

Funktionalmethoden und Abbildungen dissipativer Quantensysteme

Von der Fakultät Mathematik und Physik der Universität Stuttgart zur
Erlangung der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von
Holger Baur
aus Stuttgart

Hauptberichter: Prof. Dr. U. Weiß
Mitberichter: Prof. Dr. G. Mahler

Tag der mündlichen Prüfung: 28. Februar 2007

II. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart

2006

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	1
Kurzfassung	6
Summary	8
Einleitung	10
1 Dissipative Quantensysteme	12
1.1 Das Caldeira-Leggett-Modell	16
1.2 Klassische Beschreibung des Bades	17
1.2.1 Die klassische Bewegungsgleichung	17
1.2.2 Klassische thermische Bad-Erwartungswerte	22
1.2.3 Klassische thermische System-Erwartungswerte	26
1.3 Charakterisierung des Bades durch die spektrale Dichte	26
1.3.1 Langsame und schnelle Badfrequenzen und deren An- kopplung an die Systemkoordinate	34
1.3.2 Flußgleichung für die renormierte Masse	37
1.4 Funktionalmethoden und die quantenmechanische Behandlung des Bades	38
1.4.1 Der Propagator als Pfadintegral	38
1.4.2 Erwartungswerte	46
1.4.3 Thermische Erwartungswerte des harmonischen Oszil- lators	50
1.4.4 Lineare Antwort und dynamische Suszeptibilität	57
1.4.5 Thermische Imaginärzeit-Erwartungswerte eines har- monischen Oszillators	60
1.4.6 Funktionale und Gaußsche Integrale	61
1.4.7 Störungstheorie	74
1.4.8 Sattelpunkt-Entwicklung	77
1.4.9 Die Funktionaldeterminante	78

1.4.10	Quantenmechanische Zustandssumme und Imaginärzeit Propagation	80
1.4.11	Fourier-Darstellung des Pfadintegrals, effektive Masse und klassischer Hochtemperaturlimes	86
1.4.12	Imaginärzeit-Erwartungswerte	91
1.4.13	Nichtlokaler Anteil der Kopplung	92
1.4.14	Reihenentwicklung nichtquadratischer Terme	95
1.4.15	Realzeit Dichtematrix-Propagation	102
1.4.16	Klassischer Limes der Feynman-Vernon Influenzfunktionalbeschreibung	109
1.4.17	Influenzfunktional als generierendes Funktional von thermischen Erwartungswerten	116
1.4.18	Das generierendes Funktional für den Feynman-Vernon Propagator	117
1.4.19	Stochastische Badbeschreibung	118
2	Tight-Binding Modelle	124
2.1	Betrachtung des ungekoppelten Systems	124
2.1.1	Berechnung des freien Kink-Beitrags	131
2.1.2	Tunnelmatrixelement Δ bei Badankopplung und adiabatische Renormierung	134
2.1.3	Tight-Binding Beschreibung für das Bad und das Influenzfunktional	134
2.2	Influenzfunktional	135
2.2.1	Imaginärzeit-Influenzfunktional	136
2.2.2	Realzeit-Influenzfunktional	137
2.2.3	Umskalierter Wechselwirkungskern	141
2.2.4	Darstellung des Integralkerns für $s = 1$	143
2.2.5	Darstellung des Integralkerns für $s \neq 1$	146
2.3	Asymptotisches Verhalten des Kerns $Q(t)$	149
2.4	Klassischer Limes des Kerns $Q(t)$	150
2.5	Tiefemperatur-Grenzfall des Kerns $Q(t)$	151
2.6	Tunnelmatrixelement Δ	151
2.7	Das Schmid-Modell	152
2.8	Mobilität und Diffusion	157
2.8.1	Mastergleichung und Poisson-Statistik	159
2.8.2	Ohmscher Skalen-Limes bei Temperatur $T = 0$	163
2.9	Bethe-Ansatz Rechnung	166
2.10	Zustandssumme	167

3 Identifikation dissipativer Modelle mit bekannten Feldmodellen	169
3.1 Das harmonische Bad als Gauß-Modell	170
3.2 Das Gauß-Modell	174
3.2.1 Transformation der Korrelationsfunktion unter konformen Abbildungen	178
3.3 Das (Boundary-) Sine-Gordon Modell	187
3.4 Abbildung des BSG-Modells auf ein dissipatives TB-Modell . .	189
3.5 Die Ausreduktion der Bulk Freiheitsgrade des Gauß-Modells mit Randterm	192
A Anhang	200
A.1 Der Harmonische Oszillator mit linearer Kopplung	200
A.1.1 Zustandssumme als Imaginärzeit-Pfadintegral	201
A.1.2 Propagator als Realzeit-Pfadintegral	207
A.2 Ausreduktion der Anfangs- und Endkoordinate in der Realzeitdarstellung	216
Literaturverzeichnis	224
Lebenslauf	230

Symbolverzeichnis

α	allg. Koeffizient
a	Gitterkonstante
a, a^\dagger	Erzeugungs-, Vernichtungsoperator
A	allg. Operator
$A_\Lambda(t)$	Fenster zur Mittelwertbildung
\mathcal{A}	Lagrange-Dichte, Flächenelement mit Berandung $\partial\mathcal{A}$
β	inverse Temperatur $1/(k_B T)$, allg. Parameter
β_i	Ladung der Vertex-Funktion
b	allg. lineare Störung
B	Integralkern des Boundary Sine-Gordon Modells
B, B_m	Bias-Faktor, Bernoulli-Nummer
c, c_m	zentrales Moment, allg. Entwicklungskoeffizient
c_α	Kopplungskoeffizient eines Badoszillators
$C[b]$	generierendes Funktional für zentrale Momente
C_1	Standardintegral
$\chi, (\chi(t))$	(dynamische) Suszeptibilität
$\chi_{j,m}$	Phase des Reibungskoeffizienten H_m
c_α	Kopplungskonstante des Badoszillators α an das System
δ	allg. Koeffizient
$\delta x, \delta/\delta x$	Variation einer Funktion x , Funktionalableitung
$\delta(x - x')$	Diracsche Deltafunktion
$:\delta(x - x'):_L$	L -periodisch fortgesetzte Diracsche Deltafunktion
Δ	endliche Differenz, Tunnelmatrixelement
$\Delta(x)$	Propagator des Gauß-Modells
$D(t)$	effektive Greenfunktion des Bades
$D_\alpha(t)$	Differenzialoperator des Badoszillators α
$D_\alpha^{-1}(t)$	Greenfunktion / inverse Funktion zu \hat{D}_α
\hat{D}_x^q	Differintegral-Operator
$\mathcal{D}x$	Funktionalmaß eines Pfadintegrals über Pfade x
ϵ	infinitesimaler positiver Parameter, Biasfaktor
η	Reibungskoeffizient, Fluktuationskoordinate

η_n	Eigenfunktionen, Diagonalladung
\mathbf{e}_i	Orthonormalbasis
E	Energie
f	allg. Funktion
F	Freie Energie, Kraft, allg. Funktional, Fluktuationsoperator
${}_2F_1$	Hypergeometrische Funktion
F_{FV}	Influenzfunktional
Φ_{FV}	Influenzphase
$\mathcal{F}, \mathcal{F}[b]$	Influenzfunktional, gen. Funktional für Kumulanten
$\gamma(t)$	Dämpfungskern der klassischen Langevin-Funktion
γ	Euler-Konstante, $\gamma = -\psi(1) \approx 0,577$
γ_μ	Gamma-Matrix
γ_l^\pm	Übergangsraten (Mastergleichung)
$\Gamma[m]$	generierendes Funktional, Legendre-Transformierte von $\mathcal{F}[b]$
$\Gamma[t]$	Gamma-Funktion (verallg. Fakultät)
g	Korrekturterm, Determinante des metrischen Tensors \mathbf{g}
\mathbf{g}	Metrischer Tensor
G	allg. Greenfunktion
$G[\dots]$	Meijersche G-Funktion
$G(t'', t')$	allg. Propagator
$G(\omega)$	umskalierte spektrale Dichte
G_m	Rauschfaktor des Influenzfunktionals
\mathcal{G}	Menge von Funktionen, Funktionenraum
\hbar	Plancksches Wirkungsquantum $h/2\pi$
H	Hamiltonfunktion / -operator
H_S	Hamiltonfunktion des Systems
H_B	Hamiltonfunktion des Bades
H_I	Hamiltonfunktion der bilinearen Wechselwirkung
H_T	Hamiltonfunktion des Renormierungsfaktors
H_m	Reibungsfaktor des Influenzfunktionals
i	$i^2 = -1$
$J(\omega)$	spektrale Dichte des harmonischen Bades
J_{FV}	Feynman-Vernon Propagator
κ	allg. Faktor, komplexe Darstellung von D^{-1}
$\kappa^{(\pm, \text{R}, \text{A})}(t)$	Zweipunkt-Korrelationsfunktion eines Oszillators
k	Frequenz, Kopplungskonstante
$k(\tau)$	inverser effektiver Integalkern eines harmonischen Bades
k_m	Raten eines Transportmodells

$K(\tau)$	inverser effektiver Integralkern eines harmonischen Bades
$K(\omega)$	Rausch- bzw. Leistungsspektrum
$K(t, t')$	allg. Propagator, allg. Integralkern
λ	allg. (Kopplungs-)Faktor
$\lambda(\tau)$	allg. Feld
λ_m	allg. Eigenwert eines Operators
L	Lagrange-Funktion, Länge
$L(t)$	Badkorrelationsfunktion
$L(x)$	Feld für Linksläufer, Integralkern des Gauß-Modells
$\text{Li}_s[z]$	Polylogarithmus
\mathcal{L}	Lagrange-Dichte
μ	Kopplungsparameter, Mobilität
μ_0	klassische Mobilität eines Brownschen Teilchens
$m (m_\alpha)$	Masse (eines Badoszillators α)
$m(\tau)$	Variable des Legendre-transformierten Funktionals $\mathcal{F}[b]$
M	Masse des Systems
\mathcal{M}	normierte Mobilität
ν_m	Matsubara-Frequenz
N	Anzahl der Badoszillatoren
$N_\alpha(t)$	Integralkern eines Badoszillators α in Realzeit
$N(t)$	effektiver Integralkern eines Oszillatorbades in Realzeit
\mathcal{N}	allg. Normierungsfaktor
$\omega, d\omega$	Differenzialform
$\omega (\omega_\alpha)$	Eigenfrequenz (eines Badoszillators α)
Ω	Eigenfrequenz des Systems (quadratischer Anteil)
Ω	Fläche mit Berandung $\partial\Omega$
$ \Omega\rangle$	Grundzustand
O	allg. Integralkern
$\partial, \bar{\partial}$	Poincare-Operator, Lichtkegel-Operatoren
∂_μ	Differenzialoperator im Minkowski-Raum
∂_s	Differenzialoperator im Euklidischen Raum
π	Kreiszahl $\pi = 3.14159\dots$
Π	Normierungsfaktor, Impulsdichte
φ_m	Bias-Phase
ϕ	allg. Feld
ψ	allg. Feld
$\psi^{(m)}[x]$	Polygamma-Funktion
p, p_α	allg. Koeffizient, Impuls des Badoszillators α
p_j	Offdiagonalladung
P	Impuls des Systems, allg. Wahrscheinlichkeitsgewicht

P_n	Wahrscheinlichkeitsverteilung (Mastergleichung)
\hat{P}	Symbol für den Cauchy-Hauptwert eines Integrals
q	Ortskoordinate des Systems
Q	allg. Kopplungsoperator
$Q(t)$	zweifach integrierter Kern $L(t)$
ρ	Boltzmann-Gewicht, Massendichte, allg. Faktor
$\rho(t)$	Dichtematrix
r	Schwerpunktcoordinate, Koordinatenvektor $\{q, \mathbf{x}\}$
R	Radius
$R(x)$	Feld für Rechtsläufer
$R_\alpha(\tau)$	Integralkern eines Badoszillators α in Imaginärzeit
R_N	Restterm der Ordnung N
σ	Differenzzeit, Imaginärzeit, allg. Faktor
$\sigma(z \omega_1, \omega_2)$	quasi-periodische Weierstraßsche Sigma-Funktion
s	Realzeit
$S[\cdot]$	allg. Wirkung
S_1	Standardintegral
τ	Imaginärzeit
τ_c, τ_D	Grenzfrequenz $\omega_c = 1/\tau_c$ der spektralen Dichte
ϑ	umskalierte Zeit $t/(\hbar\beta)$
t	Zeit
T	kinetische Energie
\hat{T}	Zeitordnungsoperator
$\Theta(t)$	Schritt-Funktion $\Theta(t) = \int^t d\tau \delta(\tau)$
$\Theta(\tau)$	allg. Feld
$u_{e/o}$	Eigenfunktion mit gerader/ungerader Parität
u_m	allg. Eigenfunktion eines Operators, Einheitsladung
U	innere Energie
$U(t'', t')$	Propagator
v_D	Driftgeschwindigkeit
V	Potenzial, potenzielle Energie
\mathcal{V}_{β_i}	Vertex-Funktion
W_n	Entwicklungskoeffizient
W_R	Dichtematrix eines ungestörten harmonischen Bades
$W(\tau)$	zweifach integrierter Kern $K(\tau)$
$\xi(t)$	klassische stochastische Kraft
ξ_n	Fourierkoeffizient des Kerns $k(\tau)$, Offdiagonalladung
$\Xi(\tau)$	Fluktuationsvariable für $m(\tau)$
x (x_α)	Ortskoordinate (des Badoszillators α)
x_α^g	Gleichgewichtslage des Badoszillators α

x_α^h	freie Lösung des ungestörten Badoszillators α
X	effektive Ortskoordinate des Bades
$X_{e/o}$	Koeffizient zu gerader/ungerader Parität
$X[r]$	Funktional der effektiven Ortskoordinate r
X^g	effektive Gleichgewichtskoordinate des Bades
X^h	effektive freie Lösung des Bades
\mathcal{X}	allg. Integralkern, verallg. stochastische Kraft
y	Relativkoordinate, allg. Ortskoordinate
Y	stochastische Kraft
$\zeta[s, x]$	(verallg.) Riemannsche Zeta-Funktion
ζ_n	Fourierkoeffizient des Integralkerns $K(\tau)$
z, \bar{z}	Lichtkegelkoordinaten, $z = (x + iy)/\sqrt{2}$
$Z, Z[b]$	Zustandssumme, generierendes Funktional
Z, \bar{Z}	komplexe stochastische Kraft

Kurzfassung

Im ersten Abschnitt dieser Arbeit versuchen wir, die algebraische Struktur, welche im Rahmen der dissipativen Quantenmechanik unter Verwendung des Influenzfunktional auftritt, herauszuarbeiten. Dies erlaubt uns einen tieferen Einblick in ansonsten unübersichtliche und langwierige Rechenschritte, speziell im Realzeitformalismus, und ermöglicht uns eine leichtere Identifikation der dabei auftretenden Terme und deren Ursprung aus dem zugrunde liegenden Modell als auch deren physikalische Bedeutung. Die verwendeten Methoden haben wir soweit als möglich in konsistenter und anschaulicher Form eingeführt, so dass diese Arbeit ohne spezielle Kenntnis des Gebietes der dissipativen Quantenmechanik gelesen werden kann. Besonderen Wert haben wir auf den Übergang von der quantenmechanischen auf die klassische Beschreibung von dissipativen Vorgängen gelegt, da ein Verständnis dieses Übergangs eine tiefere Einsicht in den Messprozess liefert. In der selben Weise ist damit auch der Übergang von der mikroskopischen – durch die Quantenmechanik beschriebenen – Welt in die makroskopische Welt verbunden, welche den Gesetzen der klassischen Mechanik folgt. Zusätzlich zeigen wir, wie die Resultate der Influenzfunktionalmethode stochastisch interpretiert werden können, was einen leichteren Vergleich mit der bekannten quantenmechanischen Zeitentwicklung durch die Schrödingergleichung erlaubt.

Im weiteren betrachten wir die sogenannte Tight-Binding Näherung von Modellen, bei welchen sich der Hamiltonraum für die Systembeschreibung im wesentlichen durch diskrete Eigenzustände des Ortsoperators ausdrücken lässt und Übergänge zwischen diesen Zuständen unterdrückt sind, wodurch eine Propagation entweder durch ein Tunneln oder durch thermische Anregung erfolgt. Im Rahmen der dissipativen Quantenmechanik bringt diese Methode eine immense Vereinfachung in der effektiven Beschreibung des Systems, da Anstelle einer ganzen Historie von Systempfaden nur noch die Übergangszeiten mit den entsprechenden Übergängen berücksichtigt werden müssen. Im Bild des Pfadintegralformalismus bedeutet dies, dass Anstelle des Integrals über alle Systempfade ein Produkt von Integrationen über alle möglichen Sprungzeiten mit Sprunggewichten entsprechend des Übergangs

rückt, welches analytisch als auch numerisch wesentlich einfacher handzuhaben ist. Innerhalb dieser Näherung wurden dadurch in der Vergangenheit viele beeindruckende analytische Resultate abgeleitet.

Darüber hinaus beschäftigen wir uns mit der Abbildung und dem Zusammenhang von dissipativen Modellen mit Feldmodellen aus der Quantenfeldtheorie und im besonderen der Feldtheorie statistischer Systeme. Der Reiz dieser Abbildungen liegt besonders darin, dass in den letztgenannten Gebieten schon seit Jahrzehnten sehr intensiv die grundlegenden Modelle bearbeitet wurden und vor allem auch nach neuen Methoden gesucht und Forschung dafür betrieben wurde und noch immer Gegenstand der aktuellen Forschung darstellt. Als Beispiel sei in zwei Dimensionen die Invarianz unter konformen Abbildungen genannt, welche immer dann Anwendung findet, wenn Systeme nur lokal wechselwirken und eine Invarianz unter lokaler Umskalierung der Felder zeigen. Bei statistischen Systemen mit lokaler Wechselwirkung zeigt sich dieses Verhalten immer beim Erreichen eines kritischen Punktes, da hier per Definition keine Längenskala ausgezeichnet ist. In zwei Dimensionen führt dies zu einer immensen Einschränkung der möglichen Form von Korrelationsfunktionen und hat zu dem eigenständigen Gebiet der Konformen Feldtheorie geführt, da konforme Abbildungen per Definition die lokale Struktur erhalten (Winkeltreue) und lokal nur zu einer Unskalierung führen. Während in $D \geq 3$ Dimensionen nur endlich viele Generatoren für konforme Abbildungen existieren, ist deren Anzahl in 2 Dimensionen unendlich. Dies resultiert in einer unendlichen Anzahl von lokalen Erhaltungsgrößen mit den entsprechenden Folgen. Während solche Techniken sehr schnell unanschaulich werden, erlaubt die Abbildung auf dissipative Modelle hier oftmals eine sehr anschauliche Interpretation.

Summary

In the first part of this work we try to extract the algebraic structure behind the method of the influence functional in the context of dissipative quantum mechanics. This results in a deeper insight with respect to the long and complex calculations behind that method, especially in the real time case, and also provides us a tool for simple identification of the corresponding terms and their physical meaning. The methods introduced here are presented in a consistent and clear way without the requirement of special knowledge in that field. Special emphasis was put on the transition from a quantum mechanical description to a classical one, since it allows a deeper understanding of the measurement-process. This is tightly connected with the transition from a microscopic to a macroscopic world where the former one is described by the rules of quantum mechanics whereas the latter follows the rules of classical mechanics. In addition we show how the results of the influence functional method can be interpreted as a stochastic process, which in turn allows an easy comparison with the well known time development of a quantum mechanical system by use of the Schrödinger equation.

In the following we examine the tight-binding approximation of models of which their hamiltonian shows discrete eigenstates in position space and where transitions between those states are suppressed so that propagation either is described by tunneling or by thermal activation. In the framework of dissipative quantum mechanics this leads to a tremendous simplification of the effective description of the system since instead of looking at the full history of all paths in the path integral description, we only have to look at all possible jump times and the possible corresponding set of weights for the jump direction, which is much easier to handle both analytically and numerically. Within this approximation impressive results were derived in recent years.

In addition we deal with the mapping and the connection of dissipative quantum mechanical models with ones in quantum field theory and in particular models in statistical field theory. The charm of such mappings comes from the fact that the latter mentioned models were subject of strong in-

vestigation within the last decades and still is and henceforce provide new methods and ideas to solve them. As an example we only want to mention conformal invariance in two dimensions which always becomes relevant if a statistical system only has local interaction and is invariant under scaling. Statistical models with local interaction show this invariance if they become critical, since then by definition they become invariant under scaling. In two dimensions this invariance greatly reduces the possible form of correlation functions and the full theory is known as conformal field theory, since by definition conformal mappings preserve the local structure and only show a local rescaling. While in $D \geq 3$ dimensions only a finite number of generators for conformal transformations exist, for two dimensions the number of generators is infinite. This results in an infinite number of locally preserved currents with appropriate implications. While such techniques become soon very complex, the mapping on dissipative models often still gives a physical meaning behind the structure.

Einleitung

Die Eigenschaften isolierter mikroskopischer Systeme wie beispielsweise das Wasserstoffatom können erfolgreich durch die Quantenmechanik beschrieben werden. Auf dieser Größenskala treten nun mathematisch beschreibbare und auch durch das Experiment verifizierbare Erscheinungen und Effekte auf, die sich unserer durch Erfahrung geschulten Intuition entziehen und auch widersprechen. Man denke nur an das Interferenzmuster beim Doppelspaltexperiment mit Einzelphotonen oder das Tunneln durch klassisch verbotene Bereiche. Verlässt ein Photon beim Doppelspaltexperiment die Lichtquelle, so sagt uns unsere Alltagserfahrung, dass sich das Photon lokalisiert mit einem konstanten Impuls auf den Detektorschirm zubewegt, als wäre es ein makroskopisch großer Körper, welcher während seiner Bewegung permanent und nahezu ungestört beobachtet werden kann. Diese Annahme ist jedoch nicht nur überflüssig sondern sogar in keiner Weise haltbar, da ein Photon nicht detektiert werden kann, ohne seinen Zustand zu zerstören. Durch direkte Beobachtung haben wir daher keine Information über das Photon und seinen zurückgelegten Weg. Lediglich das statistisch erzeugte Interferenzmuster auf dem Detektor lässt uns Rückschlüsse auf den von Photon gewählten Weg ziehen. Am Beispiel des Doppelspalts zeigt sich klar, dass das einzelne Photon Information von beiden Spalten besitzt und das Interferenzmuster durch eine Superposition eines einzelnen Photons auf dem Weg durch beide Spalte erzeugt wird.

Aus diesem Grund sind viele Erscheinungen und Effekte der Quantenmechanik nur deshalb paradox, weil wir sie auf die makroskopische Skala zu übertragen versuchen. Ein Paradebeispiel dafür ist das Gedankenexperiment mit der Schrödingerschen Katze, welche durch einen superpositionierten Zustand $|\text{tot}\rangle$ und $|\text{lebendig}\rangle$ beschrieben sei, wie es quantenmechanisch beispielsweise bei der Polarisationsrichtung eines Photons möglich ist. Die Problematik entsteht also daher, dass wir Schwierigkeiten bei der Beschreibung des Übergangs von der quantenmechanischen auf die klassische Skala haben. Der mesoskopische Bereich beschreibt nun Systeme, welche aufgrund ihrer Größe zwischen der quantenmechanischen und der klassischen Beschrei-

bung angesiedelt werden müssen. Ein Verständnis dieses Bereiches liefert nun in natürlicher Weise auch eine Beschreibung des Übergangs von der Quantenmechanik zur klassisch beschreibbaren Erfahrungswelt.

Weiterhin ist man nunmehr in der Lage, elektronische Schaltungen und Versuchsapparate auf einer Längenskala zu realisieren, welche eine mesoskopische Beschreibung notwendig machen und daher diesen Bereich auch experimentell in vielfältiger Weise erfahrbar machen. Daher ist ein besseres Verständnis des Übergangs zwischen Quantenmechanik und klassischer Mechanik essentiell wichtig sowohl zum tieferen Verständnis der Beschreibung der Quantenmechanik als auch zur Beschreibung kleinster elektronischer und mechanischer Geräte. Dazu gehört auch die Beschreibung von sogenannten Qubits in Quantencomputern – Qubits sind effektive quantenmechanische Zweizustandssysteme wie beispielsweise die z -Komponente eines Spins mit $S = 1$. Mit diesen quantenmechanischen Bits versucht man nun Rechenoperationen durchzuführen. Dies gelingt jedoch nur, indem man in der Lage ist, ein Qubit zu präparieren, es wieder auszulesen und es mit anderen Qubits in Wechselwirkung zu bringen, so dass eine Rechenoperation möglich wird. Dadurch ist ein Qubit kein isoliertes System und es gibt notwendigerweise eine Wechselwirkung mit der Umgebung, welche durch benachbarte Qubits und durch die Präparations- und Ausleseapparatur gegeben ist und nicht zuletzt durch unerwünschte Störungen der Umgebung.

Kapitel 1

Dissipative Quantensysteme

In diesem Kapitel werden die grundlegenden Ideen und Ansätze der dissipativen Beschreibung von quantenmechanischen Modellen vorgestellt. Das Modell von Caldeira und Leggett spielt dabei eine zentrale Rolle. Es beschreibt ein Teilchen mit einer Koordinate q in einem beliebigen Potenzial $V(q)$, welches bilinear an ein Bad von harmonischen Oszillatoren ankoppelt [1]. Wie wir weiter unten sehen werden, führt die effektive Beschreibung des Systems zwangsläufig auf eine zeitlich nichtlokale Beschreibung oder anders ausgedrückt auf einen Gedächtnisterm über den Zustand des Systems zu früheren Zeiten.

Diese Nichtlokalität, die wir auch im klassischen Fall finden, macht eine quantenmechanische Beschreibung des Systems durch Lösen der Schrödingergleichung zunichte, da diese zwangsläufig eine lokale Zeitentwicklung aufweist und somit das effektive System nicht beschreiben kann. Später werden wir sehen, dass man formal zu einer solchen Beschreibung zurück gelangen kann, wenn man gerade die Effekte der Nichtlokalität durch eine stochasti-

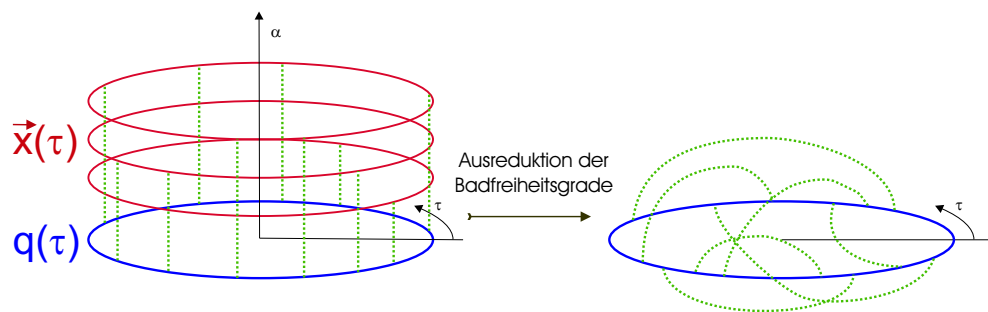


Abbildung 1.1: Die Ausintegration der Badfreiheitsgrade $\{x_\alpha\}$ führt zu einer effektiven Beschreibung des Systems durch eine nichtlokale Wechselwirkung der Systemkoordinate q .

sche Funktion beschreibt, welche an das System ankoppelt. Die Information der nichtlokalen Wechselwirkung in der Zeit steckt dabei nun in der Charakterisierung der stochastischen Kraft durch ihre Autokorrelationsfunktion.

Einen Ausweg aus diesem Dilemma bietet eine alternative Beschreibung der quantenmechanischen Übergangsamplitude durch sogenannte Pfadintegrale, welche in der Literatur auch als Funktionalintegrale bezeichnet werden – eine Darstellung, welche auf Feynman zurückgeht. Zu den wenigen Modellen, welche durch Pfadintegrale analytisch gelöst werden können gehört gerade der harmonische Oszillator, da dieser einem gaußschen Integral entspricht. Die Ausreduktion der Badfreiheitsgrade führt zwar nun ebenfalls zu einem komplizierten und zeitlich nichtlokalen Pfadintegral des Systems, allerdings lassen sich von dort aus schon wesentliche Einflüsse des Bades auf das System erkennen und es kann systematisch mit Näherungsmethoden untersucht werden. Die Ausreduktion der Badfreiheitsgrade führt also wie oben schon erwähnt auf ein neues effektives Modell, welches im Grenzfall verschwindender Badankopplung wieder in das ursprüngliche Modell des freien Systems übergeht. Ein bekanntes Beispiel für eine solche effektive Beschreibung, welches auch von Feynman behandelt wurde, stellt das Polaron Problem dar; bewegt sich ein Elektron in einem Kristallgitter, so polarisiert es durch seine elektrische Ladung e die Umgebung und induziert damit Gitterschwingungen (Phononen). Dieser Verband aus Elektron und umgebenen Phononen wird als Quasiteilchen aufgefasst und als Polaron bezeichnet. Integriert man über die Phononenanregungen, so erhält man eine effektive Beschreibung für das Elektron, wobei sich dessen Energiespektrum und effektive Masse im Vergleich zum freien Elektron ändert.

