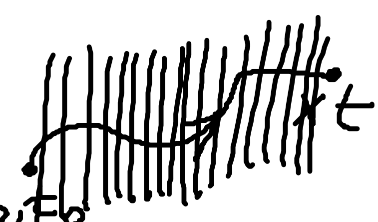
6.6.2007

Dichtematrix als doppeltes Pfadintegral



Influenzfunktional $\mathcal{F}$

$$\mathcal{F}[q(t'), q'(t')] \equiv \int dx_0\, dx_0'\, dx \; \langle x_0|\rho_B|x_0'\rangle \cdot$$

$$\cdot \underbrace{\int_{x_0}^{x} \mathcal{D}x \; e^{i\left(\underbrace{S[x]+S[x,q]}_{H_B+H_{SB}}\right)}}_{=\;\langle x|\mathcal{U}_B[q]|x_0\rangle} \; \underbrace{\int_{x_0'}^{x} \mathcal{D}^*_{x'}\, e^{-i\left(S[x']+S[x',q']\right)}}_{\langle x|\mathcal{U}_B[q']|x_0'\rangle^*}$$

$H_B + H_{SB}[q]$, $U_B[q]$ ist der Propagator für $H_B + H_{SB}[q]$

Beispiel $H_{SB} = 0$

$$U_B = e^{-i\hat{H}_B t}$$

<u>Beispiel</u>: $H_B = \frac{1}{2}\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\Omega^2 x^2$

- $H_{SB}(t) = \alpha x \cdot q(t)$ z.B. lineare Kopplung
- Zeitabhängig

Damit $\mathcal{F}[q(t'), q'(t')] =$

$$= \int dx_0 \, dx_0' \, dx \, \langle x_0 | \rho_B | x_0' \rangle \langle x | U_B[q] | x_0 \rangle \cdot \langle x_0' | U_B^\dagger[q'] | x \rangle$$

$$= \mathrm{Tr}_B \left(U_B[q] \rho_B U_B^\dagger[q'] \right)$$

$\int dx_0' |x_0'\rangle\langle x_0'| = 1$ $\int dx_0 |x_0\rangle\langle x_0| = 1$

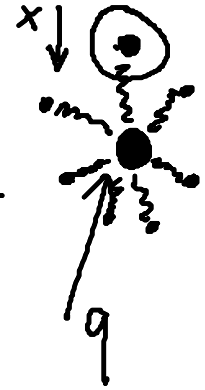
$$= \mathrm{Tr}_B \left(\rho_B U_B^\dagger[q'] U_B[q] \right)$$

<u>Diskussion</u>: 1) $q(t) = q'(t) \ \forall t$

$$\Rightarrow \mathcal{F}[q(t'), q'(t')] = 1$$

2) $|\mathcal{F}[q(t'), q'(t')]| \leq \underline{1}$

Influenzfunktionaltheorie für harmonische Oszillatoren



$$\mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{SB}[q] \equiv \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2} M\Omega^2 x^2 + \underbrace{g(t)}_{f[q(t)]} \cdot x$$
$$= \mathcal{H}_B(t)$$

- getriebener harm. Osz.
- Ankopplung an x ist linear.

z.B. $\mathcal{H}_{SB} = \underbrace{\alpha q^3(t)}_{g(t)} \cdot x$

Wir brauchen $U_B(t)$, d.h. die Lösung von $i\frac{\partial}{\partial t} U_B(t) = \mathcal{H}_B(t) U_B(t)$ *

$U_B(0) = \underline{1}$

Formale Lösung:

$$U_B(t) = T\, e^{-i\int_0^t dt' \hat{H}_B(t')}$$

↑ Zeitordnungsoperator

* sukzessiv (iterativ) lösen.
(Nachschauen QM)

Vorsicht: $H_B(t')$ und $\mathcal{H}_B(t'')$ vertauschen nicht.

Ansatz: $\tilde{U}_{\cancel{B}}(t) = e^{-iA(t)}\, e^{-iB(t)\hat{x}}\, e^{-iC(t)\hat{p}}$

$A(t), B(t), C(t)$ Funktionen, die bestimmt werden müssen. $\nearrow g(t)\cdot x$

Transf. ins WW-Bild, d.h. $\mathcal{H}_B(t) = \underbrace{\mathcal{H}_0}_{\mathcal{H}_B = p^2/2m + \frac{1}{2}m\Omega^2 x^2} + V(t)$

$$\mathcal{U}_B(t) = e^{-i\mathcal{H}_0 t}\,\tilde{\mathcal{U}}(t)$$

$$\Rightarrow \quad i\,\partial/\partial t\,\tilde{\mathcal{U}}(t) = \tilde{V}(t)\,\tilde{\mathcal{U}}(t) \qquad *$$

$$\tilde{V}(t) \equiv e^{i\mathcal{H}_0 t}\,V(t)\,e^{-i\mathcal{H}_0 t}$$

$$= g(t)\left\{\hat{x}\cdot\cos\Omega t + \frac{\hat{p}}{M\Omega}\sin\Omega t\right\}$$

