . . . . .	26
II).5. Bänder . . . . .	26
II).6. Oszillatorbad . . . . .	28
II).7. zwei Niveau Atom . . . . .	31
II).8. $D(\hbar\omega_0)$ . . . . .	34
IV).1. Pfade . . . . .	46
IV).2. klassischer Pfad . . . . .	48
IV).3. Krümmungsbildchen . . . . .	51
IV).4. Störung . . . . .	56
IV).5. Space . . . . .	58
V).1. Pot . . . . .	60
V).2. inverses Potential . . . . .	62