Da der Zeitentwicklungsoperator $\exp[-i\hat{H}t/\hbar]$ dieselbe Form aufweist wie das Boltzmann-Gewicht $\exp[-\beta\hat{H}]$, sofern man zur Imaginärzeit $t \rightarrow -i\tau$ übergeht, kann man im selben Formalismus auch die quantenmechanische Zustandssumme $Z = \text{tr}[\exp(-\beta\hat{H})]$ und die Propagation in Imaginärzeit behandeln.¹ Diese nichttriviale Tatsache stellt eine ungemeine Erleichterung bei der Beschreibung von quantenmechanischen Systemen und thermodynamischer Gewichtung der Zustände zur Temperatur T dar.

Ein Wärmebad hat drei physikalisch unterscheidbare Einflüsse auf ein quantenmechanisches System. Zum einen kann Energie irreversibel mit dem Bad ausgetauscht werden, was allgemein als Dissipation bezeichnet wird.

¹ Der Einfachheit halber betrachten wir einen zeitunabhängigen Hamiltonoperator. Allgemein hat dieser unitäre Operator die Form $U(t, t_0) = \hat{T} \exp \left[-i/\hbar \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right]$, wie weiter unten im Text noch gezeigt wird. Der Zeitordnungsoperator \hat{T} ordnet dabei Operatoren in chronologischer Reihenfolge. Im Pfadintegralformalismus, welcher in Kapitel 1.4.1 detaillierter betrachtet wird, ist diese Zeitordnung implizit und automatisch erfüllt. Eine Differenzierung ist dann redundant.

Zum anderen induziert das Bad Fluktuationen auf die Systemfreiheitsgrade. Als wohl bekanntestes Beispiel sei nur die Brownsche Bewegung genannt. Da das Bad quasi permanent den Zustand des Systems misst, wird dadurch auch eine quantenmechanische Superposition von Zuständen des Systems unterdrückt. Dieser rein quantenmechanische Effekt wird als Dekohärenz bezeichnet und bildet den wohl interessantesten Effekt des Bades auf das System. Eine Unterdrückung dieser Superpositionen durch eine starke Ankopplung des Systems an das Bad führt das System in den klassischen Bereich. In der Dichtematrixbeschreibung führt dies dazu, dass sich das System nur noch in klassischen Diagonalelementen aufhält. Für diesen Effekt bedarf es im Gegensatz zur Dissipation keines Energietransfers. Mit der Unterdrückung der Nichtdiagonalelemente verschwinden die Oszillationen zwischen den superpositionierten Zuständen. Dies sieht man sofort ein, wenn man die zeitliche Entwicklung eines Diagonalelementes durch die von-Neumann Gleichung $i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho]$ betrachtet, da hierbei aufgrund der Hermitizität von ρ und H nur Nichtdiagonalelemente der Dichtematrix beitragen,

$$\langle n|\dot{\rho}|n\rangle = \frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} \left[\sum_{l \neq n} \langle n|H|l\rangle \langle l|\rho|n\rangle \right]. \quad (1.1)$$

Weiterhin zeigt Gleichung (1.1), dass die Oszillationen nur durch Nichtdiagonalelemente des Hamiltonian in der gewählten Darstellung generiert werden können. Aus diesem Grund kann Dekohärenz in einer klassischen Darstellung nicht beschrieben werden, sondern es bedarf der Quantenmechanik und deren Möglichkeit von sogenannten Superpositionszuständen.

Diese Erkenntnisse erlauben es nun auch, den vieldiskutierten quantenmechanischen Messprozess besser zu verstehen und zu interpretieren [10]. Betrachtet man die Messung eines quantenmechanischen Zustandes, so findet man, dass durch diese Messung eine Projektion auf den entsprechenden Eigenzustand des dazugehörigen Eigenwertes (Messwert) stattfindet, wobei die Norm erhalten bleibt. Für die Dichtematrix (1.1) bedeutet dies, dass das System auf einen Diagonalelement reduziert wird, sofern eine Messung in der verwendeten Darstellung erfolgt. Ein an dieses System gekoppeltes Bad führt nun in gewissem Sinne auch Messungen der Systemvariablen durch. Allerdings kennen wir den genauen Zustand des Bades nicht. Dadurch werden Nichtdiagonalelemente der Dichtematrix über ein gaußsches Filter unterdrückt. In Abschnitt 1.4.15 werden wir nun finden, dass die Stärke der Ankopplung des Systems an das Bad über die Halbwertsbreite dieses gaußschen Filters entscheidet, wobei eine stärkere Ankopplung zu einer erhöhten Unterdrückung von Nichtdiagonalbeiträgen der Dichtematrix und damit in den klassischen Bereich führt. Ein makroskopisch großer Körper misst sich in

diesem Bild also permanent selber und eine quantenmechanische Kohärenz ist damit also nicht zu erwarten. Betrachten wir dazu das Problem der Schrödingerschen Katze. In diesem Gedankenexperiment wird das Freisetzen eines tödlichen Giftes an den Zustand eines quantenmechanischen Systems gekoppelt, beispielsweise der Zerfall eines Atomkernes. Solange das Gesamtsystem nun nicht beobachtet wird, sei der Zustand der Katze eine Superposition aus dem Zustand lebendig, $|\Phi_l\rangle$ und dem Zustand tot, $|\Phi_t\rangle$ gegeben. Erst eine Messung an der Katze würde nun die Projektion auf lebendig oder tot vornehmen, so das Paradoxon. Davor befände sich die Katze in einem Superpositionszustand $|\Phi\rangle = |\Phi_l\rangle + |\Phi_t\rangle$. Diese Schlußfolgerung mag auf ein isoliertes System wie beispielsweise ein Photon zutreffen; auf die Katze übertragen vernachlässigt es aber die Wechselwirkung des makroskopisch großen Körpers mit sich selbst, welche sehr wohl dafür sorgt, dass die Katze in einem klassisch definierten Zustand vorliegt. Mit dem Begriff mesoskopische Systeme beschreibt man nun gerade den Bereich, welcher zwischen mikroskopisch kleinen Systemen, welche durch die Quantenmechanik beschrieben werden, und makroskopischen Systemen, welche durch die klassische Mechanik bzw. Thermodynamik beschrieben werden, liegen.

Ein weiteres zu behandelndes Gebiet von großem Interesse stellen Tunnelprozesse dar. Der quantenmechanische Tunnelprozess lässt sich wieder sehr elegant mithilfe des Pfadintegralformalismus darstellen; hierbei werden sogenannte Instanton-Lösungen eine bedeutende Rolle spielen. Ein Paradebeispiel für einen solchen Prozess stellt beispielsweise der Zerfall eines metastabilen Zustandes dar. Eine stabile Eigenlösung eines quantenmechanischen Systems mit einem dazugehörigen Energieeigenwert E hat die Zeitentwicklung

$$\psi(x, t) = \psi(x, 0) e^{-iEt/\hbar}. \quad (1.2)$$

Die Norm dieses Zustandes bleibt dabei erhalten. Ein Zerfall eines metastabilen Zustandes kann nun formal durch einen nichtverschwindenden Imaginäranteil der Energie $E \rightarrow E - i\hbar\gamma/2$ beschrieben werden. Dies führt zu einem exponentiellen Zerfall $\exp[-\gamma t]$ der Norm und damit zu einer Zerfallskonstante γ . Da die Hamiltonfunktion hermitesch ist, sollten die Energieeigenwerte auf den ersten Blick immer reell sein. Dies gilt jedoch nur, sofern die Wellenfunktion am Rand verschwindet. Im allgemeinen Fall liefert der kinetische Anteil $p^2/(2m)$ einen imaginären Beitrag

$$\text{Im} \left\langle \psi \left| \frac{p^2}{2m} \right| \psi \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{m} \text{Im} \psi^*(x) \partial_x \psi(x) \Big|_{\text{Rand}} = -\frac{1}{\hbar} j(x) \Big|_{\text{Rand}} \quad (1.3)$$

proportional zur Stromdifferenz am Rand. Diese Differenz wiederum hängt von der Gestalt des Potentials $V(x)$ ab. Die Beschreibung von Zerfall metastabiler Zustände ist also eng gekoppelt an die Einschränkung des unendlich ausgedehnten Raumes auf reduzierte und ausgezeichnete Gebiete.

Durch die Ankopplung eines Bades kann nun wieder untersucht werden, wie sich das physikalische Verhalten des Systems durch Kontakt mit einem Wärmebad ändert. Dabei treten wieder verschiedene und unterscheidbare Phänomene auf; zum einen kann das rein quantenmechanische Tunnelverhalten durch das Bad beeinflusst werden. Bei genügend hohen Temperaturen kann es aber auch zu thermisch aktiviertem Zerfall kommen, d.h. durch Energieübertrag des Bades auf das System kommt es zur Überwindung der Barriere. Während der Tunnelprozess einer quantenmechanischen Beschreibung bedarf, kann das thermisch aktivierte Tunneln auch als rein klassischer Prozess betrachtet werden.

1.1 Das Caldeira-Leggett-Modell

Auf der Suche nach einem mikroskopischen Modell, welches in der Lage ist, einen Reibungsterm proportional zur Geschwindigkeit der Systemkoordinate \dot{q} zu erklären, fanden Caldeira und Leggett das folgende Modell [8] mit einem Hamiltonian folgender Form

$$H = H_S + H_R + H_I + H_T, \quad (1.4)$$

$$H_S = \frac{p^2}{2M} + V(q), \quad (1.5)$$

$$H_R = \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2 \right\}, \quad (1.6)$$

$$H_I = -q \sum_{\alpha=1}^N c_{\alpha} x_{\alpha} = -qX, \quad H_T = q^2 \sum_{\alpha=1}^N \frac{c_{\alpha}^2}{2m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2}, \quad (1.7)$$

$$H_B = H_R + H_I + H_T = \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2}{2} \left[x_{\alpha} - \frac{c_{\alpha} q}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} \right]^2 \right\}. \quad (1.8)$$

Der Term H_S beschreibt dabei ein Teilchen mit der Koordinate q in einem Potenzial $V(q)$. H_R ist die Hamiltonfunktion der N Oszillatoren, welche das Bad darstellen und H_I beschreibt die bilineare Ankopplung über die Kopplungskonstanten c_{α} an das System. Diese Ankopplung wird durch die effektive Badkoordinate $X = \sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha}$ beschrieben, welche an die Systemkoordinate q koppelt. Der Term H_T sorgt dafür, dass das Bad translationsinvariant zum System wird, indem die Ruhelage der Badkoordinate

$$x_{\alpha}^g = c_{\alpha} q / (m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2) \quad (1.9)$$

bei fester Systemkoordinate q subtrahiert wird. Dadurch wird das Bad gewissermaßen mit der Systemkoordinate mitbewegt. Anders ausgedrückt würde

das einfache Federmodell (1.8) ohne den Term H_T eine rücktreibende Kraft $X_g = q \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2}$ aufweisen, welche durch den Term H_T kompensiert wird. Sowohl im klassischen wie auch im quantenmechanischen Fall wird sich diese Eigenschaft dadurch manifestieren, dass die effektive Badbeschreibung nur über die Systemgeschwindigkeit erfolgt; dies wiederum bedeutet, dass in der Fourierdarstellung der Gleichstromanteil $\tilde{q}_0 = \int dt q(t)$ nicht beiträgt.

Weiterhin erhebt das Modell von Caldeira und Leggett nicht den Anspruch, die einzige Realisierung für eine effektive Beschreibung eines Reibungsterms zu sein, da wegen der Ausintegration der Badmoden nur eine effektive Beschreibung des Systems resultiert. Im Grenzfall schwacher Ankopplung an die einzelnen Badmoden liefert dieses Modell jedoch eine gute Näherung für eine bilineare Kopplung von Moden mit beliebigem Potenzial, da das Potenzial der harmonischen Oszillatoren als quadratische Entwicklung des realen Potenzials betrachtet werden kann. Eine schwache Kopplung ($c_{\alpha} \ll 1$) an die einzelnen Badmoden ist dabei nicht gleichbedeutend mit einer schwachen Badkopplung, da die effektive Badkoordinate $X = \sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha}$ an beliebig viele Moden koppelt. Im allgemeinen betrachten wir sogar den thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$.

1.2 Klassische Beschreibung des Bades

Wegen der nahen Verwandtschaft mit der quantenmechanischen Berechnung mittels des Pfadintegralformalismus wollen wir die wichtigsten Schritte nochmals aufzeigen. Besondere Beachtung schenken wir dabei der Forderung nach Kausalität, welche sich später im Zusammenhang mit einer eindeutigen analytischen Fortsetzung zu Imaginärzeit als wichtig erweist.

1.2.1 Die klassische Bewegungsgleichung

Zur effektiven klassischen Beschreibung des Systems gelangen wir, indem wir die Greenfunktion für einen harmonischen Oszillator aufsuchen und damit die Antwort der Oszillatoren auf die bilineare Kopplung an den Systemfreiheitsgrad beschreiben, also die Bewegungsgleichung in der Form

$$\int dt' \hat{D}_{\alpha}(t, t') x_{\alpha}(t') = \frac{c_{\alpha}}{m_{\alpha}} q(t), \quad \hat{D}_{\alpha}(t, t') = \delta(t - t') (\partial_{t'}^2 + \omega_{\alpha}^2) \quad (1.10)$$

mit der inhomogenen Lösung

$$x_{\alpha}^p(t) = \int_{-\infty}^{\infty} ds D_{\alpha}^{-1}(t - s) \frac{c_{\alpha}}{m_{\alpha}} q(s) \quad (1.11)$$

mithilfe der Greenfunktion $D_\alpha^{-1}(t)$, welche über die folgende Bedingung definiert wird,

$$\int dt' \hat{D}_\alpha(t, t') D_\alpha^{-1}(t', t'') = \delta(t - t'') \quad (1.12)$$

aufsuchen. Durch eine Fourierdarstellung von $D_\alpha^{-1}(t)$ erhalten wir

$$D_\alpha^{-1}(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_\alpha^2 - \omega^2} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{2\omega_\alpha} \left\{ \frac{1}{\omega + \omega_\alpha} - \frac{1}{\omega - \omega_\alpha} \right\}. \quad (1.13)$$

Dieses Integral ist wegen der beiden Pole auf der reellen Achse nicht definiert. Der tiefere Grund dahinter ist die Verwendung von nicht normierbaren Funktionen als Basis für die Fourierdarstellung [33, 34], welche mathematisch als verallgemeinerte Funktionen oder auch Distributionen aufgefasst werden. Diese Basis kann beispielsweise als Grenzfall von einer im Unendlichen abfallenden Funktion $\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \exp[ikx - \epsilon x^2]$ gesehen werden, wie wir weiter unten im Text noch sehen werden. Dieser Punkt spielt im weiteren eine nicht unbedeutende Rolle vor allem im Hinblick auf den Zusammenhang von Funktionalintegralen in Real- und Imaginärzeit.

Die physikalisch motivierte Forderung nach Kausalität wird durch $D_\alpha^{-1}(t)$ gewährleistet, sofern diese für $t < 0$ verschwindet. Dies kann aber sehr leicht unter Verwendung folgender Darstellung der Θ -Funktion erreicht werden²,

$$\Theta(t) e^{-i\omega' t} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} i \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \omega' + i\epsilon}. \quad (1.14)$$

Betrachten wir – motiviert durch die obige Darstellung (1.14) – die rechte Seite von Gleichung (1.13) als Grenzfall

$$D_\alpha^{-1}(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} i \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{2i\omega_\alpha} \left\{ \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + \omega_\alpha + i\epsilon} - \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \omega_\alpha + i\epsilon} \right\}, \quad (1.15)$$

so finden wir für die Greenfunktion $D_\alpha^{-1}(t)$ einen wohldefinierten und kausalen Ausdruck der Gestalt

$$D_\alpha^{-1}(t) = \Theta(t) \frac{\sin[\omega_\alpha t]}{\omega_\alpha}, \quad (1.16)$$

$$= -2\pi i \left[\text{Res}|_{\omega=\omega_\alpha} + \text{Res}|_{\omega=-\omega_\alpha} \right]. \quad (1.17)$$

² Die Theta-Funktion $\Theta(t)$ besitzt als Distribution die folgende Darstellung $\Theta(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int d\omega / (2\pi) \exp[-i\omega t] / (\omega + i\epsilon)$, was man sich sofort aufgrund des Residuensatzes klar macht.

Somit erhalten wir als kausale Lösung des ursprünglichen Problems

$$x_\alpha(t) = x_\alpha^h(t) + \int_0^t ds D_\alpha^{-1}(t-s) \frac{c_\alpha}{m_\alpha} q(s), \quad (1.18)$$

$$x_\alpha^h(t) = x_\alpha(0) \cos[\omega_\alpha t] + \frac{p_\alpha(0)}{m_\alpha \omega_\alpha} \sin[\omega_\alpha t]. \quad (1.19)$$

Die Randbedingungen werden über die homogene Lösung festgelegt. Der Einfachheit halber wurden sie zur Zeit $t = 0$ definiert, wodurch das Integral in Gleichung (1.18) nun zur Zeit $t = 0$ beginnt. Wir haben also für die Greenfunktion $D_\alpha^{-1}(t)$ die kausale Lösung verwendet, indem wir die Pole bei $\omega = \pm\omega_\alpha$ von der reellen Achse in die untere Halbebene von ω verschoben haben, wodurch die Greenfunktion erst definiert ist und automatisch für $t < 0$ verschwindet, da dann das Integral in der oberen Halbebene geschlossen werden kann. Wegen $D_\alpha(t) \sin[\omega_\alpha t] = 0$ und der Eigenschaft $\Theta(t) = 1 - \Theta(-t)$, kann der Propagator ebenso als akausaler Propagator beschrieben werden. Allerdings muss die Randbedingung dann zu einem späteren Zeitpunkt $s > t$ für die Lösung $x(t)$ festgelegt werden. Dies entspricht dann gerade einer Propagation rückwärts der Zeitrichtung. Diese spezielle Eigenschaft folgt aus der Symmetrie des Operators $D_\alpha(t)$ aus Gleichung (1.10) unter einer Zeitspiegelung $t \rightarrow -t$. Insgesamt gibt es 4 Möglichkeiten, die beiden Pole in Gleichung (1.13) zu verschieben. Das infinitesimale Verschieben der Pole in die untere Halbebene führt auf die sogenannte retardierte Lösung, während die Pole in der oberen Halbebene auf eine avancierte Lösung führen. Das wechselweise Verschieben eines Pols in die obere respektive untere Halbebene führt auf die sogenannte kausale/akausale Green-Funktion. In den letzteren beiden Fällen treten aufgrund der Darstellung

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = \mp i \int_0^\infty dk e^{\pm ikx} \quad (1.20)$$

nur positive/negative Frequenzen auf. Die Entwicklung nach positiven Frequenzen ist in der Quantenfeldtheorie wichtig und beschreibt Teilchen, welche sich vorwärts in der Zeit bewegen [69].

Zum Nachweis, dass die Bedingung (1.12) noch gilt, muss man diese wie oben schon erwähnt, als verallgemeinerte Funktion auffassen, über welche mit einer Testfunktion integriert wird. Diese Testfunktionen fallen im Unendlichen schneller ab, als jede Potenz, so dass dann beispielsweise ohne Randterm partiell integriert werden kann, was wir im zweiten Schritt der folgenden Gleichung benützen,

$$(\partial_t^2 + \omega_\alpha^2) D_\alpha^{-1}(t) = 2\delta(t) \cos[\omega_\alpha t] + (\partial_t \delta(t)) \frac{\sin[\omega_\alpha t]}{\omega_\alpha} = \delta(t). \quad (1.21)$$

Aufgrund der Kausalitätsforderung gilt obige Gleichung nun nur für Differenzzeiten $t > 0$. Wegen des Superpositionsprinzips beschreibt $x_\alpha^h(t)$ die freie Bewegung der ungekoppelten Oszillatoren während der zweite Term in (1.18) die Störung durch die Systemkoordinate q beschreibt. Eingesetzt in die Bewegungsgleichung für den Systemfreiheitsgrad q

$$M\ddot{q}(t) + \partial_q V(t) + q \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} = \sum_\alpha c_\alpha x_\alpha(t) = X(t) \quad (1.22)$$

erhalten wir unter Aufspaltung der effektiven Badkoordinate $X(t)$

$$\begin{aligned} M\ddot{q}(t) + \partial_q V(q) &= -q \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} + \sum_\alpha c_\alpha x_\alpha^h(t) \\ &\quad + \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha} \int_0^t ds D_\alpha^{-1}(t-s) q(s), \end{aligned} \quad (1.23)$$

$$= -X^g(t) + X^h(t) + \int_0^t ds D^{-1}(t-s) q(s), \quad (1.24)$$

mit der Green-Funktion

$$D^{-1}(t) = \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha} D_\alpha^{-1}(t) = \Theta(t) \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha} \sin[\omega_\alpha t] \quad (1.25)$$

für das Gesamtsystem des Bades. Die effektive Koordinate

$$X^h = \sum_\alpha c_\alpha x_\alpha^h = \sum_\alpha c_\alpha \left[x_\alpha(0) \cos[\omega_\alpha t] + \frac{p_\alpha(0)}{m_\alpha \omega_\alpha} \sin[\omega_\alpha t] \right] \quad (1.26)$$

beschreibt den Anteil der freien Lösung, während analog

$$X^g = \sum_\alpha c_\alpha x_\alpha^g = q \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \quad (1.27)$$

die Verschiebung um die Gleichgewichtskoordinate x_α^g angibt. Für die Greenfunktion erhalten wir

$$D^{-1}(t-s) = \Theta(t-s) \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha} \sin[\omega_\alpha(t-s)], \quad (1.28)$$

$$= M \partial_s \gamma(t-s) + \delta(t-s) \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2}, \quad (1.29)$$

mit dem so definierten Dämpfungskern $\gamma(t-s)$ mit

$$\gamma(t) = \Theta(t) \frac{1}{M} \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \cos[\omega_\alpha t]. \quad (1.30)$$

Weiterhin definieren wir im Hinblick auf die spätere Verwendung die Funktion

$$\kappa(t) = \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} e^{i\omega_{\alpha}t}, \quad (1.31)$$

womit wir die Greenfunktion $D^{-1}(t)$ als Imaginärteil von $\kappa(t)$ darstellen können.

Durch Partielle Integration des ersten Termes auf der rechten Seite von Gleichung (1.29) kann man zu einer Ankopplung an die Systemgeschwindigkeit \dot{q} übergehen. Durch den zweiten Term hebt sich die Gleichgewichtskoordinate $X^g(t)$ in (1.24) gerade weg und man erhält eine Langevin-Gleichung mit einer stochastischen Kraft $\xi(t)$ und dem oben definierten Dämpfungskern $\gamma(t)$ der Form

$$M\ddot{q}(t) + \partial_q V(q, t) + M \int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{q}(s) = \xi(t), \quad (1.32)$$

$$\xi(t) = X^h(t) - M\gamma(t)q(0). \quad (1.33)$$

X^h beschreibt die stochastische Kraft des freien Bades, während der zweite Term die Ankopplung des Systems an das Bad berücksichtigt und als Randterm bei der partiellen Integration entsteht. Der Zustand des Gesamtsystems ist wegen des deterministischen Verhaltens vollständig durch den Satz von Variablen $\{x_{\alpha}(0), p_{\alpha}(0)\}, q(0), P(0)$ zur Zeit $t = 0$ beschrieben. Der Term $\int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{q}(s)$ in Gleichung (1.32) entspricht einem Reibungsterm mit einem zeitlichen Gedächtniskern. Je nach Vorzeichen geht dabei Energie auf das Bad über bzw. liefert das Bad Energie an das System. Der Dämpfungskern (1.30) liefert für Zeiten $t \gg 1/\omega_{\alpha}$ ein oszillierendes Verhalten. Im zeitlichen Mittel wird also zumindest für eine endliche Anzahl von Oszillatoren keine Dissipation stattfinden. Anders ausgedrückt kommt die Trajektorie der N Oszillatoren im Phasenraum für große Zeiten zumindest beliebig nahe an den Startpunkt heran und kann somit keine Energie dauerhaft vom System absorbieren. Klassisch wird dies erst möglich, wenn wir unendlich viele Oszillatoren zulassen und deren Verteilung dann durch eine sogenannte Spektrale Funktion oder im Folgenden spektrale Dichte genannt beschreiben.

Aus der Bewegungsgleichung (1.32) geht nun direkt die weiter oben angesprochene Translationsinvarianz des Bades durch den Zusatzterm H_T hervor. In Gleichung (1.8) lesen wir die Invarianz unter der Transformation

$$q \rightarrow q + \Lambda, \quad (1.34)$$

$$x_{\alpha} \rightarrow x_{\alpha} - \frac{\Lambda c_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2}, \quad (1.35)$$

ab. Die linke Seite der Bewegungsgleichung (1.32) ist invariant unter dieser Transformation (ohne Berücksichtigung des Potentials $V(q, t)$, welches natürlich im Allgemeinen nicht translationsinvariant ist), da nur Ableitungen der Systemkoordinate q eingehen und $\gamma(t)$ sich unter der Transformation (1.34) nicht ändert, wie man aus der Definition (1.30) ersieht. Die stochastische Kraft $\xi(t)$, also der rechte Term, ändert sich nun ebenfalls nicht unter der Transformation (1.34), da sich die einzelnen Terme in (1.33) wie folgt ändern,

$$X^h(t) \rightarrow X^h(t) + \Lambda \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2}, \quad (1.36)$$

$$M\gamma(t)q(0) \rightarrow M\gamma(t)q(0) - \Lambda \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2}. \quad (1.37)$$

Dies ist eine wichtige Voraussetzung beispielsweise bei der Untersuchung von Transport in einem periodischen Potenzial. Ohne den Zusatzterm H_T wäre der stochastischen Kraft $\xi(t)$ eine rücktreibende Kraft $-\Lambda \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2}$ überlagert, welche auch durch eine Renormierung des Potentials $V(q, t)$ gedeutet werden kann. Im quantenmechanischen Imaginärzeitfall finden wir dieselbe Eigenschaft darin, dass im Frequenzraum die Kopplungskonstante ξ_0 aus Gleichung (1.405), welche den Gleichstromanteil des Systempfades q koppelt, verschwindet. Im Realzeitfall tritt diese Eigenschaft beispielsweise darin zutage, dass die Schwerpunktskoordinate $r(t)$ aus Gleichung (1.570) im Influenzfunktional nur als zeitliche Ableitung beiträgt, wodurch wieder der Gleichstromanteil des Pfades ignoriert wird. Ohne den Counterterm H_T entsteht ein Randterm, welcher die Translationsinvarianz zerstört.

1.2.2 Klassische thermische Bad-Erwartungswerte

Eine klassische thermodynamische Beschreibung erhalten wir unter Verwendung des Boltzmann-Gewichtes des freien Bades über H_R aus Gleichung (1.6)

$$\rho_R(0) = \exp[-\beta H_R(0)], \quad (1.38)$$

bzw. des Bades mit Ankopplung an das System über H_B aus Gleichung (1.8)

$$\rho_B(0) = \exp[-\beta H_B(0)], \quad (1.39)$$

und Erwartungswerte $\langle f(t) \rangle_{B/R}$ als Funktion von $\{x_{\alpha}(0), p_{\alpha}(0)\}$ über

$$\langle f(t) \rangle_{B/R} = \frac{1}{Z} \text{tr}_B[f \rho_{B/R}], \quad (1.40)$$

$$= \frac{1}{Z} \left(\prod_{\alpha=1}^N \int \frac{dx_{\alpha}(0) dp_{\alpha}(0)}{2\pi\hbar} \right) f(t) \rho_{B/R}. \quad (1.41)$$

Die quantenmechanische Zustandssumme erhält man durch Spurbildung des Operators $\exp(-\beta H)$,

$$Z_{\text{QM}} = \text{tr}[\exp(-\beta H)] . \quad (1.42)$$

Liegt H in der separierten Form $H = T(p) + V(x)$ vor, so kann im klassischen Limes $\beta \rightarrow 0$ die Exponentialfunktion mithilfe der Zassenhaus-Formel [61, 62] in die Produktform $\exp[-\beta T(p)] \exp[-\beta V(x)]$ zerlegt werden, sofern der Kommutator $[T, V]$ nicht divergiert. Wir erhalten dann

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} Z_{\text{QM}} = \int dp dx \langle p | e^{-\beta T(\hat{p})} | x \rangle \langle x | e^{-\beta V(\hat{x})} | p \rangle , \quad (1.43)$$

$$= \int \frac{dp dx}{2\pi\hbar} \exp[-\beta H] . \quad (1.44)$$

Dies ist genau der klassische Ausdruck für die Zustandssumme. Für singuläre Potenziale $V(x)$ bspw. liefert dieser klassische Ausdruck ein falsches Resultat.

