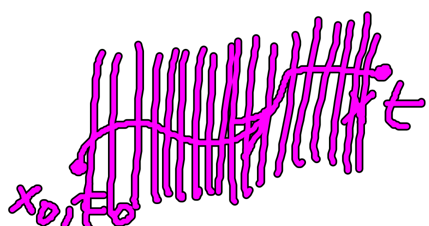
6.6.2007

Dichtematrix als doppeltes Pfadintegral

Influenzfunktional $\mathcal{F}$



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

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

$=$

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

Beispiel $H_{SB} = 0$

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

__Beispiel__: $H_B = \frac{1}{2}\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\Omega^2 x^2$

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

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

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

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

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

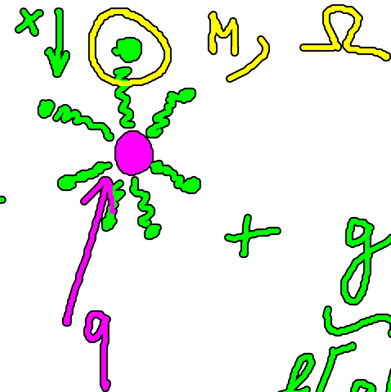
$$= \mathrm{Tr}_B \left(\rho_B U_B^\dagger[q'] U_B[q] \right)$$

__Diskussion__: 1) $q(t) = q'(t)\ \forall t$

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

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

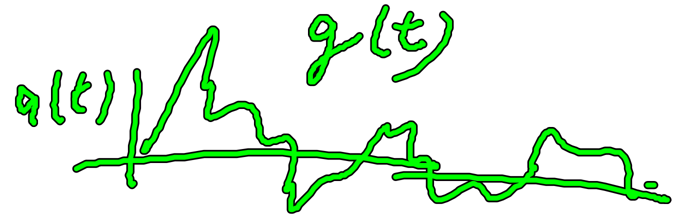
Influenzfunktionaltheorie für harmonische Oszillatoren



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

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

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



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

$$U_B(0) = 1$$

Formale Lösung:

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

T ← Zeitordnungsoperator

* sukzessive (iterativ) lösen. (Nachschauen QM)

Vorsicht: $H_B(t')$ und $H_B(t'')$ 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. $\mathcal{H}_B(t) = \underbrace{\mathcal{H}_0}_{\mathcal{H}_B = p^2/2m + \frac{1}{2}m\Omega^2 x^2} + V(t)$

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

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

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

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

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

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

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

$$e^{-iB(t)\hat{x}}\,\hat{p} = \hat{p}\, e^{-iB(t)\hat{x}} + \underbrace{\left[e^{-iB(t)x}, p\right]}$$

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

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

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

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

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

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

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

$$\langle x|U_B(t)|x'\rangle = \langle x|\underset{\uparrow\; e^{-iH_0 t}}{e^{-iA(t)}}\, e^{-iB(t)\hat{x}}\, \underbrace{e^{-iC(t)\hat{p}}\,|x'\rangle}_{|x'+C(t)\rangle}$$

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

$$= e^{-iA(t)}\,\langle x|\underset{\uparrow\; e^{-iH_0 t}}{e^{-iB(t)\hat{x}}}|x'+C(t)\rangle$$

$$= e^{-iA(t)}\,\underbrace{\langle x|e^{-iH_0 t}|x'+C(t)\rangle}_{\langle x|e^{-iH_0 t}|y\rangle \text{ für harm. Oszill.}}\, e^{-iB(t)[x'+C(t)]}$$

$$\langle x|e^{-iH_0 t}|y\rangle = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi i \sin\Omega t}}\; e^{\frac{iM\Omega}{2\sin\Omega t}\left\{(x^2+y^2)\cos\Omega t - 2xy\right\}}$$

ÜA

$$1 = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

Exkurs:

$$\langle x|e^{-iH_0 t}|y\rangle = \sum_n \langle x|e^{-iH_0 t}|n\rangle\langle n|y\rangle$$

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

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

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

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

Hier $\Psi_n(x)$: WF des harm. Oszillators

$\propto \mathcal{H}_n(x)\, e^{-x^2/\ldots}$

Influenzfunktional

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$L(t) = \langle x(t)\, x \rangle_0$$ van-Hove

Auslenkungskorrelationsfunktion.