Jetzt (*): zusammen mit Ansatz für $\tilde{\mathcal{U}}(t)$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\mathcal{U}}(t) = \dot{A}(t)\tilde{\mathcal{U}}(t) + \hat{x}\,\dot{B}(t)\tilde{\mathcal{U}}(t) +$$

$$+\ \dot{C}(t)\,e^{-iA(t)}\,\underbrace{e^{-iB(t)\hat{x}}\,\hat{p}}_{\hat{p}\,e^{-iB(t)\hat{x}} + \underbrace{[e^{-iB(t)x},\,p]}}\,e^{-iC(t)\hat{p}}$$

$$\left[e^{-i\alpha\hat{x}},\hat{p}\right] = i\frac{\partial}{\partial x}e^{-i\alpha x} = \alpha\,e^{-i\alpha x} \qquad (\ddot{\text{U}}\text{A})$$

$$= \left(\dot{A}(t) + \hat{x}\,\dot{B}(t) + \hat{p}\,\dot{C}(t) + B(t)\dot{C}(t)\right)\tilde{\mathcal{U}}(t)$$

$$= g(t)\left\{\hat{x}\cos\Omega t + \frac{\hat{p}}{M\Omega}\sin\Omega t\right\}\tilde{\mathcal{U}}(t)$$

Vergleich: $\dot{B}(t) = g(t)\cos\Omega t \Rightarrow B(t) = \int_0^t dt'\,g(t')\cos\Omega t'$

$$C(t) = \frac{1}{M\Omega}\int_0^t dt'\,g(t')\sin\Omega t'$$

$$\dot{A}(t) = -B(t)\dot{C}(t)$$

$$\Rightarrow A(t) = -\frac{1}{M\Omega}\int_0^t dt' \int_0^{t'} ds\, g(t')g(s)\cos\Omega s \sin\Omega t'$$

$$\langle x|U_B(t)|x'\rangle = \langle x|\underset{\Uparrow e^{-iH_0t}}{e^{-iA(t)}} e^{-iB(t)\hat{x}} \underbrace{e^{-iC(t)\hat{p}}|x'\rangle}_{|x'+C(t)\rangle}$$

(Impulsoperator erzeugt Translationen $\Rightarrow$ Lie-Algebra QM: Symmetrien (Greiner))

$$= e^{-iA(t)}\langle x|\underset{\Uparrow e^{-iH_0t}}{e^{-iB(t)\hat{x}}}|x'+C(t)\rangle$$

$$= e^{-iA(t)}\underbrace{\langle x|e^{-iH_0t}|x'+C(t)\rangle}_{\langle x|e^{-iH_0t}|y\rangle \text{ für harm. Oszill.}} e^{-iB(t)[x'+C(t)]}$$

$$\langle x|e^{-iH_0t}|y\rangle = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi i\sin\Omega t}}\, e^{\frac{iM\Omega}{2\sin\Omega t}\{(x^2+y^2)\cos\Omega t - 2xy\}}$$

$$1 = \sum_n |n\rangle\langle n| \qquad \text{ÜA}$$

[Exkurs:

$$\langle x|e^{-iH_0t}|y\rangle = \sum_n \langle x|e^{-iH_0t}|n\rangle\langle n|y\rangle$$

$H_0|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\varepsilon_n t}\langle x|n\rangle\langle n|y\rangle$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x)\psi_n^*(y)e^{-i\varepsilon_n t} \equiv G(xt;yt=0)$$

Damit $\Psi(x,t) = \int dy \, G(xt; yt=0) \Psi_0(y,0)$

Hier $\Psi_n(x)$: WF des harm. Oszillators $\propto H_n(x)\, e^{-x^2/\ldots}$

Influenzfunktional

$$\mathcal{F}[q(t'), q'(t')] = \mathrm{Tr}_B \left(\rho_B \, U_B^\dagger[q'] \, U_B[q] \right)$$

$$= \mathrm{Tr}_B \left(\rho_B \, e^{iC'\hat{p}} e^{iB'\hat{x}} e^{iA'} e^{iA} e^{-iB\hat{x}} e^{-iC\hat{p}} \right)$$

$$= e^{i(A'-A)} \int dx \, \langle x | \rho_B | \, e^{iC'p} e^{i(B'-B)x} e^{-iCp} | x \rangle$$

$$= e^{i(A'-A)} \int dx \, \langle x | \rho_B | x + C - C' \rangle \, e^{i(B'-B)(x+C)}$$

$\langle x | \rho_B | y \rangle$ Matrixelement des Bad-Anfangszustands

$$\rho_B = \frac{e^{-\beta \hat{H}_B}}{Z_B} \quad \text{kan. Ensemble}$$

$it \mapsto \beta$ „Wick-Rotation" Vergleich: $\langle x | e^{-i\hat{H}_B t} | y \rangle$

$$\langle x | \rho_B | x' \rangle = \frac{1}{Z} \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi \sinh \Omega\beta}} \, e^{-\frac{M\Omega}{2\sinh\beta\Omega}\left\{ (x^2+x'^2)\cosh\beta\Omega - 2xx' \right\}}$$

$$\mathcal{F}[q_{t'}, q'_{t'}] \equiv e^{-\underbrace{\Phi[q_{t'}, q'_{t'}]}_{\text{"Influenzphase"}}}, \quad q_{t'} = q(t')$$

$$\Phi[q_{t'}, q'_{t'}] = \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \left\{ f[q_{t'}] - f[q'_{t'}] \right\} \times$$

$$\times \left\{ L(t'-s) f[q_s] - L^*(t'-s) f[q'_s] \right\}$$

$$\boxed{L(\tau) = \frac{1}{2M\Omega} \left(\coth \frac{\beta\Omega}{2} \cos\Omega\tau - i \sin\Omega\tau \right)}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$L(t) = \langle x(t) x \rangle_0 \quad \text{van-Hove}$$

Auslenkungskorrelationsfunktion.