Für die Normierung von Gleichung (1.40) notwendige klassische Zustandssumme Z ergibt sich somit

$$Z = \text{tr}_{\text{B/R}}[\rho_{\text{B/R}}] = \prod_{\alpha=1}^N \frac{1}{\beta\hbar\omega_{\alpha}} = \exp[-\beta F] . \quad (1.45)$$

Daraus folgt sofort die innere Energie U des Bades, welche wie erwartet proportional zur Anzahl der Freiheitsgrade N ist,

$$U = \langle H \rangle = \frac{N}{\beta} . \quad (1.46)$$

Für die Gibbssche Entropie S folgt

$$S = -\frac{1}{Z} \text{tr}_{\text{B/R}}[\rho_{\text{B/R}} \ln \rho_{\text{B/R}}] = N , \quad (1.47)$$

und damit $U = TS$. Die obigen Erwartungswerte folgen aus der quantenmechanischen Zustandssumme und den dazugehörigen Erwartungswerten im Limes $\hbar \rightarrow 0$ aus

$$Z = \prod_{\alpha} \sum_n \exp[-\beta\hbar\omega_{\alpha}(n + 1/2)] = \prod_{\alpha} \frac{1}{2 \sinh[\beta\hbar\omega_{\alpha}/2]} , \quad (1.48)$$

$$S = \sum_{\alpha} \frac{\beta\hbar\omega_{\alpha}}{2} \tanh \left[\frac{\beta\hbar\omega_{\alpha}}{2} \right] .$$

Der Erwartungswert der stochastischen Kraft $\xi(t)$ aus Gleichung (1.33) verschwindet nun unter Verwendung des Boltzmann-Gewichts ρ_{B} , während der

Erwartungswert der stochastischen Kraft des freien Bades X^h durch Verwendung des Gewichtes ρ_R verschwindet, also

$$\langle \xi(t) \rangle_B = 0, \quad \langle X^h(t) \rangle_R = 0. \quad (1.49)$$

Dass der so gebildete Erwartungswert von X^h verschwindet, sieht man sofort, da ρ_R eine gerade Funktion in x_α ist. Zur Berechnung des Erwartungswertes von $\xi(t)$ verschiebt man die Integration über x_α um $c_\alpha^2 q(0)/(m_\alpha \omega_\alpha^2)$ und bekommt dadurch wieder ein Mittel über ρ_R , also

$$\langle \xi(t) \rangle_B = \sum_\alpha c_\alpha \left\langle \left(x_\alpha(0) + \frac{c_\alpha q(0)}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \right) \cos[\omega_\alpha t] - M\gamma(t)q(0) \right\rangle_R, \quad (1.50)$$

$$= \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2 q(0)}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \cos[\omega_\alpha t] - M\gamma(t)q(0) = 0. \quad (1.51)$$

Der Mittelwert

$$\langle X^h(t) \rangle_B = -\langle \xi(t) \rangle_R = M\gamma(t)q(0), \quad (1.52)$$

besitzt einen nichtverschwindenden, zeitabhängigen Erwartungswert, welcher durch die Verschiebung der Badkoordinaten bei der Ankopplung an das System zustande kommt und somit von der Systemkoordinate q abhängt. Damit erhalten wir das wichtige Resultat, welches den Zusammenhang der beiden stochastischen Kräfte $\xi(t)$ und $X^h(t)$ erklärt,

$$\xi(t) = X^h(t) - \langle X^h(t) \rangle_B, \quad (1.53)$$

$$X^h(t) = \xi(t) + \langle \xi(t) \rangle_R, \quad (1.54)$$

wodurch sofort das Verschwinden der Erwartungswerte (1.49) folgt.

Analog erhalten wir die 2-Punkt Korrelationsfunktionen der stochastischen Kraft $\xi(t)$ und $X^h(t)$, indem wir $x_\alpha(t)$ durch Gleichung (1.18) ersetzen

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle_B = \langle X^h(t)X^h(t') \rangle_R, \quad (1.55)$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \cos[\omega_\alpha(t-t')], \quad (1.56)$$

$$= \frac{M}{\beta} \gamma(|t-t'|) = \frac{M}{\beta} \gamma_s(t-t'), \quad (1.57)$$

wobei durch den Betrag die Theta-Funktion in der Definitionsgleichung (1.30) von $\gamma(t)$ entfällt und Erwartungsgemäß eine in $t-t'$ symmetrische Funktion herauskommt, die wir im Folgenden mit $\gamma_s(t-t')$ bezeichnen. Die gefundene Symmetrie ist ungemein wichtig, da sie sicherstellt, dass keine Zeitrichtung

ausgezeichnet wird, also Invarianz unter Zeitumkehr gegeben ist. Eine Asymmetrie unter Zeitumkehr ist für einen dissipativen Beitrag jedoch unbedingt notwendig. Daher induziert die Kraft $\xi(t)$ Fluktuationen auf das System, Dissipation kommt jedoch nur durch den Reibungsterm proportional zu $\dot{q}(t)$ zustande.

Analog zu den Erwartungswerten weiter oben können wir wieder die Zweipunkt-Korrelationsfunktionen in Relation setzen,

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle_{\text{B}} = \langle\langle X^{\text{h}}(t)X^{\text{h}}(t') \rangle\rangle_{\text{B}} \quad (1.58)$$

$$\equiv \langle X^{\text{h}}(t)X^{\text{h}}(t') \rangle_{\text{B}} - \langle X^{\text{h}}(t) \rangle_{\text{B}} \langle X^{\text{h}}(t') \rangle_{\text{B}} ,$$

$$\langle X^{\text{h}}(t)X^{\text{h}}(t') \rangle_{\text{R}} = \langle\langle \xi(t)\xi(t') \rangle\rangle_{\text{R}} \quad (1.59)$$

$$\equiv \langle \xi(t)\xi(t') \rangle_{\text{R}} - \langle \xi(t) \rangle_{\text{R}} \langle \xi(t') \rangle_{\text{R}} .$$

Der rechte Teil der beiden Gleichungen entspricht der Definition einer Kumulante, wie wir weiter unten im Text noch sehen werden. Damit gilt für die Zweipunktkumulanten

$$\langle\langle \xi(t)\xi(t') \rangle\rangle_{\text{B}} = \langle\langle X^{\text{h}}(t)X^{\text{h}}(t') \rangle\rangle_{\text{B}} = \frac{M}{\beta} \gamma_{\text{s}}(t-t') , \quad (1.60)$$

$$\langle\langle \xi(t)\xi(t') \rangle\rangle_{\text{R}} = \langle\langle X^{\text{h}}(t)X^{\text{h}}(t') \rangle\rangle_{\text{R}} = \frac{M}{\beta} \gamma_{\text{s}}(t-t') . \quad (1.61)$$

Die quadratische Abweichung vom Mittelwert der Fluktationsfunktion

$$\langle (\Delta\xi(t))^2 \rangle_{\text{B}} = \langle \xi(t)^2 \rangle_{\text{B}} = \frac{1}{\beta} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} \quad (1.62)$$

liefert uns ein Maß für die Stärke der Fluktuationen und ergibt sich direkt aus Gleichung (1.49) und (1.55). Da $\gamma(t)$ aus Gleichung (1.29) unabhängig von der Temperatur ist, verschwinden im klassischen Fall die Fluktuationen bei Temperatur $T = 0$. Im quantenmechanischen Fall wird dies nicht mehr der Fall sein, da dann sogenannte Nullpunkt-Fluktuationen eine Rolle spielen. Dieses Verhalten werden wir in Abschnitt 1.4.3 genauer betrachten.

Eine wichtige Größe zur Charakterisierung des Bades und ganz allgemein einer stochastischen Funktion ist ihr sogenanntes Rauschspektrum $K(\omega)$, welches als Fouriertransformierte der oben gefundenen symmetrisierten Korrelationsfunktion der stochastischen Kraft $\xi(t)$ definiert wird. Durch die Form des Rauschspektrums kann man Rauschen klassifizieren. Beim Weißen Rauschen beispielsweise sind alle Frequenzen mit gleicher Amplitude enthalten; das Rauschspektrum ist somit konstant. Entsprechend sind bei farbigem Rauschen die Frequenzanteile unterschiedlich gewichtet. Im Falle des obigen Ba-

des erhalten wir für das Rauschspektrum, da $\gamma(t)$ reell ist und die symmetrisierte Korrelationsfunktion nur an den Kosinus koppelt,

$$K(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{1}{2} \left\{ \langle \xi(t)\xi(0) \rangle_{\text{B}} + \langle \xi(0)\xi(t) \rangle_{\text{B}} \right\} e^{i\omega t}, \quad (1.63)$$

$$= \int_0^{\infty} dt \cos[\omega t] \langle \xi(t)\xi(0) \rangle_{\text{B}} = \frac{M}{\beta} \text{Re}[\tilde{\gamma}_s(\omega)]. \quad (1.64)$$

Im hier betrachteten klassischen Fall ist die Korrelationsfunktion schon per Definition symmetrisch. Im später zu untersuchenden quantenmechanischen Fall werden wir es mit explizit zeitgeordneten Erwartungswerten zu tun haben, so dass auch hier wieder automatisch eine in der Zeit symmetrische Form vorliegt. Das obige Resultat ist das wichtige klassische Dissipations-Fluktuations-Theorem. Weiter unten werden wir auch das quantenmechanische Rauschspektrum (1.235) herleiten und im klassischen Limes (1.237) das obige Resultat wiederfinden.

1.2.3 Klassische thermische System-Erwartungswerte

Die Langevin-Gleichung (1.32) wird im Allgemeinen als Differenzialgleichung für die Systemkoordinate $q(t)$ unter Vorgabe einer stochastischen Rauschkraft $X^{\text{h}}(t)$ betrachtet. Zu jeder Realisierung $X^{\text{h}}(t)$ finden wir somit eine eindeutige Lösung $q(t)$. Somit kann $q(t)$ als Funktional $q[X^{\text{h}}(t)]$ betrachtet werden. Eine explizite Darstellung ist im Allgemeinen jedoch nicht möglich. Eine Ausnahme bildet der Fall des ohmschen Rauschens, da hier der nicht-lokale Dämpfungsterm der Langevin-Gleichung in einen Reibungsterm der Form $\gamma\dot{x}(t)$ übergeht, wie wir im folgenden Abschnitt sehen werden. Unter dieser Voraussetzung kann die Greenfunktion bestimmt werden und liefert somit eine analytische Darstellung des Funktionals $q[X^{\text{h}}(t)]$.

Umgekehrt kann nun auch jeder klassischen Lösung $q(t)$ eindeutig eine Realisierung der Rauschkraft $X^{\text{h}}(t)$ zugeordnet werden, was man direkt der Langevin-Gleichung (1.32) abliest. Da wir nun die Statistik dieser stochastischen Kraft kennen, können wir dieses Funktional $X^{\text{h}}[q(t)]$ von $q(t)$ nutzen, um Erwartungswerte der Systemkoordinate zu bestimmen.

1.3 Charakterisierung des Bades durch die spektrale Dichte

Wie man aus Gleichung (1.23) sieht, gehen die freien Parameter des Bades $\{\omega_\alpha, m_\alpha, c_\alpha\}$ nur in der Form $\sum_\alpha (c_\alpha^2/m_\alpha) f(\omega_\alpha)$ in die Bewegungsgleichung

ein. Daher bietet sich die Einführung einer sogenannten spektralen Dichte $J(\omega)$ zur Charakterisierung des effektiven Bades über

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \delta(\omega - \omega_{\alpha}) \quad (1.65)$$

an, welche im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ gegen eine glatte Funktion geht. Allgemein lässt sich nun eine Summe in der obigen Form als Integral mit dem Gewicht $J(\omega)$ schreiben,

$$\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} f(\omega_{\alpha}) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) f(\omega). \quad (1.66)$$

Die spektrale Dichte $J(\omega)$ beschreibt nicht das Bad für sich, sondern die effektive Kopplung des Bades an das System. Bei verschwindender Kopplung c_{α} beispielsweise geht $J(\omega)$ gegen Null, ohne dass damit notwendigerweise das Bad betroffen wäre. Nur der effektive Einfluss des Bades auf das System verschwindet. Wir werden auf diesen Sachverhalt bei der Transformation des Bades auf das Gauß-Modell in Kapitel 3.1 nochmals eingehen.

Indem wir die Delta-Distribution in der Definition der spektralen Dichte (1.65) als Integral darstellen, bekommen wir den direkten Zusammenhang mit der Funktion $\kappa(t)$ in Gleichung (1.31) bzw. deren Fouriertransformierte $\tilde{\kappa}(\omega)$,

$$J(\omega) = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma e^{-i\omega\sigma} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} e^{i\omega_{\alpha}\sigma} = \frac{1}{4} \tilde{\kappa}(\omega). \quad (1.67)$$

Es lässt sich nun zum Beispiel der Term H_{T} aus Gleichung (1.7) des Caldeira-Leggett Modells mithilfe der spektralen Dichte $J(\omega)$ folgendermaßen schreiben

$$H_{\text{T}} = \frac{q^2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega}. \quad (1.68)$$

Für den Dämpfungskern $\gamma(t)$ aus Gleichung (1.30) erhalten wir so

$$\gamma(t) = \Theta(t) \frac{2}{M\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos[\omega t]. \quad (1.69)$$

Daraus ergibt sich der Zusammenhang $M\gamma(0) = 1/\pi \int d\omega J(\omega)/\omega$. Die letzte Gleichung können wir invertieren, um die spektrale Dichte $J(\omega)$ als Funktion von $\gamma(t)$ auszudrücken,

$$J(\omega) = M\omega \int_0^{\infty} dt \cos[\omega t] \gamma(t), \quad \omega \geq 0. \quad (1.70)$$

Für die Fouriertransformierte erhalten wir formal den Ausdruck

$$\tilde{\gamma}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \gamma(t) = \frac{2}{M\pi} \int_0^{\infty} d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'} \int_0^{\infty} dt \cos[\omega' t] e^{i\omega t}, \quad (1.71)$$

$$= \frac{2}{M} \int_0^{\infty} d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'} \left[\delta_+(\omega + \omega') + \delta_+(\omega - \omega') \right], \quad (1.72)$$

wobei die Distribution $\delta_{\pm}(x)$, welche bei der halbseitigen Fouriertransformation eine wichtige Rolle spielt,

$$\delta_{\pm}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dk e^{\pm ikx} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \mp \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{x \pm i\epsilon}, \quad (1.73)$$

$$= \mp \frac{1}{2\pi i} \hat{P}\left(\frac{1}{x}\right) + \frac{1}{2} \delta(x) \quad (1.74)$$

mit dem Cauchy-Hauptwert³ \hat{P} verwendet wurde. Somit erhalten wir

$$\tilde{\gamma}(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{2i}{M\pi} \int_0^{\infty} d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'} \frac{\omega + i\epsilon}{(\omega + i\epsilon)^2 - \omega'^2}. \quad (1.75)$$

Analog erhalten wir für die Laplace-Transformierte

$$\hat{\gamma}(\lambda) = \int_0^{\infty} dt e^{-\lambda t} \gamma(t) \quad (1.76)$$

die Form

$$\hat{\gamma}(\lambda) = \frac{2}{M} \int_0^{\infty} d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'} \left[\delta_+(i\lambda + \omega') + \delta_+(i\lambda - \omega') \right], \quad (1.77)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{2}{M\pi} \int_0^{\infty} d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'} \frac{\lambda + \epsilon}{(\lambda + \epsilon)^2 + \omega'^2}. \quad (1.78)$$

Aufgrund der Kausalität des Dämpfungskerns $\gamma(t)$ besteht der formale Zusammenhang zwischen der Fourier- und der Laplacetransformierten,

$$\tilde{\gamma}(\omega = i\lambda) = \hat{\gamma}(\lambda). \quad (1.79)$$

Aus der Definition für die Fouriertransformierte (1.72) von $\gamma(t)$ finden wir die später auftretende Größe unter Verwendung der Eigenschaft der in Gleichung (1.73) definierten halbseitigen Delta-Funktion, $\delta_+(\omega) + \delta_+(-\omega) = \delta(\omega)$,

$$\tilde{\gamma}(0) = \frac{1}{M} \frac{J(\omega)}{\omega} \Big|_{\omega=0} = \int_0^{\infty} dt \gamma(t). \quad (1.80)$$

³ Der Cauchy-Hauptwert ist als Distribution durch den Grenzübergang $\hat{P} \int dx \frac{f(x)}{x} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int^{-\epsilon} dx \frac{f(x)}{x} + \int_{+\epsilon} dx \frac{f(x)}{x}$ definiert.

Die führende Potenz der spektralen Dichte $J(\omega) = M\gamma\omega^s$ ist daher entscheidend für den Gleichstromanteil $\int_{-\infty}^{\infty} dt \gamma(t)$ von $\gamma(t)$. Wir finden

$$\tilde{\gamma}(0) = \begin{cases} 0 & s > 1 \\ \gamma & s = 1 \\ \infty & s < 1 \end{cases} . \quad (1.81)$$

Diese drei Bereiche nennt man superohmsch ($s > 1$), ohmsch ($s = 1$) und subohmsch ($s < 1$). Diese Klassifizierung wird weiter unten im Text noch behandelt. Wir können nun eine mittlere Driftgeschwindigkeit v_D des Systems wie folgt definieren

$$v_D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t ds \dot{q}(s) . \quad (1.82)$$

Die Systemgeschwindigkeit $\dot{q}(t) = v_D + v_f(t)$ wird somit durch eine mittlere Driftgeschwindigkeit v_D und eine Fluktuationsvariable $v_f(t)$ beschrieben. Der Reibungsterm $M \int ds \gamma(t-s) \dot{q}(s)$ der Langevin-Gleichung (1.32) liefert daher im Langzeitverhalten bei einer nichtverschwindenden Driftgeschwindigkeit v_D den Beitrag

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F_D(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} M \int_0^t ds \gamma(t-s) v_D = M v_D \tilde{\gamma}(0) . \quad (1.83)$$

Im Falle einer superohmschen spektralen Dichte liefert dieser konstante Drift keine Rückstellkraft. Im ohmschen Fall bleibt diese Kraft endlich, während im subohmschen Fall ein konstanter Drift unterbunden wird.

Für den Realteil $\tilde{\gamma}'(\omega) = \text{Re}[\tilde{\gamma}(t)]$ ergibt sich unter Verwendung von Gleichung (1.74) direkt die einfache Form

$$\tilde{\gamma}'(\omega) = \frac{1}{M} \left[\Theta(\omega) \frac{J(\omega)}{\omega} + \Theta(-\omega) \frac{J(-\omega)}{-\omega} \right] = \frac{1}{M} \frac{J(|\omega|)}{|\omega|} . \quad (1.84)$$

Für den Imaginärteil erhalten wir formal

$$\tilde{\gamma}''(\omega) = \frac{1}{M\pi} \hat{P} \int_0^{\infty} d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'} \left[\frac{1}{\omega + \omega'} + \frac{1}{\omega - \omega'} \right] , \quad (1.85)$$

$$= \frac{1}{\pi} \hat{P} \int_0^{\infty} d\omega' \tilde{\gamma}'(\omega') \left[\frac{1}{\omega + \omega'} + \frac{1}{\omega - \omega'} \right] . \quad (1.86)$$

Der Zusammenhang von Real- und Imaginärteil der Fouriertransformierten $\tilde{\gamma}(\omega)$ entspricht der Kramers-Kronig Relation und folgt aus der Kausalität von $\gamma(t)$. Da $\gamma(t)$ reell ist, muss $\tilde{\gamma}'(\omega)$ symmetrisch und $\tilde{\gamma}''(\omega)$ antisymmetrisch in ω ein, was durch die obige Form bestätigt wird.

Für den symmetrischen Dämpfungskern $\gamma_s(t) \equiv \gamma(|t|)$ erhalten wir die reelle Fouriertransformierte

$$\tilde{\gamma}_s(\omega) = \frac{2}{M} \frac{J(|\omega|)}{|\omega|}, \quad (1.87)$$

und damit für das Rauschspektrum aus Gleichung (1.63)

$$K(\omega) = \frac{2}{\beta} \frac{J(|\omega|)}{|\omega|}. \quad (1.88)$$

Diese Gleichung hat eine immense Bedeutung bei der Modellierung eines realen quantenmechanischen Bades, da die spektrale Dichte in dieser Gleichung mit einer klassisch messbaren Größe verknüpft ist und somit $J(\omega)$ aus den klassischen Daten extrahiert werden kann. Wie wir schon im vorherigen Abschnitt durch das Rauschspektrum (1.63) gesehen haben, spielt die Wahl der spektralen Dichte $J(\omega)$ eine entscheidende Rolle; sie charakterisiert die Eigenschaft des Bades. Die klassische Badkorrelationsfunktion (1.57) nimmt ausgedrückt durch die spektrale Dichte $J(\omega)$ die Form

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle_B = \frac{2}{\pi\beta} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos[\omega(t-t')] \quad (1.89)$$

an.

Von großer Bedeutung im weiteren ist der folgende Ansatz in der Form eines Potenzgesetzes mit einer Abschneidefrequenz $1/\tau_c$,

$$J(\omega) = M\gamma\omega^s e^{-\omega\tau_c}. \quad (1.90)$$

Ohne diese Unterdrückung beliebig hoher Frequenzen würden einige physikalische Größen divergieren. Im vorigen Abschnitt haben wir beispielsweise die quadratische Abweichung vom Mittelwert der fluktuierenden Kraft ξ berechnet. Ausgedrückt durch die spektrale Dichte erhalten wir

$$\langle (\Delta\xi)^2 \rangle = \frac{2}{\beta\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} = \frac{2M\gamma}{\beta\pi} \frac{\Gamma[s]}{\tau_c^s}. \quad (1.91)$$

Für den Fall der sogenannten ohmschen Dämpfung $J(\omega) = M\gamma\omega$, also für $s = 1$, erhält man im Limes $\tau_c \rightarrow 0$ für den Dämpfungskern

$$\gamma(t) = \Theta(t)2\gamma\delta(t) = \gamma\delta(t). \quad (1.92)$$

Durch diese Delta-Distribution geht die Langevin-Gleichung (1.32) in die gewöhnliche stochastische Differenzialgleichung

$$M\ddot{q}(t) + \partial_q V(t) + M\gamma\dot{q}(t) = \xi(t) \quad (1.93)$$

über. Dabei entspricht der Faktor $M\gamma$ einem klassischen Reibungskoeffizienten η . Für diesen strikt ohmschen Fall finden wir die klassische Mobilität μ_0 eines Brownschen Teilchens mittels einer Kraft F , welche über das Potenzial $V(q) = Fq$ an das System koppelt. Aus Gleichung (1.93) erhalten wir

$$\mu_0 \equiv \frac{\langle \dot{q} \rangle}{F} = \frac{1}{\eta}. \quad (1.94)$$

Der Gedächtnisterm verschwindet also bei ohmscher Dämpfung im klassischen Fall. Das quantenmechanische Analogon werden wir weiter unten besprechen. Der Wert $s = 1$ ist somit ein ausgezeichnete Wert und wird wie oben schon erwähnt als ohmsch bezeichnet. Entsprechend werden die Bereiche $s < 1$ als subohmsch und $s > 1$ als superohmsch bezeichnet. Beim Übergang vom subohmschen in den superohmschen Bereich tritt eine qualitative Änderung beim Verhalten des Bades ein, wie wir an der allgemeinen Form für den Dämpfungskern unter Verwendung der spektralen Dichte (1.90) ablesen können,

$$\gamma(t) = \Theta(t) \frac{2\gamma}{\pi} \frac{\Gamma(s)}{(t^2 + \tau_c^2)^{s/2}} \cos[s \arctan(t/\tau_c)]. \quad (1.95)$$

Da der Arcus-Tangens monoton von $-\pi/2$ nach $\pi/2$ ansteigt, ist der Bildbereich des Kosinus für $s < 1$ auf dem ganzen Definitionsbereich $t \in [-\infty, \infty]$ positiv. Für $s = 1$ hat der Kosinus zwei Minima bei $t \rightarrow \pm\infty$. Ab $s > 1$ bewegen sich diese Minima Richtung $t = 0$ und der Kosinus steigt danach wieder an. Dies ist das klassische Bild für einen Phasenübergang beim Übergang von subohmschen in den superohmschen Bereich. Später werden wir diesen qualitativen Wechsel auch an physikalischen Größen erkennen. Die Halbwertsbreite finden wir, sofern wir den Kosinus-Term vernachlässigen, bei $t = (2^{s/2} - 1)\tau_c$. Dies bedeutet, dass für Zeiten $t \gg \tau_c$ der Integralkern $\gamma(t)$ gegen Null geht und somit kein Gedächtnisterm für diese Zeiten vorhanden ist. Mit τ_c wird also eine charakteristische Zeitskala des Bades eingeführt. Sehr leicht liest man dieses Verhalten im ohmschen Fall $s = 1$ ab. Der Kosinus-Term geht in diesem Falle in die algebraische Funktion

$$\cos[\arctan(t/\tau_c)] = \frac{1}{\sqrt{1 + (t/\tau_c)^2}} \quad (1.96)$$

über und wir erhalten die sogenannte Drude-Form

$$\gamma(t) = \Theta(t) \frac{2\gamma}{\pi} \frac{1}{\tau_c} \frac{1}{1 + (t/\tau_c)^2}, \quad (1.97)$$

mit dem Grenzfall (1.92) im Limes $\tau_c \rightarrow 0$. Umgekehrt erzeugt eine spektrale Dichte mit einem Drude-Cutoff der Form⁴

$$J_D(\omega) = \frac{M\gamma\omega}{1 + (\omega\tau_D)^2} \quad (1.98)$$

einen exponentiellen Abfall des Dämpfungskernes $\gamma(t)$ mit der expliziten Form

$$\gamma_D(t) = \Theta(t)\gamma \frac{1}{\tau_D} e^{-t/\tau_D}. \quad (1.99)$$

Im Grenzfall $\tau_D \rightarrow 0$ erhalten wir einen zeitlich lokalen Dämpfungskern in der Gestalt von Gleichung (1.92). Dies sieht man sofort ein, indem man über eine Testfunktion $f(s)$ integriert und die Theta-Funktion beachtet, also

$$\lim_{\tau_D \rightarrow 0} \int dt \gamma_D(t-s)f(s) = \gamma f(t). \quad (1.100)$$

Für die Fouriertransformierte (1.72) des Dämpfungskernes $\gamma(t)$ finden wir für die spektrale Dichte (1.98) einen analytischen Ausdruck,

$$\tilde{\gamma}(\omega) = \gamma \frac{1}{1 - i\omega\tau_D} = \gamma \left[\frac{1}{1 + (\omega\tau_D)^2} + i \frac{\omega\tau_D}{1 + (\omega\tau_D)^2} \right]. \quad (1.101)$$

Der Term H_T in Gleichung (1.7), welcher einer Umorganisationsenergie des Bades durch die Ankopplung an die Systemkoordinate entspricht, nimmt die Form

$$H_T = \frac{q^2}{2} \sum_{\alpha=1}^N \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} = q^2 M\gamma(0) = q^2 \frac{M\gamma \Gamma[s]}{\pi \tau_c^s} \quad (1.102)$$

an. Im strengen Grenzfall ($\tau_c \rightarrow 0$) divergiert diese Umorganisationsenergie im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$. Weiterhin ist dieser Term gerade proportional zur Fluktuationsstärke $\langle (\Delta\xi(t))^2 \rangle$ aus Gleichung (1.62) bzw. (1.91) mit

$$H_T = \beta \frac{q^2}{2} \langle (\Delta\xi(t))^2 \rangle. \quad (1.103)$$

Für das Rauschspektrum (1.63) erhalten wir

$$K(\omega) = \frac{M\gamma}{\beta} \omega^{s-1} e^{-\omega\tau_c}, \quad (1.104)$$

⁴Der allgemeinere Fall $J_D(\omega) = \frac{M\gamma\omega^s}{1 + (\omega\tau_D)^2}$ lässt sich ebenfalls elementar integrieren, mit dem Resultat (siehe auch Gleichung (1.413))

$$\gamma(t) = \Theta(t) \frac{2\gamma}{\pi} \left(\frac{\pi}{2\tau_D^s} \frac{\cosh[t/\tau_D]}{\sin[\pi s/2]} - \frac{t^{2-s} \cos[\pi s/2] \Gamma[s-2]}{\tau_D^2} {}_2F_1\left(1, \frac{3-s}{2}, \frac{4-s}{2}, (t/2\tau_D)^2\right) \right).$$

womit wir wieder für den ohmschen Fall ein weißes Rauschen mit einer Abschneidefrequenz $\omega = 1/\tau_c$ finden. Am Ende dieses Abschnittes betrachten wir noch die Fourier-Transformierte der reellen stochastischen Kraft $\xi(t)$ mit

$$\tilde{\xi}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \xi(t) \quad (1.105)$$

aus Gleichung (1.33). Der Erwartungswert von $\tilde{\xi}(\omega)$ verschwindet, wie man direkt aus Gleichung (1.49) abliest. Für die Zweipunkt-Korrelationsfunktion erhalten wir aus Gleichung (1.55)

$$\left\langle \tilde{\xi}(\omega) \tilde{\xi}^*(\omega') \right\rangle_{\text{B}} = \int dt dt' e^{-i\omega t} e^{i\omega' t'} \langle \xi(t) \xi(t') \rangle_{\text{B}} , \quad (1.106)$$

$$= 2\pi\delta(\omega - \omega') \frac{M}{\beta} \tilde{\gamma}_s(\omega) = 2\pi\delta(\omega - \omega') \frac{2}{\beta} \frac{J(|\omega|)}{|\omega|} \quad (1.107)$$

die Korrelationsfunktion der Fouriertransformierten eines gaußschen stochastischen Prozesses. Gleichung (1.107) erhält man einfach aus (1.106), indem man zu einer Schwerpunkt- τ und Relativzeit σ mit $\tau = (t + t')/2$, $\sigma = t - t'$ übergeht. Die Integration über τ erzeugt die Deltafunktion $\delta(\omega - \omega')$, während die Integration über σ die Fouriertransformierte des symmetrischen Dämpfungskerns $\tilde{\gamma}_s$ erzeugt.

Gleichung (1.107) bedeutet nun für die komplexen Fourierkoeffizienten $\tilde{\xi}(\omega)$ einer gaußschen stochastischen Kraft, dass diese nicht korreliert sind und das Betragsquadrat der Fourierkoeffizienten

$$\left\langle \tilde{\xi}(\omega) \tilde{\xi}^*(\omega) \right\rangle_{\text{B}} = \left\langle |\tilde{\xi}(\omega)|^2 \right\rangle_{\text{B}} = \frac{4\pi}{\beta} \frac{J(|\omega|)}{|\omega|} = 2\pi K(\omega) \quad (1.108)$$

gaußverteilt vorliegt und über die klassisch erfassbare Größe des Rauschspektrums $K(\omega)$ aus Gleichung (1.88) gegeben ist, während deren Phase beliebig ist. Bei einem strikt ohmschen Rauschen mit einer spektralen Dichte $J(\omega) \propto \omega$ ist der Erwartungswert des Amplitudenquadrats $\langle |\tilde{\xi}(\omega)|^2 \rangle_{\text{B}}$ gerade wieder unabhängig von der Frequenz ω ; dies entspricht einem weißen Rauschen. Eine Sonderstellung nimmt der reelle Koeffizient $\tilde{\xi}(0)$ ein, da dieser dem sogenannten Gleichstromanteil von $\xi(t)$ entspricht und somit $\tilde{\xi}(0) = \xi^*(0)$ gilt.

Gleichung (1.107) liefert uns eine einfache Möglichkeit, eine gaußsche stochastische Kraft $\xi(t)$ mit den geforderten Eigenschaften eines verschwindenden Erwartungswertes und einer Zweipunkt-Korrelationsfunktion der Gestalt (1.55) zu generieren, indem wir ein Set $\{\xi_n\}$ mit gaußscher Statistik und der obigen Gewichtung (1.107) erzeugen und mittels Fouriertransformation in den Zeitbereich rücktransformieren. Wir werden diesen Punkt in Abschnitt 1.4.19 genauer betrachten.

1.3.1 Langsame und schnelle Badfrequenzen und deren Ankopplung an die Systemkoordinate

Zu der Fouriertransformierten $\tilde{\gamma}(\omega)$ des Dämpfungskernes $\gamma(t)$ bei fester Frequenz ω tragen alle Frequenzen ω' der spektralen Dichte $J(\omega')$ bei, was wir direkt aus Gleichung (1.75) ablesen können. Dennoch werden wir im Folgenden sehen, dass schnelle Badmoden nur für das Kurzzeitverhalten des Systems relevant sind. Um diese Aussage zu verifizieren, betrachten wir nun eine zeitgemittelte Koordinate $\bar{q}(t)$ mithilfe eines Fensters $A_\Lambda(s)$ in Gestalt einer sogenannten sinc-Funktion,

$$\bar{q}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} ds A_\Lambda(t-s) q(s), \quad (1.109)$$

$$A_\Lambda(t-s) = \frac{\Lambda}{\pi} \frac{\sin[\Lambda(t-s)]}{\Lambda(t-s)}. \quad (1.110)$$

Der Parameter Λ^{-1} entspricht dabei einer charakteristischen Zeit zur Mittelwertbildung. Für Zeiten $t \gg \Lambda^{-1}$ geht das Fenster $A_\Lambda(t)$ rasch gegen Null. Diese Mittelwertbildung entspricht einer Faltung, so dass wir im Frequenzraum

$$\bar{q}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \tilde{q}(\omega) \Theta(\Lambda - |\omega|) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\Lambda}^{\Lambda} d\omega e^{-i\omega t} \tilde{q}(\omega) \quad (1.111)$$

erhalten. Das Rechteckfenster $\Theta(\Lambda - |\omega|)$ entspricht dabei der Fouriertransformierten des obigen sinc-Fensters,

$$\Theta(\Lambda - |\omega|) = \Theta(\Lambda - \omega) - \Theta(-\Lambda - \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} \frac{\Lambda}{\pi} \frac{\sin[\Lambda s]}{\Lambda s}. \quad (1.112)$$

Generell gilt, unabhängig von der genauen Form des Fensters, dass wir aufgrund einer zeitlichen Mittelung über dem Zeitraum Λ^{-1} im Frequenzbereich Frequenzen $\omega \gg \Lambda$ stark unterdrücken. Wir spalten nun die spektrale Dichte $J(\omega) = J_{\text{lf}}(\omega) + J_{\text{hf}}(\omega)$ auf. Der hochfrequente Anteil bestehe dabei aus Badfrequenzen $\omega \gg \Lambda$ [1]. Die Aufspaltung in einen niederfrequenten und einen hochfrequenten Anteil erreicht man einfach durch eine Funktion $f(\omega/\omega_T)$, welche für ein Argument kleiner Eins gegen Eins und für ein Argument größer Eins gegen Null strebt. Ein harter Übergang wird beispielsweise durch die Theta-Funktion erreicht, $f(\omega/\omega_T) = \Theta(1 - \omega/\omega_T)$. Alle relevanten Zeitskalen des Systems seien nun größer als $\tau_T = 1/\omega_T \ll \Lambda^{-1}$, siehe Abbildung 1.2.

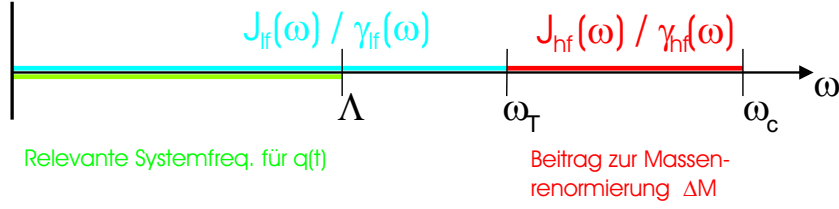


Abbildung 1.2: Die Abbildung zeigt die Zerlegung der relevanten Badfrequenzen der spektralen Dichte in einen niederfrequenten Anteil $J_{\text{lf}}(\omega)$ und einen hochfrequenten Anteil $J_{\text{hf}}(\omega)$. Die Trennfrequenz ω_T ist dabei wesentlich höher als die relevante Frequenz Λ , welche durch die Zeitmittelung der Systemkoordinate $q(t)$ entsteht.

Für die Fouriertransformierte $\tilde{\gamma}(\omega) = \tilde{\gamma}_{\text{lf}}(\omega) + \tilde{\gamma}_{\text{hf}}(\omega)$ aus Gleichung (1.75) finden wir daher in guter Näherung für den hochfrequenten Anteil

$$\lim_{\omega \leq \Lambda \ll \omega_T} \tilde{\gamma}_{\text{hf}}(\omega) = \frac{2\omega}{iM\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{J_{\text{hf}}(\omega')}{\omega'^3}. \quad (1.113)$$

Um die Eigenschaft der einzelnen Frequenzen auf das System besser zu verstehen, beschreiben wir die Langevin-Gleichung (1.32) im Frequenzraum unter Verwendung der Zeitmittelung (1.109). Der kinetische Term besitzt dann die Form

$$M\ddot{q}^2 = -M \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \omega^2 \tilde{q}(\omega). \quad (1.114)$$

Indem wir die Ankopplung des Systems an das Bad zur Zeit $t = -\infty$ vornehmen, erhalten wir für den Reibungsterm des hochfrequenten Anteils der spektralen Dichte $J_{\text{hf}}(\omega)$

$$M \int_{-\infty}^{\infty} ds \gamma_{\text{hf}}(t-s) \dot{\tilde{q}}(s) = M \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \tilde{\gamma}_{\text{hf}}(\omega) (-i\omega) \tilde{q}(\omega). \quad (1.115)$$

Aus diesem Verhalten lesen wir direkt ab, dass der Effekt des hochfrequenten Anteils der spektralen Dichte im Langzeitverhalten allein durch eine renormierte Masse M_r mit

$$M_r = M + \Delta M_{\text{hf}} \quad (1.116)$$

beschrieben wird, wobei der Massenkorrekturfaktor ΔM_{hf} durch

$$\Delta M_{\text{hf}} = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{J_{\text{hf}}(\omega')}{\omega'^3} = iM \frac{\tilde{\gamma}_{\text{hf}}(\omega)}{\omega}. \quad (1.117)$$

gegeben ist. Der genaue Wert von ΔM_{hf} hängt nun explizit von der gewählten Form $f(\omega/\omega_{\text{T}})$ des Übergangs und der expliziten Form der spektralen Dichte $J(\omega)$ ab. Die Langevin-Gleichung (1.32) geht somit in die Form

$$M_{\text{r}} \ddot{\bar{q}}(t) + \partial_{\bar{q}} V(\bar{q}, t) + M \int_0^t ds \gamma_{\text{lf}}(t-s) \dot{\bar{q}}(s) = \xi(t), \quad (1.118)$$

über und beschreibt das Verhalten der zeitgemittelten Systemkoordinate $\bar{q}(t)$ aus Gleichung (1.109). In diese Beschreibung geht nun nur noch der niederfrequente Anteil der spektralen Dichte $J_{\text{lf}}(\omega)$ in Gestalt des Dämpfungskernes $\gamma_{\text{lf}}(t-s)$ ein.

Wir betrachten nun den Korrekturterm ΔM_{hf} zur renormierten Masse M_{r} für den expliziten Fall einer scharfen Übergangsfunktion an der Stelle ω_{T} mit $f(\omega/\omega_{\text{T}}) = \Theta(1 - \omega/\omega_{\text{T}})$ und einer spektralen Dichte $J(\omega)$ der Form

$$J(\omega) = M\gamma \omega^s e^{-\omega\tau_c}, \quad (1.119)$$

$$J_{\text{lf}}(\omega) = J(\omega) \Theta(1 - \omega/\omega_{\text{T}}), \quad (1.120)$$

$$J_{\text{hf}}(\omega) = J(\omega) [1 - \Theta(1 - \omega/\omega_{\text{T}})]. \quad (1.121)$$

Wir finden aus der obigen Form die Massenkorrektur

$$\Delta M_{\text{hf}} = \frac{2M\gamma}{\pi} \tau_c^{2-s} \Gamma[s-2, \omega_{\text{T}}\tau_c]. \quad (1.122)$$

Die Funktion $\Gamma[a, b]$ beschreibt dabei die unvollständige Gammafunktion mit der Integraldarstellung

$$\Gamma[a, b] = \int_b^{\infty} dt t^{a-1} e^{-t}. \quad (1.123)$$

Der Grenzfall $\tau_c \rightarrow 0$, existiert nur für $s < 2$ und liefert als Massenkorrektur

$$\Delta M_{\text{hf}} = \frac{2M\gamma}{\pi} \frac{1}{(2-s)\omega_{\text{T}}^{2-s}}. \quad (1.124)$$

Der Korrekturterm der effektiven Masse ΔM_{hf} divergiert für $s \geq 2$ im Grenzfall $\tau_c \rightarrow 0$. Dies hat zur Konsequenz, dass alleine die schnellen Moden des Bades dafür sorgen, dass das System eine divergierende effektive Masse erhält und damit eine Dynamik des Systems komplett unterbunden wird. Die Systemkoordinate wird dabei lokalisiert. Die Annahme $\tau_c \rightarrow 0$ ist daher für diesen Bereich unphysikalisch.

Für den Bereich $s \geq 2$ benötigen wir aus diesem Grund einen Frequenz-Cutoff. Unter Verwendung der spektralen Dichte $J(\omega) = M\gamma\omega^s\Theta(\omega - \omega_c)$ erhalten wir

$$\Delta M_{\text{hf}} = \frac{2M\gamma}{\pi} \begin{cases} \frac{\omega_c^{s-2} - \omega_{\text{T}}^{s-2}}{s-2} & s \neq 2 \\ \ln \left[\frac{\omega_c}{\omega_{\text{T}}} \right] & s = 2 \end{cases}. \quad (1.125)$$

Zusammenfassend finden wir somit, dass Badfrequenzen ω , welche größer sind als alle für das System relevante Frequenzen, lediglich zu einer Massenrenormierung in der Systembeschreibung führen. In der Literatur findet man diesen Effekt oftmals unter dem Schlagwort *adiabatische Badapproximation* – die schnellen Badmoden folgen quasi in der zeitgemittelten Beschreibung direkt der Systemkoordinate.

1.3.2 Flußgleichung für die renormierte Masse

Aus Gleichung (1.114) lesen wir ab, dass der kinetische Term $M\dot{q}^2$ wie ein Filter für hohe Systemfrequenzen $\tilde{q}(\omega)$ wirkt. Wenn sich nun die effektive Masse M_r aufgrund der Ausintegration der Badmoden mit Frequenzen $\omega > \omega_T$ vergrößert, dann ergibt sich dadurch eine etwas kleineres effektives Λ bzw. ω_T . Gleichung (1.114) macht die folgende Abschätzung plausibel,

$$M\omega_T^2 = M'\omega_T'^2. \quad (1.126)$$

Wir können daher $\omega_T^{(n)} = [\alpha M^{(n)}]^{-1/2}$ setzen, wobei $\alpha \gg 1$ gelten soll. Dies führt zu einem rekursiven Prozess für die effektive Masse,

$$\Delta M^{(0)} = \frac{2}{\pi} \int_{[\alpha M]^{-1/2}}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^3}, \quad (1.127)$$

$$\Delta M^{(1)} = \Delta M^{(0)} + \frac{2}{\pi} \int_{[\alpha M^{(0)}]^{-1/2}}^{[\alpha M]^{-1/2}} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^3} = \frac{2}{\pi} \int_{[\alpha M^{(0)}]^{-1/2}}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^3},$$

⋮

$$\Delta M^{(\infty)} = \frac{2}{\pi} \int_{[\alpha(M+\Delta M^{(\infty)})]^{-1/2}}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^3}. \quad (1.128)$$

Dies bedeutet, dass wir eine monoton steigende Folge $\Delta M^{(n+1)} > \Delta M^{(n)}$ finden, welche schlußendlich gegen den Grenzwert $\Delta M^{(\infty)}$ konvergiert, sofern das Integral (1.128) existiert. Mit einer spektralen Dichte der Form $J(\omega) = M\gamma\omega^s\Theta(\omega - \omega_c)$ finden wir mithilfe der Gleichung (1.125) die Bedingung für das Verhältnis $x = \Delta M^{(\infty)}/M > 0$,

$$(s-2)x + (\alpha M)^{(s-2)/2}(1+x)^{(s-2)/2} = \frac{2\gamma}{\pi}\omega_c^{s-2} \quad (1.129)$$

für $s \neq 2$, während der Fall $s = 2$ die Gleichung

$$\frac{e^x}{(1+x)^{\gamma/\pi}} = [\alpha M\omega_c^2]^{\gamma/\pi} \quad (1.130)$$

erfüllen muss.

1.4 Funktionalmethoden und die quantenmechanische Behandlung des Bades

Nach der klassischen Beschreibung soll nun das Gesamtsystem quantenmechanisch beschrieben werden. Dazu werden wir die Realzeitentwicklung des Systems betrachten, indem wir die Zeitentwicklung der Dichtematrix als Pfadintegrale darstellen und die Freiheitsgrade des Bades ausintegrieren als auch die quantenmechanische Zustandssumme, wobei wir im letzteren Fall nach einer Wick-Rotation zu einer euklidischen Wirkung als Gewicht der Pfadintegrale gelangen. Beide Darstellungen sind formal eng miteinander verknüpft. Während jedoch die extremale Konfiguration im Realzeitformalismus der klassischen Lösung entspricht, kommt man im Imaginärzeitformalismus zu Instantonlösungen, welche sich zeitlich nicht ändern. Dies ist eine Folge der Wick-Rotation. Während in der Wirkung die Lagrangefunktion mit $L = T - V$ eingeht, ist es bei der sogenannten euklidischen Wirkung die Energiedichte $T + V$. Diese wird aber gerade durch einen verschwindenden kinetischen Anteil extremiert, also durch eine zeitunabhängige Lösung im Potenzialminimum von $V(q)$.

1.4.1 Der Propagator als Pfadintegral

Für den Fall eines explizit zeitabhängigen Hamiltonoperators kann die Schrödingergleichung iterativ gelöst werden, wodurch man zu einem unitären Zeitentwicklungsoperator U der Form

$$U(t'', t') = \hat{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} d\tau \hat{H}(\tau) \right], \quad (1.131)$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} d\tau \hat{H}(\tau) - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t'}^{t''} d\tau \int_{t'}^{\tau} d\tau' \hat{H}(\tau) \hat{H}(\tau') + \dots \quad (1.132)$$

für Zeiten $t'' \geq t'$ gelangt⁵. In der zweiten Zeile haben wir benutzt, dass sich das explizit zeitgeordnete Integral $\int_{t'}^{t''} d\tau \int_{t'}^{\tau} d\tau' \hat{H}(\tau) \hat{H}(\tau')$ mit dem Zeitordnungsoperator als $1/2 \hat{T}(\int_{t'}^{t''} d\tau \hat{H}(\tau))^2$ schreiben lässt. Der Zeitordnungsoperator \hat{T} ordnet dabei Operatoren in chronologischer Reihenfolge. In der Reihenentwicklung (1.132) wird diese Zeitordnung automatisch eingehalten.

⁵ Wenn der Hamiltonoperator $H(t)$ zu verschiedenen Zeiten kommutiert, kann der Propagator elementar integriert werden. Mit $U(t, t) = 1$ erhalten wir aus der DGL $i\hbar \dot{U}(t, t')/U(t, t') = H(t)$ die Lösung $\ln U(t'', t') = -i/\hbar \int_{t'}^{t''} d\tau H(\tau)$. Dies entspricht genau Gleichung (1.131) für den Fall $[H(t''), H(t')] = 0$.

Der inverse Operator von U lässt sich durch folgende Form darstellen,

$$U^{-1}(t'', t') = U^\dagger(t'', t') = \hat{T}^\dagger \exp \left[+ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} d\tau \hat{H}(\tau) \right], \quad (1.133)$$

$$= 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} d\tau \hat{H}(\tau) - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t'}^{t''} d\tau \int_{\tau}^{t''} d\tau' \hat{H}(\tau) \hat{H}(\tau') + \dots \quad (1.134)$$

wobei der adjungierte Operator \hat{T}^\dagger Operatoren in inverser chronologischer Reihenfolge anordnet. Weiterhin besitzt der Zeitentwicklungsoperator U die Markov-Eigenschaft

$$U(t'', t') U(t', t) = U(t'', t), \quad t'' \geq t' \geq t \quad (1.135)$$

und enthält somit keinen Gedächtnis-term. Das Matrixelement $\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle$ wird als Propagator im Ortsraum q bezeichnet. Für die Pfadintegraldarstellung ist der infinitesimale Propagator

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle q' | U(t + \epsilon, t) | q \rangle = \langle q' | e^{-i\epsilon \hat{H}(t)/\hbar} | q \rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (1.136)$$

von entscheidender Bedeutung. Wie schon Dirac bemerkte, kann man wegen der obigen Markov-Eigenschaft den Zeitentwicklungsoperator als ein Produkt über infinitesimale Operatoren schreiben,

$$U(t'', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=0}^{N-1} U(t_i + \epsilon, t_i), \quad (1.137)$$

$$= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_{N-1}}^{t_N} d\tau H(\tau) \right) \cdots \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} d\tau H(\tau) \right), \quad (1.138)$$

$$= e^{-i\epsilon H(t_N)/\hbar} e^{-i\epsilon H(t_{N-1})/\hbar} \dots e^{-i\epsilon H(t_1)/\hbar} \quad (1.139)$$

wobei wir $t_0 = t'$, $t_N = t''$, $t_j = t_0 + j\epsilon$ setzen und als infinitesimalen Zeitschritt $\epsilon = (t'' - t')/N$ verwenden.

Diese Zerlegung in ein Produkt der Form (1.139) gelingt nur durch die explizite Zeitordnung. Dies erkennt man sofort, indem man das Integral über der Zeit t im Zeitentwicklungsoperator (1.131) als Summe approximiert. Geht man zu einem Produkt über, so treten aufgrund der Baker-Campbell-Hausdorff Zerlegung⁶ der Exponentialfunktion weitere Kommutatoren auf; zeitgeordnete Kommutatoren verschwinden jedoch identisch. Als Approximation finden wir daher mit $\int dt A(t) \approx \sum_{i=0}^N \Delta t A(t_i)$

$$\exp \left[\int dt A(t) \right] \approx \exp \left[\sum_{i=1}^N \Delta t A(t_i) \right], \quad (1.140)$$

⁶Zur Baker-Campbell-Hausdorff Zerlegung siehe Gleichung (A.70).

$$\hat{T} \exp \left[\int dt A(t) \right] \approx \exp [\Delta t A(t_N)] \exp [\Delta t A(t_{N-1})] \cdots \exp [\Delta t A(t_1)] . \quad (1.141)$$

Die Zeitordnung ist daher zwingend für die Einhaltung der Markov-Eigenschaft aus Gleichung (1.135). Kommutiert $A(t)$ mit sich selbst zu verschiedenen Zeiten, dann sind die beiden Ausdrücke natürlich identisch und eine Zeitordnung ist redundant.

Liegt H nun in der Standardform $H(p, x, t) = T(p, t) + V(x, t)$ vor, also mit einem kinetischen Anteil T , welcher nur vom Impuls p abhängt und einem potenziellen Anteil, welcher nur vom Ort x abhängt, dann faktorisiert der infinitesimale Propagator (1.139) in erster Ordnung nach der Baker-Campbell-Hausdorff Formel (A.70) in

$$e^{-i\epsilon(T+V)/\hbar} \approx e^{-i\epsilon T/\hbar} e^{-i\epsilon V/\hbar} e^{-i\epsilon^2/2[T,V]/\hbar^2 + \mathcal{O}(\epsilon^3)} , \quad (1.142)$$

und der letzte Term kann für genügend glatte und nichtsinguläre Potentiale im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ vernachlässigt werden. Eine wichtige Ausnahme stellt z.B. das Coulomb-Potenzial dar. Eine genauere Betrachtung dieser Voraussetzung findet man z.B. in Literatur [14].

Für den Propagator in der Ortsdarstellung erhalten wir durch sukzessives Einschleiben der Vollständigkeitsrelation⁷ für die Orte x_i und Impulse p_i

$$\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} \frac{\mathcal{D}x \mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp [i\mathcal{A}[p, x]/\hbar] , \quad (1.143)$$

$$\mathcal{A}[p, x] = \int_{t'}^{t''} dt (p\dot{x} - H(p, x, t)) , \quad (1.144)$$

wobei wir unter dem Integral $\int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} \mathcal{D}x \mathcal{D}p$ symbolisch den Grenzfall

$$\int \frac{\mathcal{D}x \mathcal{D}p}{2\pi\hbar} = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{l=1}^N \left[\int dx_l \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \quad (1.145)$$

verstehen und die Randbedingung $x_0 = q'$ und $x_N = q''$ für das Integral über $\mathcal{D}x$ gilt. Ebenso ist der Term $\mathcal{A}[p, x]$ als Grenzfall der diskretisierten

⁷ Die Bildung des Matrixelementes des Zeitentwicklungsoperators ist prinzipiell mit jedem vollständigen Satz von Hilbert-Vektoren möglich. Genau so gut kann man den Propagator auch in der Impulsdarstellung verwenden. Zur Beschreibung von Bosonen/Fermionen eignen sich besonders kohärente Zustände, welche Eigenvektoren zum Vernichtungsoperator der Bosonen/Fermionen darstellen. In der Literatur findet man dafür auch die Bezeichnung holomorphe Darstellung.

Darstellung

$$\mathcal{A}[p, x] = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{l=1}^N \epsilon \left[p_l \frac{x_l - x_{l-1}}{\epsilon} - H(p_l, x_l, t_l) \right] \quad (1.146)$$

zu verstehen. Formal erscheint der Term $\mathcal{A}[p, x]$ als klassische Wirkung. Da $\mathcal{A}[p, x]$ ein Funktional der unabhängigen Funktionen $p(t)$ und $x(t)$ darstellt, können wir hier \dot{x} nicht als Funktion des kanonischen Impulses p darstellen. Das Integral über $\mathcal{D}p$ ist frei und durch keine Randbedingungen beschränkt. Diese Tatsache spiegelt die Heisenbergsche Unschärferelation wieder. Da die Variable q' und q'' exakt angegeben wird, ist keine Information über die dazu konjugierten Impulse p' und p'' vorhanden.

Liegt der kinetische Term in der quadratischen Form $T = p^2/2m$ vor, so kann die gaußsche Integration⁸

$$\int \mathcal{D}p \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \frac{p^2}{2m} - p\dot{x} \right] = \Pi^{-1} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \frac{1}{2} m \dot{x}^2 \right] \quad (1.147)$$

ausgeführt werden und man erhält für den Propagator in der Ortsdarstellung

$$\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \Pi^{-1} \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} \mathcal{D}x \exp [iS[x]/\hbar], \quad (1.148)$$

$$S[x] = \int_{t'}^{t''} dt \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x, t) = \int_{t'}^{t''} dt L(x, t), \quad (1.149)$$

mit der Wirkung $S[x]$ und der Lagrangefunktion $L(x, t)$, welche wieder als Grenzfall einer diskreten Darstellung zu verstehen sind. Die Integration über $\mathcal{D}p$ erzeugt bei einem kinetischen Term $p^2/(2m)$ also gerade die aus der klassischen Mechanik bekannte Legendre-Transformation.

Der Normierungsfaktor Π ist dabei in der diskretisierten Darstellung durch den Ausdruck

$$\Pi^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{l=1}^{N+1} \left[\int \frac{dp_l}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon \frac{p_l^2}{2m}} \right] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{Nm}{2\pi\hbar i(t'' - t')} \right)^{N/2} \quad (1.150)$$

gegeben. Wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, lässt sich dies Formal als Determinante des Eins-Operators schreiben, also

$$\Pi^{-1} = \int \mathcal{D}p \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \frac{p^2}{2m} \right] \propto \left[\det \left(\frac{1}{m} \right) \right]^{-1/2}. \quad (1.151)$$

⁸Eine genauere Betrachtung der gaußschen Integrale erfolgt weiter unten in diesem Kapitel.

Der Name Pfadintegral rührt nun daher, dass die Integration über alle Orte x_i durchgeführt wird, was im Limes $N \rightarrow \infty$ einer Integration über alle möglichen Pfade von q' nach q'' entspricht. Der Entscheidende Beitrag kommt nun von dem Pfad, welcher das Wahrscheinlichkeitsgewicht $\exp[iS[q]/\hbar]$ extremalisiert, also der klassischen Lösung. Fluktuationen um diese klassische Lösung können als Quantenfluktuationen verstanden werden. Diese tragen zu einer Variation der Wirkung $\delta S/\hbar$ bei. Für ein freies Teilchen ($V(q) = 0$) findet man für $\delta S/\hbar \approx 1$ die Abschätzung [13]

$$\left| q(t) - q(t + \epsilon) \right| \sim \sqrt{\frac{\hbar \epsilon}{m}}. \quad (1.152)$$

Der Vorteil dieser Pfadintegraldarstellung liegt vor allem darin, dass die Pfadintegration als eine Integration im Konfigurationsraum, also im Ortsraum aufgefasst werden kann. Da diese Pfade im Allgemeinen kontinuierlich aber nicht differenzierbar sind, wie Gleichung (1.152) zeigt, ist es wichtig, dass die obigen Darstellungen als Grenzfall diskreter Darstellungen zu verstehen sind, da der Limes nicht notwendigerweise existiert [14, 13], was auch für die oben definierte Normierungskonstante Π^{-1} gilt. Ein ganz ähnliches Problem hängt mit dem Operatorordnungsproblem in der Quantenmechanik zusammen; in der Pfadintegraldarstellung existiert dieses Problem auf den ersten Blick nicht. Allerdings zeigt sich, dass bei einer Wirkung mit einem Mischterm aus p und x die Diskretisierung der Ortskoordinate nicht eindeutig durchgeführt werden kann. Erst eine Ordnung analog zur Operatorordnung macht die Diskretisierung eindeutig. Dies ist ein weiterer Hinweis darauf, dass der Kontinuums-limes nicht immer eindeutig existiert. Allgemeiner gesprochen ist der Übergang von der diskreten Darstellung (1.146) in die Funktionaldarstellung (1.144) nicht immer eindeutig; liegt quantenmechanisch ein Operatorordnungsproblem vor, so ist auch der Übergang von der diskreten Darstellung in die Funktionaldarstellung von der Ordnung nichtkommutierender Operatoren abhängig. Trotzdem erleichtert uns die Schreibweise den Blick auf das wesentliche ungemein.

Der kinetische Anteil $T = p^2/2m$ der Wirkung entspricht einem Filter, welcher stetige Pfade bevorzugt und unstetige Pfade unterdrückt. Mit der Normierung Π^{-1} , welche im Limes $N \rightarrow \infty$ divergiert und explizit in Gleichung (1.150) angegeben wurde, nimmt das Integralmaß die folgende Form an [14]

$$\Pi^{-1} \int \mathcal{D}x \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \prod_{i=1}^N \int dx_i \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \rightarrow \int \mathcal{D}x. \quad (1.153)$$

Im Folgenden wird die Normierung Π^{-1} in das Integralmaß $\mathcal{D}x$ einbezogen. Solange nur Quotienten von Pfadintegralen betrachtet werden, kann die

Normierung selber vernachlässigt werden. Dieser Fakt zeigt sich weiter unten beispielsweise dadurch, dass ein gaußsches Pfadintegral durch eine Determinante eines Operators ausgedrückt werden kann. Diese Determinante ist jedoch nicht wohl definiert, wenn der Operator als Grenzfall eines diskretisierten Objekts aufgefasst wird, wie oben schon angedeutet wurde. Erst wenn man durch ein Referenz-Pfadintegral dividiert, bekommt man einen mathematisch sinnvollen Ausdruck. Weiter unten werden wir sehen, dass die Normierungskonstante im wesentlichen proportional zu $(\det[1])^{-1/2}$ ist, was dem obigen Referenzintegral entspricht und in Gleichung (1.151) angedeutet wurde.

Wir betrachten nun noch den inversen (akausalen) Zeitentwicklungsoperator $U^{-1}(t'', t')$ aus Gleichung (1.133), welcher die Produktdarstellung in inverser Zeitordnung besitzt,

$$U^{-1}(t'', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=0}^{N-1} U^{-1}(t_i, t_i - \epsilon), \quad (1.154)$$

$$= e^{i\epsilon H(t_0)/\hbar} e^{i\epsilon H(t_1)/\hbar} \dots e^{i\epsilon H(t_{N-1})/\hbar}, \quad (1.155)$$

wieder mit der obigen Konvention $t_0 = t'$, $t_N = t''$, $t_j = t_0 + j\epsilon$ und $\epsilon = (t'' - t')/N$ für den infinitesimalen Zeitschritt. In der Darstellung als Funktionalintegral über $\mathcal{D}p\mathcal{D}x$ erhalten wir im Vergleich zum Propagator aus Gleichung (1.143)

$$\langle q'' | U^{-1}(t'', t') | q' \rangle = \int_{q(t')=q'}^{q(t'')=q''} \frac{\mathcal{D}x\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp [i\mathcal{A}[p, x]/\hbar]. \quad (1.156)$$

Um Kausalität zu gewährleisten, verstehen wir im Folgenden unter einem Propagator den Ausdruck

$$\langle q'' | U(t'', t') | q' \rangle = \Theta(t'' - t') \int \mathcal{D}x e^{iS[x]/\hbar}, \quad (1.157)$$

wobei $\Theta(t)$ die Schritt-Funktion (Step-Funktion) darstellt.

Der oben eingeführte Realzeitpropagator (1.143), (1.148) definiert ein Funktionalintegral über einen reinen Phasenfaktor. Mathematisch sind diese Integrale wie auch das folgende einfache gaußsche Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp [-i\alpha x^2 + \beta x], \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad (1.158)$$

nicht definiert. Erst durch eine Regularisierung, also eine Vorschrift eines Grenzübergangs, welcher erst am Ende einer Rechenprozedur gebildet wird,

macht dieser Ausdruck Sinn. Dies entspricht der Darstellung von Distributionen oder auch verallgemeinerte Funktion genannt, wozu beispielsweise die Darstellung der Step-Funktion und der Delta-Funktion gehört. Im obigen Fall verwenden wir die sogenannte $i\eta$ -Regularisierung,

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp[-i\alpha x^2 \pm i\beta x] \exp[-\eta x^2] = \sqrt{\frac{\pi}{i\alpha}} \exp\left[\frac{i\beta^2}{4\alpha}\right],$$

$$\operatorname{Re}[i\alpha] = -\operatorname{Im}[\alpha] \geq 0. \quad (1.159)$$

Nur so macht auch der obige explizite Ausdruck für die Normierungskonstante $\tilde{\Pi}$ Sinn. Eine entscheidende Bedeutung im Folgenden liegt darin, dass das Ergebnis aus der analytischen Fortsetzung des gaußschen Integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp[-\alpha x^2 + \beta x] = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left[\frac{\beta^2}{4\alpha}\right], \quad \operatorname{Re}[\alpha] > 0 \quad (1.160)$$

durch $\alpha \rightarrow i\alpha$ folgt. Dem entspricht, wie wir gleich sehen werden, der Übergang von Imaginärzeit τ zur Realzeit t , $\tau \rightarrow it$. Damit können Resultate nach der Pfadintegration zwischen Real- und Imaginärzeit direkt durch analytische Fortsetzung in Beziehung zueinander gebracht werden wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden.

Den euklidischen (Imaginärzeit) Propagator erhält man durch die sogenannte Wick-Rotation der Zeit $t \rightarrow -i\tau$. Der Propagator in der Darstellung (1.143) geht dabei in die Form

$$\langle q'' | U(-i\tau'', -i\tau') | q' \rangle = \int \frac{\mathcal{D}x \mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp[-\mathcal{A}^{(E)}[p, x]/\hbar], \quad (1.161)$$

$$\mathcal{A}^{(E)}[p, x] = \int_{\tau'}^{\tau''} d\tau \left\{ -ip\dot{x} + H(p, x, t) \right\}, \quad (1.162)$$

über. Nun kann bei einem kinetischen Term der Form $p^2/(2m)$ wieder die Integration über $\mathcal{D}p$ durchgeführt werden und wir bekommen den euklidischen Propagator als Pfadintegral im Konfigurationsraum analog zu Gleichung (1.148) als

$$\langle q'' | U(-i\tau'', -i\tau') | q' \rangle = \tilde{\Pi}^{-1} \int \mathcal{D}x \exp[-S^{(E)}[x]/\hbar], \quad (1.163)$$

mit der euklidischen Wirkung $S^{(E)}[x]$ und der Normierung $\tilde{\Pi}^{-1}$

$$S^{(E)}[x] = \int d\tau \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x, t) = \int d\tau L^{(E)}(x, t), \quad (1.164)$$

$$\tilde{\Pi}^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{Nm}{2\pi\hbar(\tau'' - \tau')} \right)^{N/2}. \quad (1.165)$$

Bei diesem Imaginärzeitübergang geht die Wirkung $iS = i \int dt M/2(\partial_t x)^2 - V(x)$ in die euklidische Wirkung $-S^{(E)} = - \int d\tau M/2(\partial_\tau x)^2 + V(x)$ über. Die extremale (klassische) Lösung entspricht somit dem ursprünglichen Problem mit umgekehrtem Potenzial $-V(x)$. Als Funktionalintegral ausgedrückt erhält man

$$\langle q'' | U(-i\hbar\beta, 0) | q' \rangle = \int \mathcal{D}x e^{-S^{(E)}[x]/\hbar}, \quad (1.166)$$

mit dem Integralmaß

$$\int \mathcal{D}x = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}} \prod_{i=1}^N \int dx_i \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}}. \quad (1.167)$$

Die oben eingeführte Regularisierung (1.159) ist daher mit der Wick-Rotation kompatibel, was immense Vorteile durch eine einheitliche Darstellung bedeutet und die Berechnung von Realzeit-Pfadintegralen mithilfe der Wick-Rotation in Imaginärzeit erst möglich macht [20]. Für die Zustandssumme $Z = \text{tr}[\exp -\beta H]$ finden wir daher die Pfadintegraldarstellung

$$Z = \oint_{x(0)=x(\hbar\beta)} \mathcal{D}x e^{-S^{(E)}[x]/\hbar}, \quad (1.168)$$

wobei nun die Anfangs- und Endkoordinaten zusammenfallen, $x(0) = x(\hbar\beta)$, was durch ein Integral über geschlossene Pfade \oint symbolisiert wurde.

Der Pfad, welcher die Wirkung im Realzeitfall extremalisiert, entspricht der klassischen Lösung. Kleine Fluktuationen in der Umgebung dieses ausgewählten Pfades ändern die Wirkung in erster Ordnung nicht und somit kann sich der Beitrag dieser Pfade aufaddieren. Im Gegensatz dazu tragen Pfade weit entfernt vom extremalen klassischen Pfad durch die schnellen Oszillationen nicht sonderlich bei, da sie sich wegmitteln. Mathematisch ist diese Aussage jedoch sehr schwierig und stellt noch immer ein konzeptionelles Problem dar, da selbst das Maß $\mathcal{D}x$ im eigentlichen Riemannschen Sinne kein Maß darstellt und wirklich nur als Kontinuumsliches einer eigentlich diskreten Darstellung betrachtet werden kann. Anders ist dies nun im Falle des Imaginärzeitpropagators. Da der Exponent nun reell ist, tritt eine exponentielle Unterdrückung von Pfaden auf, die entfernt vom extremalen Pfad liegen.

Der Vollständigkeit halber soll noch erwähnt werden, dass es auch mehrere unterscheidbare extremale Pfade geben kann. Es findet dann eine Aufsummation der einzelnen extremalen Pfade und deren Fluktuationen statt, wobei es bei topologisch nicht unterscheidbaren Pfaden zu einem Phasenfaktor kommen kann, was hier jedoch nicht weiter verfolgt werden soll [9, 10, 14].

Zusammenfassend bildet der Propagator also das entscheidende Mittel zur Beschreibung der Zeitentwicklung des quantenmechanischen Systems. Der Propagator wird dabei durch ein Funktionalintegral oder Pfadintegral definiert, dessen Gewicht durch die klassische Wirkung gegeben ist, während bei der Beschreibung im Schrödingerbild die Zeitentwicklung durch einen Differenzialoperator - den Hamiltonoperator - gegeben wird. Besonders elegant ist die formal gleiche Behandlung von Real- und Imaginärzeitpropagation und den jeweiligen Erwartungswerten.

1.4.2 Erwartungswerte

Erwartungswerte besitzen in der Pfadintegraldarstellung eine formal einfache Darstellung

$$\int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} \mathcal{D}x F[\{x(t_i)\}] e^{iS[x]/\hbar} = \langle x'', t'' | \hat{T} F[\{x(t_i)\}] | x', t' \rangle, \quad t'' \geq \{t_i\} \geq t', \quad (1.169)$$

welche ganz analog zur Bildung von Erwartungswerten mit einem Gewicht $P(x)$ der Form

$$\langle f(x) \rangle = \int dx f(x) P(x) \quad (1.170)$$

geschieht, hier allerdings mit einem Wahrscheinlichkeitsgewicht $\exp[iS[x]/\hbar]$ in Form einer komplexen Phase. Die Zustandsvektoren $|x, t\rangle$ in Gleichung (1.169) entsprechen hier Eigenzuständen zum Ortsoperator $x_H(t)$ in der Heisenberg-Darstellung zum zeitunabhängigen Eigenwert x und sind somit zeitabhängig mit dem funktionellen Zusammenhang

$$x_H(t) = U^\dagger(t) x U(t), \quad |x, t\rangle = U^\dagger(t) |x\rangle, \quad x_H(t) |x, t\rangle = x |x, t\rangle. \quad (1.171)$$

Eine Besonderheit an der Darstellung (1.169) liegt darin, dass die Erwartungswerte auf der rechten Seite zeitgeordnet vorliegen, obwohl sie auf der linken Seite als Funktionen scheinbar kommutieren [12, 20]. Um dies zu verdeutlichen, betrachten wir den N -Punkt Erwartungswert der Ortskoordinate x zu festen Zeiten t_i mit $t'' \geq t_N \geq \dots \geq t_1 \geq t'$,

$$\int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} \mathcal{D}x x(t_1) \cdots x(t_N) e^{iS[x]/\hbar}, \quad (1.172)$$

$$S[x] = \int_{t'}^{t''} dt L(x) = \int_{t'}^{t_1} dt L + \int_{t_1}^{t_2} dt L + \dots + \int_{t_N}^{t''} dt L. \quad (1.173)$$

Durch Einfügen der Eins-Darstellungen

$$\prod_{i=1}^N \int dx_i \delta(x(t_i) - x_i) \quad (1.174)$$

fixieren wir den Wert der Funktion $x(t)$ zu den Zeiten t_i . Weiterhin spalten wir die Pfadintegration auf,

$$\int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} \mathcal{D}x \rightarrow \int_{x(t')=x'}^{x(t_1)} dx(t_1) \cdots dx(t_N) \int_{x(t')=x'}^{x(t_1)} \mathcal{D}x \cdots \int_{x(t_N)}^{x(t'')=x''} \mathcal{D}x . \quad (1.175)$$

Dadurch faktorisiert das Pfadintegral des obigen Erwartungswertes folgendermaßen,

$$\begin{aligned} & \int dx_1 \cdots dx_N x_1 \cdots x_N \langle x'' | U(t'', t_N) | x_N \rangle \cdots \langle x_2 | U(t_2, t_1) | x_1 \rangle \langle x_1 | U(t_1, t') | x' \rangle \\ & = \langle x'', t'' | \hat{x}(t_N) \cdots \hat{x}(t_1) | x', t' \rangle, \quad t_N \geq \dots \geq t_1 \end{aligned} \quad (1.176)$$

wobei wir in der zweiten Zeile die Variablen x_i als Eigenwerte des Operators \hat{x} in der Basis $|x_i\rangle$ dargestellt haben, also beispielsweise

$$\int dx_1 |x_1\rangle x_1 \langle x_1| = \int dx_1 \hat{x}(t_1) |x_1\rangle \langle x_1|. \quad (1.177)$$

Für die Zweipunktkorrelationsfunktion gilt daher beispielsweise

$$\langle \hat{T} x(t_1) x(t_2) \rangle = \begin{cases} t_2 \leq t_1 : \langle x(t_1) x(t_2) \rangle \\ t_1 \leq t_2 : \langle x(t_2) x(t_1) \rangle \end{cases} . \quad (1.178)$$

Zeitgeordnete Erwartungswerte bilden daher immer symmetrische Funktionen in ihren Zeitargumenten, also

$$f(t_1, t_2, \dots, t_N) = \langle \hat{T} x(t_1) \cdots x(t_N) \rangle, \quad (1.179)$$

$$f(t_{P_1}, \dots, t_{P_N}) = f(t_1, t_2, \dots, t_N), \quad (1.180)$$

wobei t_{P_1} bis t_{P_N} irgendeine Permutation der Zeiten t_1 bis t_N darstellt.

Gleichung (1.176) beschreibt den konditionierten und zeitgeordneten Erwartungswert für $x(t_N) \cdots x(t_1)$ unter der Voraussetzung, dass das System zur Zeit t' im Zustand x' und zur Zeit t'' im Zustand x'' befinde. In der Literatur werden die Randbedingungen der zu integrierenden Pfade $x(t') = x'$ und $x(t'') = x''$ oftmals ignoriert oder aber die Bezeichnung

$$\langle \hat{x}(t_N) \cdots \hat{x}(t_1) \rangle, \quad (1.181)$$

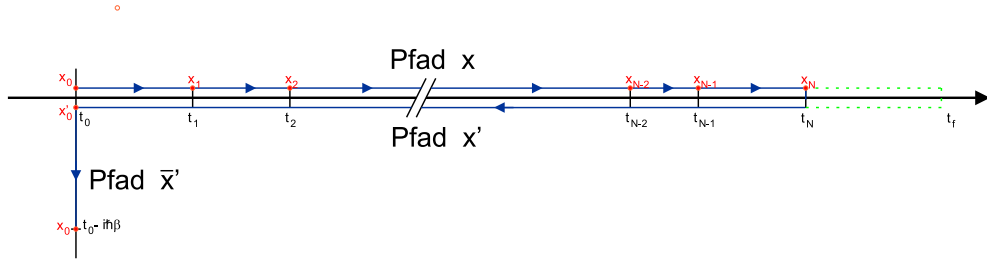


Abbildung 1.3: Dem thermischen Erwartungswert (1.184) entspricht die obige Propagation in der komplexen Zeitebene. Der Hin- und Rückpfad wurde etwas von der reellen Achse verschoben, was physikalisch jedoch keine Bedeutung hat. Die Zeit t_0 kann beliebig gewählt werden. Ebenso kann die Propagation nach t_N beliebig verlängert werden, was dem Einfügen einer Eins entspricht. Dadurch kann der Pfad auf die gesamte reelle Achse erweitert werden. Die Propagation von t_0 nach $t_0 - i\hbar\beta$ entspricht einem Imaginärzeit-Propagator. Über den gemeinsamen Start- und Zielpunkt x wie über alle Zwischenpunkte x_i wird integriert. Der Konturordnungsoperator \hat{T}_P ordnet die Operatoren x, x' und \bar{x} entlang der Kontur.

steht für ganz bestimmte Zustandsvektoren, wie beispielsweise den Vakuumzustand $|\Omega\rangle$, welcher für den Zustand des Systems mit der niedrigsten Energie steht.

In dieser Arbeit betrachten wir ausschließlich sogenannte thermische Erwartungswerte; diese besitzen im Operatorformalismus die Darstellung

$$\langle \hat{T}x(t_N) \cdots x(t_1) \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \text{tr} \left[e^{-\beta H} \hat{T}x(t_N) \cdots x(t_1) \right], \quad (1.182)$$

und führen im Pfadintegralformalismus analog zu Gleichung (1.168) auf periodische Randbedingungen, wobei der Realzeitfall aus dem einfacheren Imaginärzeitfall durch analytische Fortsetzung nur der Zeitargumente der Operatoren $x(t_i)$ hervorgeht und so zu einer Kontur in der komplexen Zeitebene führt [21].

Vakuumerwartungswerte erhalten wir mit der obigen Darstellung (1.182) einfach durch den Grenzfall $\beta \rightarrow \infty$, da das Boltzmann-Gewicht in diesem Grenzfall alle Energien größer der Grundzustandsenergie exponentiell mit dem Faktor $\exp[-\beta(E - E_0)]$ unterdrückt,

$$\langle \Omega | \hat{T}x(t_N) \cdots x(t_1) | \Omega \rangle = \lim_{\substack{\beta \rightarrow \infty \\ (T \rightarrow 0)}} \frac{1}{Z} \text{tr} \left[e^{-\beta H} \hat{T}x(t_N) \cdots x(t_1) \right]. \quad (1.183)$$

Die thermischen Erwartungswerte (1.182) werden wir nun mithilfe von Pfadintegralen schreiben indem wir die enthaltenen Zeitentwicklungsoperatoren durch Propagatoren ersetzen,

$$\langle \hat{T}x(t_N) \cdots x(t_1) \rangle_\beta \quad (1.184)$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 dx'_0 \cdots dx_N \langle x_0 | e^{-\beta H} | x'_0 \rangle \langle x'_0 | U^\dagger(t_N - t_0) | x_N \rangle \\
 &\quad \times x_N \langle x_N | \cdots x_2 \langle x_2 | U(t_2 - t_1) | x_1 \rangle x_1 \langle x_1 | U(t_1 - t_0) | x_0 \rangle, \quad (1.185)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 dx'_0 dx_N \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t_N)=x_N} \mathcal{D}x x(t_1) \cdots x(t_N) e^{iS[x]/\hbar} \\
 &\quad \times \int_{x'(t_0)=x'_0}^{x'(t_N)=x_N} \mathcal{D}x' e^{-iS[x']/\hbar} \int_{\bar{x}(t_0)=x'_0}^{\bar{x}(t_1-i\hbar\beta)=x_0} \mathcal{D}\bar{x} e^{-S^{(E)}[\bar{x}]/\hbar}. \quad (1.186)
 \end{aligned}$$

In der komplexen Zeitebene entspricht der propagierte Pfad aus Gleichung (1.184)-(1.186) dem in Abbildung 1.3 gezeigten Verlauf.

Im Hinblick auf die folgende Beschreibung der Realzeitentwicklung der reduzierten Dichtematrix in Abschnitt 1.4.15 erweitern wir nun die Relation (1.184), indem wir nun nicht nur auf dem Pfad x , sondern auch auf dem Rückpfad x' Korrelationen zulassen und damit eine symmetrische Darstellung erhalten,

$$\langle \hat{T}_P x'(t_N) \cdots x'(t_{l+1}) x(t_l) \cdots x(t_1) \rangle_\beta \quad (1.187)$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 dx'_0 dx_f \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}x x(t_1) \cdots x(t_l) e^{iS[x]/\hbar} \\
 &\quad \times \int_{x'(t_0)=x'_0}^{x'(t_f)=x_f} \mathcal{D}x' x'(t_{l+1}) \cdots x'(t_N) e^{-iS[x']/\hbar} \int_{\bar{x}(t_0)=x'_0}^{\bar{x}(t_1-i\hbar\beta)=x_0} \mathcal{D}\bar{x} e^{-S^{(E)}[\bar{x}]/\hbar}. \quad (1.188)
 \end{aligned}$$

Der Zeitpunkt $t_f \geq t_i$, $i \in 0, \dots, N$ kann dabei wie in Abbildung 1.3 zu sehen, beliebig gelegt werden. Der Konturordnungsoperator \hat{T}_P ordnet nun entlang der Kontur in Abbildung 1.3. Wir können nun ein generierendes Funktional für thermische Erwartungswerte der Form (1.187) bilden. Dazu betrachten wir das Funktional

$$\begin{aligned}
 Z_\beta[b, b'] &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 dx'_0 dx_f \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}x e^{iS[x]/\hbar} e^{i \int dt b(t)x(t)} \\
 &\quad \times \int_{x'(t_0)=x'_0}^{x'(t_f)=x_f} \mathcal{D}x' e^{-iS[x']/\hbar} e^{-i \int dt b'(t)x'(t)} \int_{\bar{x}(t_0)=x'_0}^{\bar{x}(t_1-i\hbar\beta)=x_0} \mathcal{D}\bar{x} e^{-S^{(E)}[\bar{x}]/\hbar}. \quad (1.189)
 \end{aligned}$$

Eine Funktionalableitung von $Z[b, b']$ nach $b(t_k)$ erzeugt einen Faktor $ix(t_k)$. Analog produziert die Funktionalableitung von $Z[b, b']$ nach $b'(t_k)$ einen Faktor $-ix'(t_k)$. Mit dieser Definition erhalten wir einen thermischen Erwartungswert der Gestalt (1.187) durch

$$\langle \hat{T}_P x'(t_N) x'(t_{l+1}) x(t_l) \cdots x(t_1) \rangle_\beta = \frac{1}{Z[b, b']} \left(\frac{-i\delta}{\delta b'(t_N)} \cdots \frac{-i\delta}{\delta b'(t_{l+1})} \frac{i\delta}{\delta b(t_l)} \cdots \frac{i\delta}{\delta b(t_1)} \right) Z[b, b'] \Big|_{b, b'=0}. \quad (1.190)$$

Wie wir in Abschnitt 1.4.15 sehen werden, entspricht die Form des sogenannten Influenzfunktional $\mathcal{F}_{FV}[q, q']$ aus Gleichung (1.564) gerade der soeben gefundenen generierenden Funktion $Z[b, b']$ mit dem Unterschied, dass der hier künstlich eingeführte lineare Kopplungsterm $x(t)b(t)$ im Exponenten einer realen bilinearen Kopplung des Bades an die Systemkoordinate entspricht.

Wie wir in den folgenden Abschnitten sehen werden, kann für die Wirkung eines harmonischen Oszillators die Pfadintegration in Gleichung (1.189) ausgeführt werden. Im Folgenden werden wir jedoch mit den schon bekannten algebraischen Methoden der Quantenmechanik einen thermischen Erwartungswert eines harmonischen Oszillators berechnen.

1.4.3 Thermische Erwartungswerte des harmonischen Oszillators

In diesem Abschnitt wollen wir die thermischen Erwartungswerte und Korrelationsfunktionen zum Vergleich mit der Pfadintegralmethode mithilfe der bekannten Operator-Algebra Methoden des harmonischen Oszillators ableiten. Der Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (1.191)$$

nimmt ausgedrückt durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$a^\dagger = \frac{m\omega x - ip}{\sqrt{2m\omega\hbar}}, \quad a = \frac{m\omega x + ip}{\sqrt{2m\omega\hbar}}, \quad (1.192)$$

mit dem Kommutator $[a, a^\dagger] = (i/\hbar) [p, x] = 1$ die einfache Form

$$H = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = a^\dagger a, \quad (1.193)$$

an. Normierte Energieeigenzustände werden durch die Operatoren a^\dagger mit

$$|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (a^\dagger)^N |0\rangle, \quad n|N\rangle = N|N\rangle, \quad (1.194)$$

gebildet, wobei $|0\rangle$ dem Grundzustand entspricht. Der Operator n ist somit der Besetzungszahloperator. Die Wirkung des Erzeugungs-/Vernichtungsoperators auf $|N\rangle$ wird durch die Relation

$$a^\dagger |N\rangle = \sqrt{N+1} |N+1\rangle, \quad (1.195)$$

$$a |N\rangle = \sqrt{N} |N-1\rangle, \quad (1.196)$$

beschrieben. Damit lässt sich die quantenmechanische Lösung des harmonischen Oszillators auf ein algebraisches Problem reduzieren. Die Zeitentwicklung im Heisenbergbild nimmt die Form

$$a^\dagger(t) = e^{iHt/\hbar} a^\dagger e^{-iHt/\hbar} = a^\dagger e^{i\omega t}, \quad (1.197)$$

$$a(t) = e^{iHt/\hbar} a e^{-iHt/\hbar} = a e^{-i\omega t}, \quad (1.198)$$

an; dies geht analog aus den Heisenbergschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{a}(t) = \frac{i}{\hbar} [H, a] = -i\omega a, \quad (1.199)$$

$$\dot{a}^\dagger(t) = \frac{i}{\hbar} [H, a^\dagger] = i\omega a^\dagger, \quad (1.200)$$

hervor. Damit bekommen wir die Form der Operatoren $p(t)$ und $x(t)$ in der Heisenberg-Darstellung

$$p(t) = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a e^{-i\omega t} - a^\dagger e^{i\omega t}), \quad (1.201)$$

$$x(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t}). \quad (1.202)$$

Thermische Erwartungswerte definieren wir mithilfe des Boltzmann Gewichtes $e^{-\beta H}$ über

$$\langle f \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr}[e^{-\beta H} f], \quad Z = \text{tr}[e^{-\beta H}] = \frac{1}{2 \sinh[\omega\hbar\beta/2]}. \quad (1.203)$$

Als Erwartungswert des Besetzungszahloperators erhalten wir die Boseverteilung bei der Temperatur $T = 1/\beta$ zu

$$\langle a^\dagger a \rangle = \langle n \rangle = \frac{1}{e^{\omega\hbar\beta} - 1} = \frac{\coth[\omega\hbar\beta/2] - 1}{2}, \quad (1.204)$$

$$\langle a a^\dagger \rangle = \langle n \rangle + 1 = \frac{1}{1 - e^{-\omega\hbar\beta}} = \frac{\coth[\omega\hbar\beta/2] + 1}{2}, \quad (1.205)$$

mit der weiter unten benötigten Relation

$$\langle n \rangle e^{\beta\hbar\omega} = \langle n \rangle + 1. \quad (1.206)$$

Erwartungswerte über p oder x bzw. aus einer Linearkombination von a und a^\dagger verschwinden wegen Gleichung (1.195) und (1.196).

Wir definieren nun die beiden wichtigen thermischen, bosonischen Erwartungswerte $\kappa^+(t)$, welche noch nicht zeitgeordnet sind, über

$$\begin{aligned}\kappa^+(t) &= \langle x(t)x(0) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[(\langle n \rangle + 1) e^{-i\omega t} + \langle n \rangle e^{i\omega t} \right], \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{\cosh[\omega(\hbar\beta/2 - it)]}{\sinh[\omega\hbar\beta/2]}, \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos(\omega t) - i \sin(\omega t) \right].\end{aligned}\quad (1.207)$$

Somit entspricht $\kappa^+(t)$ dem thermischen Erwartungswert

$$\kappa^+(t) = \langle \hat{T}_p x'(t)x(0) \rangle_\beta \quad (1.208)$$

laut der weiter oben gefundenen Definition (1.187). Analog finden wir $\kappa^-(t)$ über

$$\begin{aligned}\kappa^-(t) &= \langle x(0)x(t) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[(\langle n \rangle + 1) e^{i\omega t} + \langle n \rangle e^{-i\omega t} \right], \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{\cosh[\omega(\hbar\beta/2 + it)]}{\sinh[\omega\hbar\beta/2]}, \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos(\omega t) + i \sin(\omega t) \right].\end{aligned}\quad (1.209)$$

Diese Relation entspricht somit dem thermischen Erwartungswert

$$\kappa^-(t) = \langle \hat{T}_p x'(0)x(t) \rangle_\beta. \quad (1.210)$$

mit dem funktionellen Zusammenhang

$$\kappa^+(-t) = (\kappa^+(t))^* = \kappa^-(t) = \kappa^+(t - i\hbar\beta). \quad (1.211)$$

Diese Relation lässt sich auch folgendermaßen schreiben

$$\langle x(0)x(t) \rangle = \langle x(t - i\hbar\beta)x(0) \rangle \quad (1.212)$$

und ist in der Literatur in dieser Form unter dem Namen KMS-Bedingung (Kubo, Martin, Schwinger) bekannt und folgt zwingend aus der Definition thermischer Erwartungswerte (1.203) wegen der Invarianz der Spur unter zyklischer Vertauschung.

Für den zeitgeordneten thermischen Erwartungswert, welcher dem Erwartungswert aus dem Pfadintegralformalismus entspricht, definieren wir $\kappa(t)$ mit

$$\kappa(t) = \langle \hat{T} x(t)x(0) \rangle = \Theta(t) \kappa^+(t) + \Theta(-t) \kappa^-(t), \quad (1.213)$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos(\omega t) - i \sin(\omega|t|) \right], \quad (1.214)$$

$$= \langle \hat{T}_P x(t)x(0) \rangle. \quad (1.215)$$

Für die vierte Kombination $\langle \hat{T}_P x'(t)x'(0) \rangle$ eines Pfadgeordneten Zweipunkt-Erwartungswertes finden wir

$$\kappa^*(t) = \langle \hat{T}_P x'(t)x'(0) \rangle = \Theta(t) \kappa^-(t) + \Theta(-t) \kappa^+(t), \quad (1.216)$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos(\omega t) + i \sin(\omega|t|) \right], \quad (1.217)$$

$$= \langle \hat{T}_P x(t)x(0) \rangle. \quad (1.218)$$

was auf dem x -Pfad einer Anti-Zeitordnung

$$\langle \hat{T}^\dagger x(t)x(0) \rangle \quad (1.219)$$

entspricht. Weiterhin definieren wir noch die retardierte Funktion $\kappa^R(t)$

$$\kappa^R(t) = \Theta(t) \left(\kappa^+(t) - \kappa^-(t) \right) = \Theta(t) \langle [x(t), x(0)] \rangle, \quad (1.220)$$

$$= -\Theta(t) \frac{\hbar}{m\omega} i \sin(\omega t) = 2 \Theta(t) \text{Im}[\kappa^+(t)]. \quad (1.221)$$

und die avancierte Funktion $\kappa^A(t)$

$$\kappa^A(t) = \Theta(-t) \left(\kappa^-(t) - \kappa^+(t) \right) = \Theta(t) \langle [x(0), x(t)] \rangle. \quad (1.222)$$

$$= \Theta(-t) \frac{\hbar}{m\omega} i \sin(\omega t) = 2 \Theta(-t) \text{Im}[\kappa^-(t)]. \quad (1.223)$$

Im nächsten Abschnitt werden wir sehen, dass $(i/\hbar)\kappa^R(t)$ der Suszeptibilität $\chi(t)$, also der linearen Antwortfunktion auf eine Störung, entspricht.

Für die Fouriertransformierte der obigen Funktionen erhalten wir mit Hilfe der Distributionsdarstellung (1.73), (1.74)

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa}^+(\omega') &= \int dt e^{-i\omega't} \kappa^+(t), \\ &= \frac{\pi\hbar}{m\omega} \left[\delta(\omega' + \omega) \left(1 + \langle n \rangle \right) + \delta(\omega' - \omega) \langle n \rangle \right], \end{aligned} \quad (1.224)$$

$$\tilde{\kappa}^-(\omega') = \frac{\pi\hbar}{m\omega} \left[\delta(\omega' - \omega) \left(1 + \langle n \rangle \right) + \delta(\omega' + \omega) \langle n \rangle \right], \quad (1.225)$$

$$\tilde{\kappa}(\omega') = \frac{\pi\hbar}{m\omega} \left[\left\{ \delta(\omega' - \omega) + \delta(\omega' + \omega) \right\} \langle n \rangle + \delta_+(\omega' + \omega) + \delta_-(\omega' - \omega) \right], \quad (1.226)$$

$$\tilde{\kappa}^{\text{R}}(\omega') = \frac{\pi\hbar}{m\omega} \left[\delta_+(\omega' + \omega) + \delta_-(\omega' - \omega) \right], \quad (1.227)$$

$$\tilde{\kappa}^{\text{A}}(\omega') = \frac{-\pi\hbar}{m\omega} \left[\delta_-(\omega' + \omega) + \delta_+(\omega' - \omega) \right]. \quad (1.228)$$

Unter Verwendung der Relation (1.206) finden wir den wichtigen und allgemein gültigen Zusammenhang [22]

$$\kappa^\pm(\omega') = \kappa^\mp(-\omega'), \quad (1.229)$$

$$\kappa^\pm(\omega') = e^{\pm\omega'\hbar\beta} \kappa^\mp(\omega'). \quad (1.230)$$

Die zweite Gleichung entspricht der Bedingung für detaillierte Bilanz. Für die Korrelationsfunktion der Badkoordinate $X = \sum_\alpha c_\alpha x_\alpha$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} X(t) X(0) \rangle &= \sum_\alpha \frac{\hbar c_\alpha^2}{2m_\alpha \omega_\alpha} \left[\coth\left(\frac{\omega_\alpha \hbar \beta}{2}\right) \cos(\omega_\alpha t) - i \sin(\omega_\alpha |t|) \right], \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left[\coth\left(\frac{\omega \hbar \beta}{2}\right) \cos(\omega t) - i \sin(\omega |t|) \right], \\ &= \hbar K(t) = \sum_\alpha c_\alpha^2 \langle \hat{T} x_\alpha(t) x_\alpha(0) \rangle. \end{aligned} \quad (1.231)$$

Der Vollständigkeit halber führen wir auch die nicht zeitgeordneten Erwartungswerte der effektiven Badkoordinate entsprechend $\kappa^\pm(t)$ auf, wobei die Notation $L(t)$ in der Literatur standardmäßig Verwendung findet und wir auch weiter unten im Text häufig davon Gebrauch machen [1],

$$\langle X(t) X(0) \rangle = \hbar L(t) = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left[\coth\left(\frac{\omega \hbar \beta}{2}\right) \cos(\omega t) - i \sin(\omega t) \right], \quad (1.232)$$

$$\langle X(0) X(t) \rangle = \hbar L^*(t) = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left[\coth\left(\frac{\omega \hbar \beta}{2}\right) \cos(\omega t) + i \sin(\omega t) \right]. \quad (1.233)$$

Gleichung (1.231) lässt sich wegen dem Zusammenhang $L(|t|) = K(t)$ ebenfalls einfach durch die Badkorrelationsfunktion L ausdrücken,

$$\langle \hat{T} X(t) X(0) \rangle = \hbar L(|t|). \quad (1.234)$$

Analog zum klassischen Fall (1.63) finden wir für das Rauschspektrum $K(\omega)$ der stochastischen Badkoordinate $X(t)$

$$\hbar K(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \hat{T} X(t) X(0) \rangle e^{-i\omega t} \quad (1.235)$$

$$= \hbar J(|\omega|) \coth \left[\frac{|\omega| \hbar \beta}{2} \right] - i \frac{\hbar}{\pi} \hat{P} \int_0^{\infty} d\omega' \left[\frac{J(\omega')}{\omega + \omega'} - \frac{J(\omega')}{\omega - \omega'} \right]. \quad (1.236)$$

Im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ finden wir das klassische Resultat (1.63),

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar K(\omega) = \frac{2}{\beta} \frac{J(|\omega|)}{|\omega|}. \quad (1.237)$$

Ebenso erhalten wir für $\hbar K(t)$ im Limes $\hbar \rightarrow 0$ das schon bekannte klassische Ergebnis (1.89),

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar K(t) = \frac{2}{\pi \beta} \int_0^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega t) = \frac{M}{\beta} \gamma(|t|). \quad (1.238)$$

Für eine spektrale Dichte $J(\omega) = M\gamma\omega^s \exp[-\omega\tau_c]$ nimmt die Badkorrelationsfunktion (1.231) die Form⁹

$$\hbar K(t) = \frac{2M\gamma}{\pi} \frac{\Gamma[1+s]}{(\hbar\beta)^{1+s}} \left[\zeta \left(1+s, 1 + \frac{\tau_c - it}{\hbar\beta} \right) + \zeta \left(1+s, \frac{\tau_c + it}{\hbar\beta} \right) \right]. \quad (1.239)$$

an, was einer analytischen Fortsetzung des Imaginärzeit-Ergebnisses aus Gleichung (1.478) entspricht. Im strengen ohmschen Grenzfall $J(\omega) = M\gamma\omega$ erhalten wir aus der Eigenschaft der verallgemeinerten Riemannschen Zeta-Funktion [51, 52]

$$\zeta(2, z) = \Psi'(z) = \frac{d^2}{dz^2} \ln \Gamma[z], \quad (1.240)$$

und der Spiegelungsrelation der Dilogarithmus-Funktion

$$\Psi'(1+z) + \Psi'(-z) = \frac{\pi^2}{\sin^2[\pi z]}, \quad (1.241)$$

die Darstellung

$$\hbar K(t) = \frac{2\pi M\gamma}{(\hbar\beta)^2} \frac{1}{\sin^2 \left[\frac{\pi t}{\hbar\beta} \right]}, \quad (1.242)$$

⁹ Details zur Integration werden in Abschnitt 2.2.3 gegeben.

was dem Resultat (1.480) in Imaginärzeit entspricht. Im Gegensatz zum klassischen Resultat führt auch eine streng ohmsche spektrale Dichte $J(\omega) = M\gamma\omega$ nicht zu einer Delta-korrelierten Badkorrelationsfunktion, welche im klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ aus der obigen Gleichung (1.238) reproduziert wird,

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar K(t) = \frac{2M\gamma}{\beta} \delta(t). \quad (1.243)$$

Im quantenmechanischen Fall ($\hbar \neq 0$) finden wir immer eine nichtlokale Badkorrelationsfunktion $\hbar K(t)$. Es gibt keine Form der spektralen Dichte $J(\omega)$, welche $\hbar K(t) \propto \delta(t)$ liefern würde. Dies sieht man direkt aus der Darstellung (1.231). Eine spektrale Dichte in der Form $J(\omega) = 2M\gamma/(\hbar\beta) \tanh[\omega\hbar\beta/2]$, welche im klassischen Grenzfall die strikt ohmsche Form $M\gamma\omega$ annimmt, liefert uns für die Badkorrelationsfunktion

$$\hbar K(t) = \frac{2M\gamma}{\beta} \left\{ \delta(t) - i \left(\hbar\beta \sinh \left[\frac{\pi|t|}{\hbar\beta} \right] \right)^{-1} \right\}, \quad (1.244)$$

wobei wir den Imaginäranteil zur Berechnung als Distribution in der Form

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty d\omega \tanh[\omega\hbar\beta/2] \sin[\omega|t|] e^{-\epsilon\omega} = \pi \left(\hbar\beta \sinh \left[\frac{\pi|t|}{\hbar\beta} \right] \right)^{-1} \quad (1.245)$$

regularisiert haben, wobei dazu $t \neq 0$, $\hbar\beta > 0$ gelten muss. Erst im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ verschwindet dieser Term für beliebiges $\epsilon \geq 0$, wie man direkt an Gleichung (1.244) erkennt und in Übereinstimmung mit den vorhergehenden Überlegungen.

Für die Zweipunkt-Korrelationsfunktion der Fourierkoeffizienten $\tilde{X}(\omega) = \int_{-\infty}^\infty dt e^{-i\omega t} X(t)$ der effektiven Badkoordinate erhalten wir in analoger Vorgehensweise zum klassischen Fall (1.106) das quantenmechanische Resultat

$$\langle \tilde{X}(\omega) \tilde{X}^*(\omega') \rangle = \int_{-\infty}^\infty dt dt' e^{-i\omega t} e^{i\omega' t'} \hbar K(t - t'), \quad (1.246)$$

$$= 2\pi\delta(\omega - \omega') K(\omega). \quad (1.247)$$

Mithilfe Gleichung (1.204) finden wir für den Energie-Erwartungswert eines Oszillators, welcher im klassischen Hochtemperaturlimes gegen den mittleren Wert $k_B T$ strebt,

$$\langle E(\omega) \rangle = \hbar\omega \left(\langle n \rangle + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \coth \left[\frac{\omega\hbar\beta}{2} \right] \stackrel{\hbar\beta \rightarrow 0}{=} \frac{1}{\beta}. \quad (1.248)$$

Der häufig auftretende Faktor

$$\coth \left[\frac{\omega\hbar\beta}{2} \right] = \coth \left[\frac{E_0(\omega)}{k_B T} \right] = \frac{\langle E(\omega) \rangle}{E_0(\omega)} \quad (1.249)$$

entspricht daher den Verhältnis des thermischen Erwartungswertes der Energie zu seiner Ruheenergie $E_0 = \hbar\omega/2$. Das Argument $\omega\hbar\beta/2$ repräsentiert das Energieverhältnis $E_0/(k_B T)$. Abbildung 1.4 zeigt das bekannte Verhalten der normierten Funktion $\langle E(\omega) \rangle$ über der normierten Temperatur T .

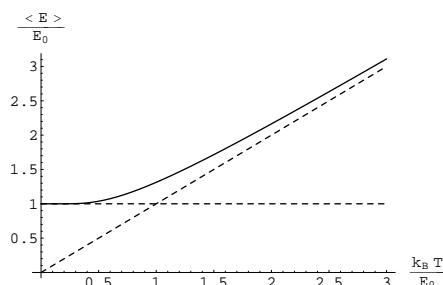


Abbildung 1.4: Der Plot zeigt den Energieerwartungswert $\langle E(\omega) \rangle$ eines Oszillators als Funktion der Temperatur T , jeweils normiert auf die Nullpunktsenergie $E_0 = \hbar\omega/2$. Die gestrichelten Linien zeigen das asymptotische Verhalten.

1.4.4 Lineare Antwort und dynamische Suszeptibilität

Im Folgenden betrachten wir die Auswirkung einer linearen Störung auf die Zeitentwicklung im Vergleich mit dem ungestörten System. Da wir zeitabhängige Operatoren im Schrödinger-, Heisenberg- und Wechselwirkungsbild betrachten, verwenden wir in diesem Abschnitt konsequent die Indizes H und I für die letzteren beiden Fälle. Der Hamiltonian habe dabei die Form

$$H(t) = H_0 + V(t), \quad (1.250)$$

$$V(t) = \Theta(t - t_0) f(t) Q. \quad (1.251)$$

Es sei H_0 der Hamiltonoperator des ungestörten Systems, während $V(t)$ eine lineare Störung darstellt, welche zur Zeit t_0 an das System gekoppelt wird; $f(t)$ ist dabei eine skalare Funktion der Zeit, während Q den hermiteschen Kopplungsoperator beschreibt. Den Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ des Gesamtsystems können wir mithilfe des Zeitentwicklungsoperators im Wechselwirkungsbild $U_I(t, t_0)$ formal exakt darstellen,

$$U(t, t_0) = \hat{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds H(s) \right], \quad (1.252)$$

$$= U_0(t, t_0) U_I(t, t_0). \quad (1.253)$$

Die Zeitentwicklung des ungestörten Systems wird durch den Propagator

$$U_0(t, t_0) = \hat{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds H_0(s) \right] = e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}, \quad (1.254)$$

beschrieben, wobei die Darstellung rechts verwendet werden kann, sofern H_0 nicht explizit von der Zeit abhängt. Für den Propagator im Wechselwirkungsbild finden wir

$$U_I(t, t_0) = \hat{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds V_I(s) \right], \quad (1.255)$$

wobei wir die Darstellung $V_I(t)$ des Störoperators im Wechselwirkungsbild,

$$V_I(t) = U_0^\dagger(t, t_0) V(t) U_0(t, t_0). \quad (1.256)$$

verwendet haben. Die Störung $V(t)$ liegt dabei im Schrödingerbild vor und ist explizit zeitabhängig. Die Darstellung (1.253) besitzt gegenüber der Darstellung (1.252) den Vorteil, dass die Zeitentwicklung des ungestörten Problems absepariert wurde. Unter der Annahme, dass die Störung klein sei, können wir $U_I(t, t_0)$ in erster Ordnung entwickeln,

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds V_I(s), \quad (1.257)$$

und erhalten daraus für den gestörten Operator $A(t)$ im Heisenberg Bild,

$$\begin{aligned} A_H(t) &= U^\dagger(t, t_0) A U(t, t_0), \quad (1.258) \\ &= A_I(t) + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t ds \Theta(s - t_0) f(s) [A_I(t), Q_I(s)] + \mathcal{O}(f^2). \end{aligned}$$

Der Ausdruck $A_I(t)$ entspricht nach der Definition (1.256) dem Operator des ungestörten Problems im Heisenbergbild. Analog entspricht der Kommutator $[A_I(t), Q_I(s)]$ dem Kommutator im ungestörten Problem.

Im weiteren interessieren wir uns für die im vorhergehenden Abschnitt eingeführten thermische Erwartungswerte eines Operators im Heisenbergbild. Der Boltzmann-Faktor $\exp[-\beta H_0]$ soll dabei durch das ungestörte System gegeben sein.

Wir definieren nun die dynamische Suszeptibilität $\chi(t)$ durch

$$\chi(t - s) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t - s) \langle [A_I(t), Q_I(s)] \rangle. \quad (1.259)$$

Durch das Einfügen der Theta-Funktion können wir nun die lineare Antwort auf die Störung mit $t_0 \rightarrow -\infty$ allgemein ausdrücken,

$$\delta \langle A_H(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} ds \Theta(s - t_0) f(s) \chi(t - s). \quad (1.260)$$

Wir betrachten nun einen harmonischen Oszillator mit $H_0 = p^2/(2m) + m\omega^2 x^2/2$ mit einer linearen Störung der Form $V(t) = cq(t)x(t)$. Als Antwortfunktion für die Koordinate x finden wir

$$\chi(t-s) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t-s) \langle [x_I(t), x_I(s)] \rangle, \quad (1.261)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \kappa^R(t-s), \quad (1.262)$$

wobei wir $\kappa^R(t-s)$ für den harmonischen Oszillator im vorangegangenen Abschnitt, Gleichung (1.220) bestimmt haben. Die Oszillatorkoordinate reagiert daher auf die Störung mit

$$\delta \langle x_H(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} ds cq(s) \Theta(t-s) \frac{\sin[\omega(t-s)]}{m\omega}. \quad (1.263)$$

Für die effektive Badkoordinate $X(t) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha}(t)$ finden wir daher

$$\delta \langle X_H(t) \rangle = \int_{t_0}^t ds q(s) \frac{1}{\pi} \int d\omega J(\omega) 2 \Theta(t-s) \sin[\omega(t-s)], \quad (1.264)$$

$$= \int_{t_0}^t ds q(s) 2 \Theta(t-s) L''(t-s). \quad (1.265)$$

wobei $L''(t)$ den Imaginärteil von $L(t)$ aus Gleichung (1.232) bezeichnet. Der Ausdruck $\chi = 2 \Theta(t-s) L''(t-s)$ für die effektive Suszeptibilität der Badkoordinate wird uns später noch häufig begegnen. Ein Vergleich mit der Greenfunktion aus Gleichung (1.25) zeigt, dass im Falle des harmonischen Oszillators die Suszeptibilität identisch mit der Greenfunktion ist. Dies wiederum bedeutet, dass die lineare Antwort in diesem Falle keine Näherung ist, sondern ein exaktes Resultat liefert. Bei Systemen, deren Potenzial $V(q)$ maximal quadratisch in q ist, gilt dies immer.

Der Realteil $L'(t)$ hingegen kann als quantenmechanische Verallgemeinerung des Dämpfungskernes $\gamma(t)$ aufgefaßt werden, wie in Gleichung (1.238) im klassischen Limes gezeigt wird. Diesem Zusammenhang zwischen einer Dämpfungsgröße und einer dynamischen Größe bezeichnet man allgemein als Fluktuations-Dissipations-Theorem (FDT). Allgemein gilt, da $\chi(t)$ bzw. $\kappa^+(t)$ und $\kappa^-(-t)$ Kausalität erfüllt, für die Fourier-Transformierten die Kramers-Kronig-Relationen, also im Falle von $\chi(t)$ beispielsweise

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{\pi} \hat{P} \int d\omega' \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega}, \quad (1.266)$$

$$\chi''(\omega) = -\frac{1}{\pi} \hat{P} \int d\omega' \frac{\chi'(\omega')}{\omega' - \omega}. \quad (1.267)$$

Mit $\chi'(\omega)$ bzw. $\chi''(\omega)$ bezeichnen wir wieder den Real- bzw. Imaginärteil und \hat{P} steht für den Cauchy-Hauptwert.

1.4.5 Thermische Imaginärzeit-Erwartungswerte eines harmonischen Oszillators

Durch die Wick-Rotation $t \rightarrow -i\tau$ erhalten wir die Imaginärzeit-Entwicklung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (1.192),

$$\bar{a}(\tau) = a^\dagger e^{\omega\tau}, \quad (1.268)$$

$$a(\tau) = a e^{-\omega\tau}. \quad (1.269)$$

Man beachte, dass in diesem Falle $\bar{a}(\tau) \neq a^\dagger(\tau)$ gilt. In gleicher Weise zum Realzeitfall definieren wir

$$\begin{aligned} \kappa^+(\tau) &= \kappa^+(t = -i\tau) \\ &= \frac{\pi\hbar}{m\omega} \left[\coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cosh(\omega\tau) - \sinh(\omega\tau) \right], \end{aligned} \quad (1.270)$$

$$\begin{aligned} \kappa^-(\tau) &= \kappa^-(t = -i\tau) \\ &= \frac{\pi\hbar}{m\omega} \left[\coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cosh(\omega\tau) + \sinh(\omega\tau) \right]. \end{aligned} \quad (1.271)$$

Entsprechend erhalten wir für die zeitgeordnete Funktion

$$\kappa(\tau) = \frac{\pi\hbar}{m\omega} \left[\coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cosh(\omega\tau) - \sinh(\omega|\tau|) \right], \quad (1.272)$$

und für die retardierte und avancierte Funktion

$$\kappa^{\text{R}}(\tau) = \Theta(\tau) \frac{-\pi\hbar}{\omega} \sinh(\omega\tau), \quad (1.273)$$

$$\kappa^{\text{A}}(\tau) = \Theta(-\tau) \frac{\pi\hbar}{\omega} \sinh(\omega\tau). \quad (1.274)$$

Für den speziellen Fall $\tau = 0$, $\hbar\beta$ erhalten wir

$$\kappa(0) = \kappa(\hbar\beta) = \frac{\pi\hbar}{m\omega} \coth\left[\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right]. \quad (1.275)$$

Für die Badkorrelationsfunktion (1.276) erhalten wir die aus der Gleichung (1.471) bekannte Form durch analoge Rechnung zu

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} X(\tau) X(0) \rangle &= \sum_{\alpha} \frac{\hbar c_{\alpha}^2}{2m\omega_{\alpha}} \left[\coth\left(\frac{\omega_{\alpha}\hbar\beta}{2}\right) \cosh(\omega_{\alpha}\tau) - \sinh(\omega_{\alpha}|\tau|) \right] \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \left[\coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cosh(\omega\tau) - \sinh(\omega|\tau|) \right]. \end{aligned} \quad (1.276)$$

Dieser Ausdruck hat, wie schon in Kapitel 1 bemerkt wurde, nur Gültigkeit für den Bereich $\tau \in [-\hbar\beta, \hbar\beta]$. Dies geht aus den analytischen Eigenschaften

von $\kappa^+(t)$ und $\kappa^-(t)$ hervor. Betrachten wir dazu nochmals den thermischen Erwartungswert $\kappa^+(\tau)$ und $\kappa^-(\tau)$ aus Gleichung (1.270), (1.271),

$$\kappa^+(\tau) = \Theta(\tau) \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-(\hbar\beta-\tau)E_n/\hbar} e^{-\tau E_m/\hbar} |\langle n|x|m\rangle|^2, \quad (1.277)$$

$$\kappa^-(\tau) = \Theta(-\tau) \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-(\hbar\beta+\tau)E_n/\hbar} e^{\tau E_m/\hbar} |\langle n|x|m\rangle|^2. \quad (1.278)$$

Für die Konvergenz der Summe ist es nun notwendig, dass die jeweiligen Exponenten negativ sind. Dies liefert für $\kappa^+(t)$ die Bedingung $\tau < \hbar\beta$ und $\tau > 0$, wobei letztere durch die Theta-Funktion immer erfüllt ist. Analog erhalten wir für $\kappa^-(t)$ die Bedingung $\tau > -\hbar\beta$ und $\tau < 0$. Somit erhalten wir für $\kappa(\tau)$ den Definitionsbereich obigen Definitionsbereich.

1.4.6 Funktionale und Gaußsche Integrale

Da im Folgenden immer wieder gaußsche Integrale auftreten, also im Allgemeinen mehrdimensionale Integrale über die Exponentialfunktion mit quadratischem Exponenten, machen wir uns nochmals kurz mit deren Eigenschaften vertraut. Das folgende, N dimensionale Integral ergibt als Verallgemeinerung von Gleichung (1.160), nachdem man den Exponenten um das Extremum von S entwickelt, also $x_i = A_{ij}^{-1}b_j + y_i$ setzt und den Integrandkern A_{ij} diagonalisiert,

$$Z[b] = \int d^N x e^{S[x,b]} = \int d^N x \exp \left[-\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j \pm b_i x_i \right], \quad (1.279)$$

$$= Z[0] \exp \left[\frac{1}{2} b_i A_{ij}^{-1} b_j \right], \quad (1.280)$$

$$Z[0] = \int d^N y \exp \left[-\frac{1}{2} y_i A_{ij} y_j \right] = \sqrt{\frac{(2\pi)^N}{\det A}}, \quad (1.281)$$

unter der Annahme, dass automatisch über doppelt auftretende Indizes summiert wird. Bei der Entwicklung von x um das Extremum von S kann die Koordinate y als Fluktuationskoordinate aufgefasst werden. $Z[0]$ wird alleine durch diese Fluktuationen bestimmt. Der Term $A_{ij}^{-1}b_j$ in der Entwicklung von x_i entspricht der partikulären Lösung des Problems $A_{ij}x_j = b_i$, also der Greenfunktion A_{ij}^{-1} angewandt auf die Störung b_j . Die Fluktuationen y_i beinhalten die homogene Lösung $A_{ij}x_j = 0$. Eventuelle Randbedingungen sind nur mit der homogenen Lösung verträglich und gehen daher nicht in die partikuläre Lösung, sondern nur in die Fluktuationsvariable y_i und somit in $Z[0]$ ein.

Die obige Integration in Gleichung (1.279) entspricht mit $b_i \rightarrow ib_i$ auch einer N -dimensionalen Fouriertransformation und ist eine Verallgemeinerung der Tatsache, dass die Fourier-Transformierte einer Gauß-Funktion wieder eine Gauß-Funktion mit inversem Koeffizienten entspricht. Oftmals werden wir das obige mehrdimensionale Integral auch als Erwartungswert

$$\langle e^{b_i x_i} \rangle = \frac{Z[b]}{Z[0]} = \frac{1}{Z[0]} \int d^N x P[x] e^{b_i x_i} = \exp \left[\frac{1}{2} b_i A_{ij}^{-1} b_j \right] \quad (1.282)$$

mit dem gaußschen Wahrscheinlichkeitsgewicht

$$P[x] = \exp \left[-\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j \right] \quad (1.283)$$

auffassen. Mit der Notation $\langle A(x) \rangle$ verstehen wir den Erwartungswert von $A(x)$ unter dem Funktionalgewicht $\exp(S[b=0])$ aus Gleichung (1.279).

Im Falle eines imaginären Exponenten, also im Realzeitfall, muss die Integration als verallgemeinerte Funktion aufgefasst werden, wie in Gleichung (1.159) dargestellt wurde.

Da A_{ij} bilinear an x koppelt, trägt nur der symmetrische Teil von A bei, wodurch eine Diagonalisierung sicher gestellt wird. Weiterhin muss die Matrix A positiv definit sein, damit alle Eigenwerte größer Null sind, da ansonsten das Integral hoch divergent wird.

Entwickelt man y_i nach den Eigenfunktionen des Kernes A , so erhält man direkt den Ausdruck (1.281) für $Z[0]$. Mit der Determinante von A verstehen wir im folgenden ganz allgemein das Produkt der Eigenwerte der Matrix bzw. des Operators A , wobei eventuelle Randbedingungen an die möglichen Pfade zu essentiellen Einschränkungen des Produktes über die Eigenwerte von A führen. Dies liegt daran, dass nur Eigenwerte von A beitragen, wenn deren Eigenfunktionen die Randbedingungen für die möglichen Pfade erfüllen. Mathematisch können wir dieser Einschränkung gerecht werden, indem wir mit einer N -dimensionalen Delta-Funktion die erforderlichen Randbedingungen erzwingen.

Ein Pfadintegral der Form

$$Z[b] = \int \mathcal{D}q \exp \left[-\frac{1}{2} q(\tau) \cdot L(\tau, \sigma) \cdot q(\sigma) + b(\tau) \cdot q(\tau) \right] \quad (1.284)$$

$$= Z[0] \exp \left[\frac{1}{2} b(\tau) \cdot L^{-1}(\tau, \sigma) \cdot b(\sigma) \right] \quad (1.285)$$

ist nun eine Verallgemeinerung des obigen Integrals im Kontinuumslimites $i, j \in \mathbb{N} \rightarrow \tau, \tau' \in \mathbb{R}$, wobei wir die Notation

$$b(\tau) \cdot q(\tau) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau b(\tau) q(\tau) \quad (1.286)$$

$$q(\tau) \cdot L(\tau, \sigma) \cdot q(\sigma) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau d\sigma q(\tau) L(\tau, \sigma) q(\sigma)$$

entsprechend der Summenkonvention im diskreten Fall verwendet haben, um die Analogie so gut als möglich zu erhalten und um im Folgenden die Notation kurz zu halten. Das Integral als Funktion der Variablen x_i geht in ein Funktional der Funktion $q(\tau)$ über so wie die Summation über i, j in eine Integration über τ, σ übergeht. Die Entwicklung um das Extremum mit $\partial_i S(\{x_j\}) = 0$ geht in eine Funktionalableitung¹⁰ $\delta S[q]/\delta q(t) = 0$ über, also

$$q(\tau) = L^{-1}(\tau, \tau') \cdot b(\tau') + y(\tau). \quad (1.287)$$

Durch die obige Notation (1.286) entspricht die Funktionalableitung formal einer gewöhnlichen Ableitung. Wenn der Exponent eine Wirkung darstellt, dann entspricht die Lösung der Funktionalableitung gerade der klassischen Lösung des dazugehörigen physikalischen Systems. Wie schon im diskreten Fall stellen die Pfade $y(\tau)$ Fluktuationen um das Extremum von S (den klassischen Pfad) dar. Die Zustandssumme $Z[0]$ kann formal wieder durch die Determinante von L ausgedrückt werden.

Man kann nun $Z[b]$ als generierende Funktion von Erwartungswerten mit dem gaußschen Gewicht $L[q] = q(\tau) \cdot L(\tau, \sigma) \cdot q(\sigma)$ mit

$$\langle q(\tau_1) \cdots q(\tau_N) \rangle = \frac{1}{Z[0]} \int \mathcal{D}q q(\tau_1) \cdots q(\tau_N) \exp \left[-\frac{1}{2} L[q] \right], \quad (1.288)$$

$$= \frac{1}{Z[0]} \left(\frac{\delta}{\delta b(\tau_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta b(\tau_N)} \right) Z[b] \Big|_{b=0}, \quad (1.289)$$

$$= \left(\frac{\delta}{\delta b(\tau_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta b(\tau_N)} \right) \exp \left[\frac{1}{2} b(\tau) \cdot L^{-1}(\tau, \sigma) \cdot b(\sigma) \right] \Big|_{b=0} \quad (1.290)$$

auffassen. Dabei erkennt man sofort, dass immer genau zweimal eine Funktionalableitung $\delta/\delta b(\tau)$ auf den Exponenten in Gleichung (1.290) angewandt werden muss, damit bei $b = 0$ ein nicht verschwindender Beitrag entsteht. Entwickelt man die Exponentialfunktion in (1.290), so trägt nur genau der Term bei, dessen Ordnung in b der Anzahl der Ableitungen $\delta/\delta b$ entspricht. Alle anderen Terme verschwinden, da der Ausdruck an der Stelle $b = 0$ ausgewertet wird. Dies ist eine Form des Wickschen Theorems und besagt, dass

¹⁰ Die Funktionalableitung ist eine direkte Verallgemeinerung der partiellen Ableitung auf unendlich viele Freiheitsgrade entsprechend der Verallgemeinerung einer Funktion $f(\{x_i\})$ auf ein Funktional $F[\phi]$. Unter Verwendung der Notation (1.286) kann man in gewohnter Weise die bekannten Regeln der Differenziation anwenden.

der oben eingeführte gaußsche Erwartungswert in Zweipunkt-Korrelationsfunktionen

$$\begin{aligned} \langle q(\tau_1) \cdots q(\tau_N) \rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{\substack{\text{alle Permutationen} \\ \{q(\tau_{P_1}), \dots, q(\tau_{P_N})\}}} \langle q(\tau_{P_1})q(\tau_{P_2}) \rangle \cdots \langle q(\tau_{P_{N-1}})q(\tau_{P_N}) \rangle, \\ &= \frac{1}{N!} \sum L^{-1}(\tau_{P_1}, \tau_{P_2}) \cdots L^{-1}(\tau_{P_{N-1}}, \tau_{P_N}) \quad (1.291) \end{aligned}$$

faktoriisiert¹¹. Während Gleichung (1.288), (1.289) für ein beliebiges Funktionalgewicht $\exp[-\frac{1}{2}L[q]]$ gelten, folgt die Darstellung (1.290) direkt aus Gleichung (1.285) und gilt nur für ein gaußsches Gewicht. Den Erwartungswert einer beliebigen Funktion $f(q)$ kann man nun durch eine Störungsreihe darstellen, indem man $f(q)$ in eine Potenzreihe in q entwickelt und die einzelnen Potenzen in q mit Hilfe der Wickschen Regel als Produkte von Zweipunkt-Korrelationsfunktionen ausdrückt, also

$$\langle V(q) \rangle = \frac{1}{Z[0]} V \left(\frac{\delta}{\delta b} \right) Z[b] \Big|_{b=0} = \sum_{l=0} \frac{v_l}{l!} \langle q^l \rangle. \quad (1.292)$$

Während $Z[b]$ als erzeugendes Funktional für Korrelationsfunktionen dient, wie man aus Gleichung (1.288) bis (1.290) ersieht, kann der Logarithmus

$$\mathcal{F}[b] = \ln \left[\frac{Z[b]}{Z[0]} \right], \quad \mathcal{F}[0] = 0 \quad (1.293)$$

als erzeugendes Funktional für nicht reduzierbare Korrelationsfunktionen – auch Kumulanten genannt – betrachtet werden,

$$\langle\langle q(\tau_1) \cdots q(\tau_N) \rangle\rangle = \frac{\delta}{\delta b(\tau_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta b(\tau_N)} \mathcal{F}[b] \Big|_{b=0}. \quad (1.294)$$

Den Grund für die obige Bezeichnung werden wir in Kürze klären. Die Normierung in Gleichung (1.293) über $Z[0]$ ist für die Definition der Kumulanten (1.294) irrelevant, da bei der Ableitung dieser Term keine Rolle spielt, was man sofort durch die Eigenschaft $\mathcal{F}[b] = \ln Z[b] - \ln Z[0]$ sieht. Genausogut kann $Z[b]$ so normiert werden, dass $Z[0]$ gerade Eins ergibt. Für den Fall eines gaußschen Gewichts (1.284) ergibt sich

$$\mathcal{F}[b] = \frac{1}{2} b(\tau) \cdot L^{-1}(\tau, \sigma) \cdot b(\sigma), \quad (1.295)$$

¹¹ Dies gilt immer, sofern die Wirkung des ungestörten Modells in einer gaußschen Form vorliegt.

so dass die einzige nicht verschwindende Kumulante bei einem gaußschen Modell die nicht reduzierbare Zweipunkt-Korrelationsfunktion mit

$$\langle\langle q(\tau_1)q(\tau_2) \rangle\rangle = \frac{1}{2} [L^{-1}(\tau_1, \tau_2) + L^{-1}(\tau_2, \tau_1)] = L^{-1}(\tau_1, \tau_2) \quad (1.296)$$

ist, wobei wir auf der rechten Seite verwendet haben, dass der Integralkern $L^{-1}(\tau_1, \tau_2)$ symmetrisch ist bzw. nur sein symmetrischer Anteil beiträgt. Die so definierten Korrelationsfunktionen sind gerade die Entwicklungskoeffizienten für die Funktionale $Z[b]$ bzw. $\mathcal{F}[b]$. Analog zu einer Taylorreihe entwickelt man das Funktional $Z[b]$ um $Z[0]$ über die Reihe

$$Z[b] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d\tau_1 \cdots d\tau_n \left. \frac{\delta^n Z[b]}{\delta b(\tau_1) \cdots \delta b(\tau_n)} \right|_{b=0} b(\tau_1) \cdots b(\tau_n). \quad (1.297)$$

Für die normierten Funktionale gilt also

$$\frac{Z[b]}{Z[0]} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d\tau_1 \cdots d\tau_n \langle q(\tau_1) \cdots q(\tau_n) \rangle b(\tau_1) \cdots b(\tau_n), \quad (1.298)$$

$$\mathcal{F}[b] = 0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d\tau_1 \cdots d\tau_n \langle\langle q(\tau_1) \cdots q(\tau_n) \rangle\rangle b(\tau_1) \cdots b(\tau_n). \quad (1.299)$$

Bei den gaußschen Integralen ist diese Reihe für das Funktional $\mathcal{F}[b]$ in zweiter Ordnung exakt, da die einzige nichtverschwindende Kumulante durch Gleichung (1.296) gegeben ist, und man erhält ganz analog zur quadratischen Ergänzung in einer Dimension für das erzeugende Funktional $\mathcal{F}[b]$ der nicht reduzierbaren Korrelationsfunktionen

$$\mathcal{F}[b] = \frac{1}{2} b(\tau_1) \cdot \langle\langle q(\tau_1)q(\tau_2) \rangle\rangle \cdot b(\tau_2). \quad (1.300)$$

Die Variation von $Z[b]$ ist also durch die dazugehörigen Korrelationsfunktionen definiert, während die Variation von $\mathcal{F}[b]$ durch die entsprechenden Kumulanten gegeben ist. Für eine quadratische Wirkung ergibt sich genauso

$$S[q] = S[y] + \frac{1}{2} \eta(\tau_1) \cdot \frac{\delta^2 S[q]}{\delta q(\tau_1) \delta q(\tau_2)} \cdot \eta(\tau_2), \quad (1.301)$$

$$q = y + \eta \quad \text{mit} \quad \left. \frac{\delta S[q]}{\delta q(\tau)} \right|_{q=y} = 0, \quad (1.302)$$

was wir schon zu Beginn dieses Abschnitts zur quadratischen Ergänzung der gaußschen Exponenten verwendet haben.

Wir betrachten nun die Bedeutung der Kumulante etwas genauer. Dazu definieren wir die Bedeutung nicht-korrelierter Erwartungswerte durch die Gleichung

$$\langle q(\tau_1)q(\tau_2) \rangle = \langle q(\tau_1) \rangle \langle q(\tau_2) \rangle . \quad (1.303)$$

Dies ist in voller Analogie zur Definition der mathematischen Wahrscheinlichkeitslehre [41, 42]. Diese Eigenschaft bedeutet für das Wahrscheinlichkeitsgewicht $P[q]$ aus Gleichung (1.283), dass P in zwei getrennte und voneinander unabhängige Bereiche faktorisiert,

$$P[q] = P_1[q_1] P_2[q_2] , \quad (1.304)$$

wobei $q(\tau_1)$ nicht im Gebiet von $q(\tau_2)$ liegt. Diese Eigenschaft gilt ebenso für höhere Momente, wobei nun P in N Teile entsprechend faktorisiert, mit

$$\langle q(\tau_1) \cdots q(\tau_N) \rangle = \langle q(\tau_1) \rangle \cdots \langle q(\tau_N) \rangle . \quad (1.305)$$

Auf die Zustandssumme $Z[b]$ überträgt sich nun diese Faktorisierungseigenschaft, so dass für das erzeugende Funktional der Kumulanten $\mathcal{F}[b]$ sich gerade eine Aufspaltung in einzelne voneinander unabhängige Summanden der Form

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_1[b_1] + \mathcal{F}_2[b_2] + \cdots + \mathcal{F}_N[b_N] \quad (1.306)$$

ergibt. Damit erhalten wir nun aber sofort die essenzielle Eigenschaft der Kumulanten: eine Kumulante verschwindet immer dann, wenn mindestens eine Variable der Kumulante unkorreliert mit den anderen Variablen vorliegt! Dies liest man sofort aus der Zerlegung von $\mathcal{F}[b]$ in Summanden und der Definition von Kumulanten, Gleichung (1.294) ab.

Zwischen den Erwartungswerten $\langle q(\tau_1) \cdots q(\tau_N) \rangle$ und den Kumulanten $\langle\langle q(\tau_1) \cdots q(\tau_N) \rangle\rangle$ besteht nun durch die Beziehung der jeweiligen erzeugenden Funktionale $Z[b]$ bzw. $\mathcal{F}[b]$ ein enger Zusammenhang. Um dies abzuleiten, drücken wir den Erwartungswert aus Gleichung (1.289) durch das erzeugende Funktional $\mathcal{F}[b]$ aus,

$$\langle q(\tau_1) \cdots q(\tau_N) \rangle = \frac{\delta}{\delta b(\tau_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta b(\tau_N)} \exp[\mathcal{F}[b]] \Big|_{b=0} . \quad (1.307)$$

Unter Verwendung der Reihenentwicklung von $\mathcal{F}[b]$ entsprechend Gleichung (1.299) finden wir somit direkt mit der selbsterklärenden Schreibweise

$$\begin{aligned} \langle\langle q(1) \rangle\rangle &= \frac{\delta}{\delta b(\tau_1)} \mathcal{F}[b] \Big|_{b=0} = \langle q(1) \rangle , \\ \langle\langle q(1) q(2) \rangle\rangle &= \langle q(1) q(2) \rangle - \langle q(1) \rangle \langle q(2) \rangle , \\ \langle\langle q(1) q(2) q(3) \rangle\rangle &= \langle q(1) q(2) q(3) \rangle - \langle q(1) \rangle \langle q(2) q(3) \rangle - \langle q(2) \rangle \langle q(3) q(1) \rangle \\ &\quad - \langle q(3) \rangle \langle q(1) q(2) \rangle + \langle q(1) \rangle \langle q(2) \rangle \langle q(3) \rangle . \end{aligned} \quad (1.308)$$

Alle höheren Ordnungen lassen sich entsprechend ableiten. Eine Rekursionsformel findet man in [43]. Bei vielen Modellen entspricht das ungestörte (freie) Modell einer gaußschen Wirkung und somit ist die einzige nichtverschwindende Kumulante solcher Modelle die nichtreduzierbare Zweipunkt-Korrelationsfunktion. Durch die Ankopplung einer schwachen Störung proportional zu einem Kopplungsparameter $\lambda \ll 1$ können nun je nach Störung alle weiteren Kumulanten einen nichtverschwindenden Wert annehmen; dieser bleibt jedoch beschränkt auf einen Faktor proportional zu einer Potenz λ^n , $n \in \mathbb{N}^+$.

In Ordnung 2 und 3 stimmen die Kumulanten mit den zentralen Momenten $\langle c(\tau_1) \cdots c(\tau_N) \rangle$ überein, wobei $c(\tau)$ folgendermaßen definiert wird,

$$c(\tau) = q(\tau) - \langle q(\tau) \rangle. \quad (1.309)$$

Der Grund für die Übereinstimmung liegt darin, dass das erste zentrale Moment per Definition verschwindet. Bei einer 2-Punkt/3-Punkt-Funktion führt eine nichtkorrelierte Variable aber immer auf ein 1. Moment, womit das gesamte zentrale Moment verschwindet. Gleiches gilt, wie oben bewiesen, für Kumulanten. Ab Ordnung 4 müssen nicht mehr notwendigerweise isolierte Momente entstehen, siehe Abbildung 1.5. Im Folgenden ist der Zusammenhang zwischen Kumulanten und zentralen Momenten bis Ordnung 4 gegeben

$$\begin{aligned} \langle\langle q(1) \rangle\rangle &= \langle c(1) \rangle, & (1.310) \\ \langle\langle q(1)q(2) \rangle\rangle &= \langle c(1)c(2) \rangle, \\ \langle\langle q(1)q(2)q(3) \rangle\rangle &= \langle c(1)c(2)c(3) \rangle, \\ \langle\langle q(1)q(2)q(3)q(4) \rangle\rangle &= \langle c(1)c(2)c(3)c(4) \rangle - \langle c(1)c(2) \rangle \langle c(3)c(4) \rangle \\ &\quad - \langle c(1)c(3) \rangle \langle c(2)c(4) \rangle - \langle c(1)c(4) \rangle \langle c(2)c(3) \rangle, \end{aligned}$$

Die generierende Funktion $C[b]$ von zentralen Momenten besitzt die Form

$$C[b] = \exp[\Gamma] = \left\langle \exp \left[b(\tau) \cdot \left(q(\tau) - \langle q(\tau) \rangle_{[b]} \right) \right] \right\rangle, \quad (1.311)$$

$$\Gamma = -b(\tau) \cdot \langle q(\tau) \rangle_{[b]} + \mathcal{F}[b], \quad (1.312)$$

$$\langle c(\tau_1) \cdots c(\tau_N) \rangle = \frac{\delta}{\delta b(\tau_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta b(\tau_N)} C[b] \Big|_{b=0}, \quad (1.313)$$

$$= \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta}{\delta b(\tau_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta b(\tau_N)} \int \mathcal{D}q e^{-\frac{1}{2}L[q] + b(\tau) \cdot c(\tau)} \Big|_{b=0}. \quad (1.314)$$

Die Notation $m_{[b]} = \langle q(\tau) \rangle_{[b]} = \frac{\delta}{\delta b(\tau)} \mathcal{F}[b]$ bedeutet, dass wir den Erwartungswert (1.289) noch nicht an der Stelle $b = 0$ auswerten, wodurch der Erwartungswert ein Funktional von b wird. Sofern die Funktionalableitung

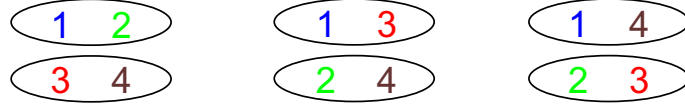


Abbildung 1.5: Obwohl die 4 gewählten Ereignisse nicht unabhängig sind, liegt keine Faktorisierung in Momente der 1. Ordnung vor. Dies ist erst ab Ordnung 4 möglich. Die skizzierten Beiträge entsprechen gerade der Differenz zwischen der 4. Kumulante und dem 4. zentralen Gewicht in Gleichung (1.310).

von m nach b keine Nullstelle hat, liegt eine isomorphe Abbildung vor. Gleichung (1.312) entspricht dann einer Legendre-Transformation. Diese besitzt die folgenden wichtigen Eigenschaften, wobei wir der Übersicht halber die Definition $m(\tau)$ wie folgt verwenden,

$$m(\tau) = m(\tau)_{[b]} = \langle x(\tau) \rangle_{[b]} = \frac{\delta}{\delta b(\tau)} \mathcal{F}[b], \quad (1.315)$$

$$\Gamma = \mathcal{F}[b] - b(\tau) \cdot m(\tau), \quad (1.316)$$

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta b(\tau)} = \frac{\delta \mathcal{F}[b]}{\delta b(\tau)} - m(\tau) - b(\tau') \cdot \frac{\delta m(\tau')}{\delta b(\tau)} = \frac{\delta \Gamma}{\delta m(\tau')} \cdot \frac{\delta m(\tau')}{\delta b(\tau)} \quad (1.317)$$

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta m(\tau)} = \frac{\delta \mathcal{F}[b]}{\delta b(\tau')} \cdot \frac{\delta b(\tau')}{\delta m(\tau)} - b(\tau) - m(\tau') \cdot \frac{\delta b(\tau')}{\delta m(\tau)} = -b(\tau). \quad (1.318)$$

Das erzeugende Funktional Γ ist daher explizit ein Funktional der Funktion $m(\tau)$. Implizit hängt $m(\tau)$ von $b(\tau)$ ab, wie die Definition in Gleichung (1.315) zeigt,

$$\Gamma = \Gamma[m], \quad m(\tau) = m(\tau)_{[b]}. \quad (1.319)$$

Dies ist der Grund, warum wir es bisher vermieden haben, das Funktional als $\Gamma[b]$ zu schreiben. Für das erzeugende Funktional der zentralen Erwartungswerte (1.314) bedeutet dies, dass die natürliche Formulierung über $\Gamma[m]$ folgende Form besitzt,

$$\begin{aligned} \langle c(\tau_1) \cdots c(\tau_N) \rangle &= \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta m(\sigma_1)}{\delta b(\tau_1)} \cdots \frac{\delta m(\sigma_N)}{\delta b(\tau_N)} \\ &\times \frac{\delta}{\delta m(\sigma_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta m(\sigma_N)} \exp \left[\Gamma[m] \right] \Big|_{m=m[b=0]}. \end{aligned} \quad (1.320)$$

Die Invertierbarkeit zwischen m und b wird durch die Positivität der Ableitung $\frac{\delta m(\tau)}{\delta b(\tau')}$ sichergestellt. Dann gilt

$$\delta(\tau - \tau') = \frac{\delta m(\tau)}{\delta m(\tau')} = \frac{\delta m(\tau)}{\delta b(\sigma)} \cdot \frac{\delta b(\sigma)}{\delta m(\tau)} = - \frac{\delta^2 \mathcal{F}[b]}{\delta b(\tau) \delta b(\sigma)} \cdot \frac{\delta^2 \Gamma[m]}{\delta m(\sigma) \delta m(\tau')}, \quad (1.321)$$

wobei wir entsprechend der obigen Definitionen, Gleichung (1.315), (1.318)

$$m(\tau) = \frac{\delta \mathcal{F}[b]}{\delta b(\tau)} \quad \text{und} \quad b(\tau) = -\frac{\delta \Gamma[m]}{\delta m(\tau)} \quad (1.322)$$

verwendet haben. Wir definieren nun noch die Ableitungen des Funktionals $\Gamma[m]$,

$$\Gamma(\tau_1 \dots \tau_N) = \frac{\delta}{\delta m(\tau_1)} \dots \frac{\delta}{\delta m(\tau_N)} \Gamma[m] . \quad (1.323)$$

Damit nimmt Gleichung (1.321) mit der Notation

$$G(\tau_1 \dots \tau_N) \equiv \langle\langle q(\tau_1) \dots q(\tau_N) \rangle\rangle_{[b]} \quad (1.324)$$

für die Kumulante die einfache symbolische Form

$$\delta(1, 2) = -G(1 \sigma) \cdot \Gamma(\sigma 2) \quad (1.325)$$

an. Speziell gilt für die Kumulante $\langle\langle 1 2 \rangle\rangle_{[b=0]}$ entsprechend der Definition, Gleichung (1.307) an der Stelle $b = 0$,

$$\langle\langle 1 2 \rangle\rangle_{[b=0]} \equiv G_0(1 2) = -\Gamma(1 2)_{[m[b=0]]} \equiv -\Gamma_0(1 2) \quad (1.326)$$

Da die Kumulante an der Stelle $b = 0$ ausgewertet wird, muss Γ entsprechend an der Stelle $m = m[b = 0] = \langle q \rangle_{[b=0]}$ ausgewertet werden. Höhere Ableitungen werden durch sukzessives Ableiten von Gleichung (1.321) nach m oder b erreicht. Dazu benötigen wir die 4 Ableitungen

$$\frac{\delta}{\delta b(\sigma)} G(\tau_1 \dots \tau_N) = G(\sigma \tau_1 \dots \tau_N) , \quad (1.327)$$

$$\frac{\delta}{\delta m(\sigma)} G(\tau_1 \dots \tau_N) = -\Gamma(\sigma \tau) \cdot G(\tau \tau_1 \dots \tau_N) , \quad (1.328)$$

$$\frac{\delta}{\delta b(\sigma)} \Gamma(\tau_1 \dots \tau_N) = G(\sigma \tau) \cdot \Gamma(\tau \tau_1 \dots \tau_N) , \quad (1.329)$$

$$\frac{\delta}{\delta m(\sigma)} \Gamma(\tau_1 \dots \tau_N) = \Gamma(\sigma \tau_1 \dots \tau_N) . \quad (1.330)$$

So erhalten wir in der 3. Ordnung (durch Ableitung nach m)

$$0 = -G(1 \sigma) \cdot \Gamma(\sigma 2 3) + \Gamma(2 \sigma) \cdot G(1 \sigma \sigma') \cdot \Gamma(\sigma' 3) . \quad (1.331)$$

Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 1.6 symbolisch dargestellt. Höhere Ableitungen ergeben sich rekursiv. Unter Anwendung von Gleichung (1.325) auf Gleichungen der Ordnung $N \geq 3$ lassen sich nun die sogenannten amputierten Elemente $G(1 \dots N)$ und $\Gamma(1 \dots N)$ erzeugen, indem mit den 2-Punkt

$$\begin{aligned}
& - \text{G}^1 - \text{Gamma}^2 = \delta(1,2) \\
& \text{G}^1 - \text{Gamma}^3 - \text{G}^1 - \text{Gamma}^2 - \text{Gamma}^3 = 0 \\
& \text{G}^1 + 3 \text{G}^1 - \text{Gamma}^2 - \text{Gamma}^3 - \text{G}^1 - \text{Gamma}^2 - \text{Gamma}^3 - \text{Gamma}^4 = 0
\end{aligned}$$

Abbildung 1.6: Der Zusammenhang zwischen Kumulanten G als Ableitungen des Funktionals $\mathcal{F}[b]$ und den Ableitungen Γ des Legendre-transformierten Funktionals $\Gamma[m]$.

Funktionen G oder Γ multipliziert wird. Exemplarisch betrachten wir dazu Gleichung (1.331) bzw. die zweite Gleichung in Abbildung 1.6. Die Anwendung von Γ führt auf die Gleichung

$$\Gamma(1\ 2\ 3) = \Gamma(1\ \sigma_1)\Gamma(2\ \sigma_2)\Gamma(3\ \sigma_3) \cdot G(\sigma_1\ \sigma_2\ \sigma_3). \quad (1.332)$$

Entsprechend erhalten wir durch zweifache Anwendung von G die Gleichung

$$G(1\ 2\ 3) = G(1\ \sigma_1)G(2\ \sigma_2)G(3\ \sigma_3) \cdot \Gamma(\sigma_1\ \sigma_2\ \sigma_3). \quad (1.333)$$

In den Gleichungen (1.332) und (1.333) wird dabei wieder über σ_1 , σ_2 und σ_3 integriert. Die Abbildung 1.7 verdeutlicht diesen Zusammenhang nochmals graphisch. Ab Ordnung $N = 4$ kommen entsprechend dem bekannten Zusammenhang zwischen zentralen Momenten und Kumulanten (1.310) weitere Terme hinzu.

Gleichung (1.314) geht mithilfe der Kettenregel und der obigen symbolischen Schreibweise in die Form

$$\langle c(\tau_1) \cdots c(\tau_N) \rangle = \left[\prod_{i=1}^N G(\tau_i, \sigma_i) \cdot \frac{\delta}{\delta m(\sigma_i)} \right] \exp \left[\Gamma[m] \right] \Big|_{m=\langle q \rangle_{[b=0]}}. \quad (1.334)$$

über. Es treten dabei Ableitungen von $\Gamma[m]$ nach m in allen Ordnungen bis N auf. Analog zu den Kumulanten können wir schlußendlich die Kumulanten für zentrale Momente definieren,

$$\langle\langle c(\tau_1) \cdots c(\tau_N) \rangle\rangle = \frac{\delta}{\delta b(\tau_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta b(\tau_N)} \Gamma[m[b]] \Big|_{b=0}, \quad (1.335)$$

$$= \left[\prod_{i=1}^N G(\tau_i, \sigma_i) \cdot \frac{\delta}{\delta m(\sigma_i)} \right] \Gamma[m] \Big|_{m[b=0]}, \quad (1.336)$$

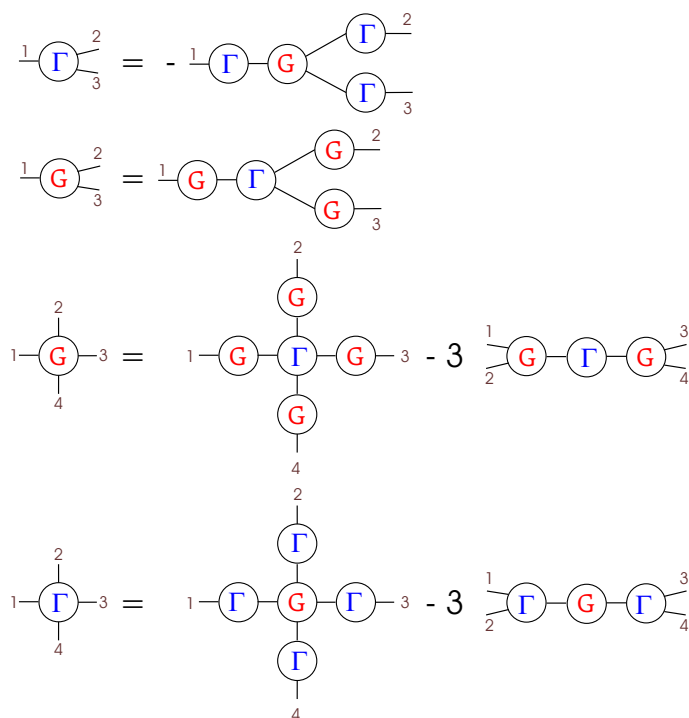


Abbildung 1.7: Durch Anwendung der Gleichung (1.331) auf die Graphen der Abbildung 1.6 lassen sich die amputierten N -Punkt Funktionen extrahieren, hier am Beispiel $N = 3$.

$$= \left[\prod_{i=1}^N G(\tau_i, \sigma_i) \right] \Gamma[\sigma_1 \cdots \sigma_N]_{|m[b=0]} . \quad (1.337)$$

Es tritt also gerade ein sogenannter amputierter Graph entsprechend Abbildung 1.7 auf.

Die Differenz zwischen $m(\tau)$ an der Stelle b und $m(\tau)$ an der Stelle $b = 0$ bezeichnen wir mit

$$\Xi(\tau) = m(\tau)[b] - m(\tau)[b=0] = \langle q(\tau) \rangle_{[b]} - \langle q(\tau) \rangle_{[b=0]} . \quad (1.338)$$

Wegen Gleichung (1.318) verschwindet der lineare Term der Entwicklung von $\Gamma[m]$. Ebenso verschwindet $\Gamma[m[b=0]] = \mathcal{F}[b=0]$ mit der Definition (1.293) und wir finden

$$\Gamma[m] = \frac{1}{2} \Xi(\tau) \cdot \left. \frac{\delta^2 \Gamma[m]}{\delta m(\tau) \delta m(\tau')} \right|_{m[b=0]} \cdot \Xi(\tau') + \dots . \quad (1.339)$$

Da nach Gleichung (1.315) $m(\tau)$ ein Funktional von $b(\tau)$ ist, können wir auch $m(\tau)$ nach $b(\tau)$ entwickeln. Weil wir in Gleichung (1.299) das Funktional $\mathcal{F}[b]$

nach b entwickelt haben, erhalten wir daraus sofort die Entwicklung von $m[b]$,

$$m(\sigma)[b] = \frac{\delta \mathcal{F}[b]}{\delta b(\sigma)}, \quad (1.340)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d\tau_2 \cdots d\tau_n \langle\langle q(\sigma) q(\tau_2) \cdots q(\tau_n) \rangle\rangle b(\tau_2) \cdots b(\tau_n), \\ &= \langle q(\sigma) \rangle + \frac{1}{2} \langle\langle q(\sigma) q(\tau_2) \rangle\rangle \cdot b(\tau_2) + \dots \end{aligned} \quad (1.341)$$

Bei dieser Entwicklung koppeln die Funktionen $b(\tau)$ über die Kumulanten an und die Entwicklung erfolgt um den Erwartungswert $\langle q(\sigma) \rangle$. Im allgemeinen Fall ist die Ersetzung des Funktionals $m = m[b]$ nicht exakt möglich, da höhere Kumulanten nicht verschwinden. Die Umkehrung dieser Entwicklung von b als Funktional von m ist nicht so einfach; man kann allerdings die obige Gleichung rekursiv mithilfe von Gleichung (1.325) lösen. Im Falle eines gaußschen Integrals können wir die ganzen bisher durchgeführten Schritte explizit ausführen. Ausgehend von Gleichung (1.295) für $\mathcal{F}[b]$ finden wir

$$m(\tau) = L^{-1}(\tau, \sigma) \cdot b(\sigma), \quad (1.342)$$

$$\Gamma[m] = \frac{1}{2} b(\tau)[m] \cdot L^{-1}(\tau, \tau') \cdot b(\tau')[m] - b(\tau)[m] \cdot m(\tau), \quad (1.343)$$

$$= -\frac{1}{2} m(\tau) \cdot L(\tau, \tau') \cdot m(\tau'). \quad (1.344)$$

Das Funktional $\exp[\Gamma[m]]$ entspricht also exakt dem ursprünglichen Funktionalgewicht $\exp[-\frac{1}{2} q(\tau) \cdot L(\tau, \tau') \cdot q(\tau')]$ zur Berechnung der Zustandssumme in Gleichung (1.288). Bei Funktionalintegralen in der Quantenmechanik entspricht somit $\Gamma[m]$ der Wirkung $S[q]$. Im allgemeinen Fall stimmt $\Gamma[m]$ lediglich in nullter Ordnung in \hbar mit der Wirkung $S[q]$ überein. Eine Entwicklung liefert jedoch eine Störungsordnung in \hbar , wobei in Ordnung N gerade N -Loop-Integrale beitragen. Daraus wird ersichtlich, dass ein Loop-Integral gerade eine Ordnung \hbar erzeugt. Wenn wir die Lösung des klassischen Problems betrachten, also die Euler-Lagrange Gleichung lösen, dann finden wir eine Reihenentwicklung ohne Loops, was nach den gerade gemachten Bemerkungen zu erwarten ist. Als Selbstenergie $\Sigma(1, 2)$ eines Modells bezeichnet man die Differenz $\Gamma(1, 2) - \Gamma_0(1, 2)$, wobei der Term Γ_0 den wechselwirkungsfreien Anteil des Modells beschreibt und oft explizit angegeben werden kann. Für den Propagator des wechselwirkenden Modells ergibt sich somit $G^{-1}(1, 2) = G_0^{-1}(1, 2) + \Sigma(1, 2)$. Diese Gleichung kann rekursiv gelöst werden und ergibt als Lösung für den vollen Propagator die Dyson-Reihe

$$\begin{aligned} G(1, 2) &= G_0(1, 2) - G_0(1, \sigma) \cdot \Sigma(\sigma, \sigma') \cdot G_0(\sigma', 2) \\ &\quad + G_0(1, \sigma) \cdot \Sigma(\sigma, \sigma') \cdot G_0(\sigma', \sigma'') \cdot \Sigma(\sigma'', \sigma''') \cdot G_0(\sigma''', 2) - \dots \end{aligned} \quad (1.345)$$

Im weiteren werden wir es immer wieder mit solchen gaußschen Integralen zu tun haben. Bisher haben wir jedoch noch keine Randbedingungen an die zu integrierenden Pfade gestellt. Solche Bedingungen treten jedoch im Folgenden immer auf und beinhalten essentielle physikalische Eigenschaften des zu behandelnden Systems. So werden wir im nächsten Abschnitt die quantenmechanische Zustandssumme im Pfadintegralformalismus untersuchen. Dabei werden wir über periodische Pfade der Form $q(0) = q(\hbar\beta)$ integrieren. Die Fluktuationen $y(\tau)$ verschwinden daher auf dem Rand $\tau = 0$ und $\tau = \hbar\beta$. Bei der Entwicklung der Fluktuationen nach Eigenfunktionen des Integralkernes dürfen also nur solche Eigenfunktionen vorkommen, die der obigen Randbedingung entsprechen. Wenn wir nun nochmals Gleichung (1.281) betrachten wird klar, dass mit $\det(A)$ nur das Produkt über Eigenwerte von A gemeint ist, deren Eigenfunktionen ebenfalls die obige Randbedingung erfüllen. Im Realzeitfall, den wir schon bei der Behandlung des Propagators kennengelernt haben, werden die Endpunkte $q(t_i) = q_i$ und $q(t_f) = q_f$ der Pfade explizit vorgegeben. Sie beeinflussen daher auch den klassischen Pfad. Die Fluktuationen besitzen jedoch dieselben Randbedingungen $y(t_i) = y(t_f) = 0$. Eine genaue Untersuchung dieses Sachverhaltes findet sich im Anhang A.1.

Bei der stochastischen Beschreibung weiter unten im Text werden wir Integralen über komplexe Variablen begegnen. Dabei bildet man aus zwei reellen und unabhängigen Variablen x und y die zueinander komplex konjugierten Variablen z und \bar{z} über

$$z = \frac{x' + ix''}{\sqrt{2}}, \quad \bar{z} = \frac{x' - ix''}{\sqrt{2}}, \quad (1.346)$$

und betrachtet sie als unabhängig voneinander. Das Integralmaß geht dabei von $ix'dx''$ in $dzd\bar{z}$ über¹². Als Verallgemeinerung von Gleichung (1.279) bis (1.281) erhält man

$$Z[v, \bar{u}] = \int \left(\frac{dz_j d\bar{z}_i}{2\pi i} \right)^N \exp \left[-\bar{z}_i A_{ij} z_j + \bar{u}_i z_i + v_i \bar{z}_i \right] \quad (1.347)$$

$$= Z[0, 0] \exp \left[\bar{u}_i (A^{-1})_{ij} v_j \right], \quad (1.348)$$

$$Z[0, 0] = \frac{1}{\det A}, \quad (1.349)$$

wobei die Normierung des Integralmaß in Gleichung (1.347) nur für $Z[0, 0]$ von Bedeutung ist. Wichtig ist hier insbesondere, dass nun zwei voneinander unabhängige Quellterme \bar{u}_i und v_j nach der Integration an den inversen Kern

¹² Der Faktor i entsteht in der komplexen Ebene $z = x' + ix''$ durch das Flächenelement $ix'dx''$. Der Betrag der Jacobi-Determinante unter der obigen Transformation ist gerade Eins. Eine genauere Betrachtung erfolgt in Kapitel 3.

$(A^{-1})_{ij}$ ankopplern. Dafür ist es nun zwingend notwendig, dass A hermitesch ist. Genau dann ist der Exponent $\bar{z}_i A_{ij} z_j$ reell¹³ und die Faktorisierung von $z_j = (x'_j + ix''_j)/\sqrt{2}$ in zwei reelle gekoppelte gaußsche Integrale über dx'_j und dx''_j gelingt. Die Kopplung dieser beiden Integrale erfolgt rein über den Imaginäranteil von A . Die Variable z kann mit einer beliebigen Phase multipliziert werden, was lediglich einer Drehung im Raum z', z'' bedeutet. Damit können wir durch den Übergang $z \rightarrow iz$ Gleichung (1.347) in der später benötigten Form

$$Z[v, \bar{u}] = \int \left(\frac{dz_j d\bar{z}_i}{2\pi i} \right)^N \exp \left[-\bar{z}_i A_{ij} z_j + i\bar{u}_i z_i - iv_i \bar{z}_i \right], \quad (1.350)$$

schreiben. Mit dieser Identität sind wir weiter unten im Text in der Lage, die Kopplung der reellen Pfade $q(t)$ und $q'(t')$ unter Einführung einer komplexen Funktion $Z(t)$ aufzulösen, d.h. wir werden Gleichung (1.348) durch die Gleichung (1.347) ausdrücken. Diese Ersetzung trägt in der Literatur den Namen 'Hubbard-Stratonovich Transformation' und hat in vielen Bereichen der Physik eine wichtige Anwendung gefunden.

Gaußsche Integrale der Form

$$Z[b] = \int d^N x \exp \left[\frac{i}{2} x_i A_{ij} x_j \pm ib_i x_i \right], \quad (1.351)$$

$$= Z[0] \exp \left[\frac{i}{2} b_i A_{ij}^{-1} b_j \right], \quad (1.352)$$

$$Z[0] = \int d^N y \exp \left[-\frac{i}{2} y_i A_{ij} y_j \right] = \sqrt{\frac{(-2\pi i)^N}{\det A}}, \quad (1.353)$$

mit einer komplexen Phase werden analog zu Gleichung (1.159) im eindimensionalen Fall behandelt. Angewandt auf Pfadintegrale bekommen wir den entsprechenden Ausdruck

$$Z[b] = \int \mathcal{D}q \exp \left[-\frac{i}{2} q(t) \cdot L(t, t') \cdot q(t') \pm ib(t) \cdot q(t) \right] \quad (1.354)$$

$$= Z[0] \exp \left[\frac{i}{2} b(t) \cdot L^{-1}(t, t') \cdot b(t') \right] \quad (1.355)$$

1.4.7 Störungstheorie

Da wir explizit nur gaußsche Integrale der Gestalt (1.284) explizit berechnen können, benötigen wir eine systematische Störungsentwicklung von nichtharmonischen Problemen. Dazu betrachten wir ein generierendes Funktional mit

¹³ Wir erhalten mit der hermiteschen Matrix $A = R + iJ$ mit symmetrischen Realteil $R^T = R$ und antisymmetrischem Imaginärteil $J^T = -J$ eine Zerlegung des Bilinearanteils $\bar{z}_i A_{ij} z_j$ in den reellen Ausdruck $z'_i R_{ij} z'_j + z''_i R_{ij} z''_j + 2z''_i J_{ij} z'_j$. Dies ist Ausdruck dafür, dass eine hermitesche Matrix immer reelle Eigenwerte besitzt.

einem zusätzlichen Term $V[q]$ der Gestalt

$$Z[b] = \int_{q(\tau')=q'}^{q(\tau'')=q''} \mathcal{D}q \exp \left[-S[q] + b(\tau) \cdot q(\tau) \right], \quad (1.356)$$

$$\begin{aligned} &= \int \mathcal{D}q \exp \left[-\frac{1}{2}q(\tau) \cdot L(\tau, \sigma) \cdot q(\sigma) + b(\tau) \cdot q(\tau) - \int_0^{\hbar\beta} d\tau V[q(\tau)] \right] \\ &= \exp \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau V[\delta/\delta b(\tau)] \right] Z_0[b], \end{aligned} \quad (1.357)$$

wobei wir $q(\tau)$ im Argument des Störterms V durch die Funktionalableitung nach $b(\tau)$ ersetzt haben und so das Funktionalintegral durchführen können, welches $Z_0[b]$ liefert, was dem ungestörten generierenden Funktional

$$Z_0[b] = \int \mathcal{D}q \exp \left[-\frac{1}{2}q(\tau) \cdot L(\tau, \sigma) \cdot q(\sigma) + b(\tau) \cdot q(\tau) \right], \quad (1.358)$$

$$= Z_0[0] \exp \left[\frac{1}{2} b(\tau) \cdot L^{-1}(\tau, \sigma) \cdot b(\sigma) \right] \quad (1.359)$$

entspricht. Wenn wir nun die Exponentialfunktion $\exp \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau V[\delta/\delta b(\tau)] \right]$ in Gleichung (1.357) in eine Reihe entwickeln, so finden wir gerade eine Summe von Gleichungen für freie ($V = 0$) Korrelationsfunktionen,

$$\frac{Z[0]}{Z_0[0]} = \left[1 - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle V[q(\tau)] \rangle_0 + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau d\tau' \frac{1}{2} \langle V[q(\tau)] V[q(\tau')] \rangle_0 + \dots \right]. \quad (1.360)$$

Erwartungswerte des durch den Term V gestörten Problems erhalten wir entsprechend,

$$\langle q(\tau_1) \cdots q(\tau_N) \rangle = \frac{1}{Z[0]} \left(\frac{\delta}{\delta b(\tau_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta b(\tau_N)} \right) Z[b] \Big|_{b=0}. \quad (1.361)$$

Der Term $Z[0]^{-1}$ muss entsprechend $(1 + \Delta)^{-1} = 1 - \Delta + \Delta^2 + \dots$ in eine Reihe entwickelt werden, um nun systematisch in entsprechender Ordnung das Problem störungstheoretisch zu behandeln.

Betrachten wir nun beispielsweise den vollen Propagator $\langle q(\tau_1) q(\tau_2) \rangle$ des Problems. Symbolisch können wir dies, wie in Abbildung 1.8 b) gezeigt, durch eine Linie (freier Propagator, Bild a)) mit inneren Korrekturen darstellen. Terme, welche hingegen zu der Entwicklung von $Z[0]$ beitragen, besitzen keine externen Zeiten τ , da über alle Zeiten integriert wird. Diese Diagramme bezeichnet man als Vakuumdiagramme, siehe Abbildung 1.8 c). Wenn

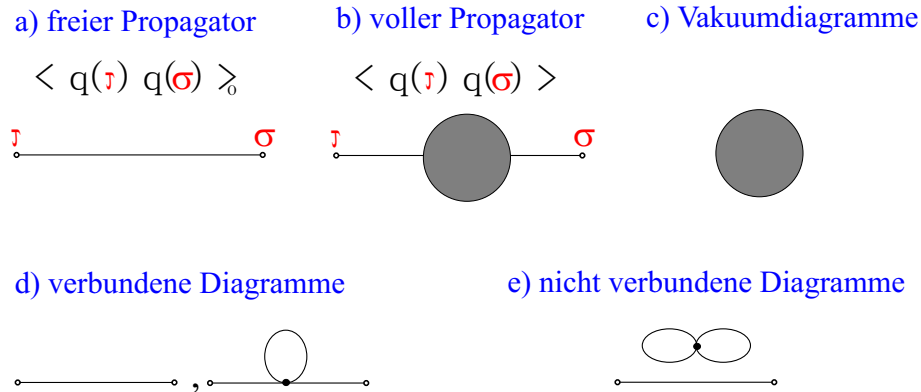


Abbildung 1.8: Die Entwicklung des vollen Propagators b) liefert den freien Propagator a) und weitere Terme in einer Störungsreihe. Diese innere Wechselwirkung wird durch den Kreis symbolisiert. Dazu tragen nur verbundene Diagramme d) bei. Nicht verbundene Anteile, wie in e) zu sehen, kürzen sich bei der Entwicklung mit den Vakuumdiagrammen c) weg.

wir nun die Entwicklung des vollen Propagators nach Gleichung (1.361) betrachten, so finden wir sogenannte verbundene Diagramme entsprechend Bild d) und Beiträge, welche faktorisieren – sogenannte “nicht verbundene” Diagramme, Bild e). Vakuumdiagramme, also Terme ohne externe Zeiten, welche durch “nicht verbundene” Diagramme entstehen, kürzen sich gerade mit den Vakuumdiagrammen im Nenner weg. Es tragen zum vollen Propagator also nur verbundene Diagramme bei. Eine Entwicklung nach $\mathcal{F}[b]$ liefert nun automatisch nur verbundene Diagramme. Dies haben wir ausführlich im vorausgegangenen Abschnitt diskutiert.

Alternativ können wir auch eine Differentialgleichung für das komplette Set aller Korrelationsfunktionen ableiten. Dazu betrachten wir den Effekt einer Verschiebung des Pfades $q(\tau)$ um eine infinitesimale Funktion $\eta(\tau)$, welche an den Grenzen des Pfadintegrals $q(\tau')$ und $q(\tau'')$ verschwindet, auf das generierende Funktional aus Gleichung (1.356). Das Funktionalmaß bleibt unter der Transformation unverändert und wir bekommen

$$\begin{aligned} Z[b] &= \int \mathcal{D}q \exp \left[-S[q + \eta] + b(\tau) \cdot \{q(\tau) + \eta(\tau)\} \right], \\ &= \int \mathcal{D}q \left[1 - \left(\frac{\delta S[q]}{\delta q(\tau)} - b(\tau) \right) \cdot \eta(\tau) + \mathcal{O}(\eta^2) \right] \exp \left[-S[q] + b \cdot q \right]. \end{aligned} \quad (1.362)$$

Daraus folgt, dass die Variation

$$0 = \int \mathcal{D}q \left[\frac{\delta S[q]}{\delta q(\tau)} - b(\tau) \right] \exp \left[-S[q] + b(\tau) \cdot q(\tau) \right] \quad (1.363)$$

analog zum eindimensionalen Fall verschwindet. Explizit erhalten wir aus Gleichung (1.363), indem wir $q(\tau)$ formal durch $\delta/\delta b(\tau)$ ersetzen, und das Funktionalintegral ausführen,

$$\left[\frac{\delta S[q]}{\delta q(\tau)} \Big|_{q(\tau)=\frac{\delta}{\delta b(\tau)}} - b(\tau) \right] Z[b] = 0. \quad (1.364)$$

Leider kann auch diese Differenzialgleichung nur störungstheoretisch gelöst werden. Funktionalableitungen nach $b(\tau)$ angewandt auf Gleichung (1.364) erzeugen Korrelationsfunktionen.

Die störungstheoretische Behandlung solcher Probleme ist in der Literatur ausführlich diskutiert. Im Zusammenhang mit Funktionalintegralen findet man beispielsweise in [11, 13, 14, 18, 20] ausführliche Abhandlungen.

1.4.8 Sattelpunkt-Entwicklung

Betrachten wir ein Integral der Form $\int dx \exp[-f(x)/\hbar]$. Der Einfachheit halber habe die Funktion $f(x)$ genau ein absolutes Minimum an der Stelle x_0 . Für einen Störparameter $\hbar \ll 1$ kommt der wesentliche Beitrag des obigen Integrals aus der unmittelbaren Umgebung von $x = x_0$. Daher entwickeln wir die Funktion $f(x)$ um dieses Minimum mit $x = x_0 + y$ und erhalten so

$$e^{-f(x_0)/\hbar} \left[\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{f''(x_0)}} + \langle \mathcal{O}(y^3) \rangle \right]. \quad (1.365)$$

Mit der Notation $\langle g(y) \rangle$ verstehen wir einen Erwartungswert der Gestalt $\int dy g(y) \exp[-f''(x_0)y^2/(2\hbar)]$.

Im vorigen Abschnitt wurde die Berechnung von Integralen mit maximal quadratischem Exponenten vorgestellt. Für allgemeinere Exponenten ist die explizite Berechnung im Allgemeinen nicht mehr möglich. Eine offensichtliche Näherung ist nun die Entwicklung um die stationäre (klassische) Lösung herum. Bei gaußschen Integralen liefert diese Entwicklung (1.301) wieder einen maximal quadratischen Exponenten und kann daher exakt berechnet werden. Im allgemeinen Fall können wir mit der Funktionalentwicklung (1.301) ein Pfadintegral der Form $\int \mathcal{D}x \exp[-S[x(\tau)]/\hbar]$ mit der Verschiebung des Pfades $x(\tau) = x_0(\tau) + y(\tau)$ um die extremale Lösung $\delta S[x]/\delta x(\tau)|_{x_0} = 0$ in die folgende Form entwickeln,

$$e^{-S[x_0(\tau)]/\hbar} \oint \mathcal{D}y \exp \left[-\frac{1}{\hbar} y(\tau) \cdot \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(\tau) \delta x(\tau')} \cdot y(\tau') \right] \left\{ 1 + \mathcal{O} \left(\frac{\delta^3 S[x]}{\delta x(\tau)^3} \right) \right\}. \quad (1.366)$$

Sofern wir Terme der Funktionalentwicklung in Ordnung $(\delta^3 S[x]/\delta x(\tau)^3)$ und höher vernachlässigen, können wir das gaußsche Integral exakt durchführen. Dieses entspricht dem Problem des harmonischen Oszillators.

1.4.9 Die Funktionaldeterminante

Bei der N -dimensionalen gaußschen Integration erhielten wir das wichtige Resultat (1.281) welches besagt, dass $Z[0]$ im wesentlichen durch das Produkt der Eigenwerte der Matrix A gegeben ist, was der Determinante von A entspricht, wobei die Definition unabhängig vom gewählten Koordinatensystem, d.h. Funktionenraum ist. Dazu bemerken wir, dass die Matrix $A_{n,m}$ einer Darstellung eines Operators A nach den euklidischen Basiskoordinaten $\mathbf{e}_i \in \mathbb{R}^N$ entspricht, also

$$A = \sum_{n,m} A_{n,m} \mathbf{e}_n \otimes \mathbf{e}_m . \quad (1.367)$$

Die Eigenfunktionen von A (Vektoren in der Basis \mathbf{e}_m) mit den dazugehörigen Eigenwerten, deren Produkt der Determinante von A entspricht, liegen nun im selben euklidischen Raum \mathbb{R}^N . Wird dieser Raum nun durch Randbedingungen eingeschränkt, so reduziert sich damit auch der Raum für die Eigenfunktionen von A . Damit fallen aber genau diejenigen Eigenwerte der Determinante weg, welche in diesem Unterraum liegen.

Im Grenzfall $N \rightarrow \infty$, also bei Pfadintegralen, ist diese Interpretation analog zum obigen diskreten Fall zu verstehen. Allerdings tritt nun oft ein Problem auf, da der Funktionenraum nicht mehr diskret ist und dadurch das Produkt über die Eigenwerte eines Operators divergiert. Dies ist sogar zu erwarten, da wir in Gleichung (1.153) festgestellt haben, dass das Integralmass $\mathcal{D}x$ ebenfalls divergiert und somit nur der Quotient wohl definiert ist. Um nun im Limes $N \rightarrow \infty$ sinnvolle Resultate zu erhalten, ohne auf den diskreten Ausdruck rückzugreifen, gibt es verschiedene Möglichkeiten. Die wohl einfachste Variante besteht darin, Ausdrücke mit bekannten Referenzausdrücken zu vergleichen, was immer auf den Quotienten zweier Determinanten führt. Dies betrachten wir am Beispiel des harmonischen Oszillators mit dem Referenzausdruck für den Propagator eines freien Teilchens.

Für ein freies Teilchen der Masse m finden wir den Propagator

$$G_0(q_f, q_i | t) = \Theta(t) \left\langle q_f \left| \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \right] \right| q_i \right\rangle \quad (1.368)$$

$$= \Theta(t) \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(q_f - q_i)^2}{2t} \right], \quad (1.369)$$

wie man leicht durch einfügen von $1 = \int dp |p\rangle \langle p|$ einsieht.

Den Propagator für den harmonischen Oszillator betrachten wir nun als Pfadintegral. Wie wir beispielsweise aus Gleichung (1.301) gesehen haben,

lässt sich die Wirkung exakt in einen klassischen Anteil und einen Fluktuationsanteil zerlegen,

$$G_\omega(q_f, q_i|t) = \Theta(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_\omega[x_{kl}] \right] \oint_{y(0)=y(t)=0} \mathcal{D}y \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_\omega[y] \right], \quad (1.370)$$

mit der quadratischen Wirkung

$$S_\omega[y] = y(t) \cdot L(t, t') \cdot y(t'), \quad L(t, t') = -m\delta(t - t') (\partial_{t'}^2 + \omega^2). \quad (1.371)$$

Die Eigenfunktionen zu $L(t, t')$, welche die Randbedingung der Pfadintegration in Gleichung (1.370) erfüllen, besitzen die Eigenwerte¹⁴

$$\lambda_l = m(\nu_l^2 - \omega^2), \quad \nu_l = \frac{l\pi}{t}, \quad l \in \mathbb{N}^+ \quad (1.372)$$

Für den Fluktuationsanteil in Gleichung (1.370) erwarten wir nun, dass er sich proportional zu $(\det[L])^{-1/2}$ verhält. Dieser Ausdruck

$$\det[L]^{-1/2} = \prod_{l=1}^{\infty} [m(\nu_l^2 - \omega^2)]^{-1/2} \quad (1.373)$$

ist nun für sich alleine divergent, da wir in dieser naiven Betrachtung nicht die Normierung für das Maß $\mathcal{D}y$ berücksichtigt haben. Wir können dies nun aber mit dem explizit bekannten Ausdruck für den freien Propagator ($\omega = 0$) normieren; dazu schreiben wir

$$\begin{aligned} G_\omega(q_f, q_i|t) &= \frac{G_\omega(q_f, q_i|t)}{G_0(q_f, q_i|t)} G_0(q_f, q_i|t) \\ &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_\omega[x_{kl}] - S_0[x_{kl}]) \right] G_0(q_f, q_i|t) \prod_{l=1}^{\infty} \left[\frac{\nu_l^2 - \omega^2}{\nu_l^2} \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (1.374)$$

Dieses Produkt am Ende der obigen Gleichung ist nun wohldefiniert,

$$\prod_{l=1}^{\infty} \left[1 - \frac{\omega t}{\pi l} \right]^{-1/2} = \left[\frac{\omega t}{\sin[\omega t]} \right]^{1/2}. \quad (1.375)$$

Für die Wirkung der klassischen Lösung des harmonischen Oszillators und damit auch des freien Teilchens finden wir, wie in Gleichung (A.51) explizit gezeigt wird,

$$S_\omega[x_{kl}] = \frac{m\omega}{2 \sin[\omega t]} \left[(x_f^2 + x_i^2) \cos[\omega t] - 2x_i x_f \right]. \quad (1.376)$$

Damit erhalten wir einen expliziten Ausdruck für den Propagator des harmonischen Oszillators,

$$G_\omega(q_f, q_i|t) = \Theta(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_\omega[x_{kl}] \right] \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega t]}}. \quad (1.377)$$

¹⁴Näheres im Anhang, Gleichung (A.47).

1.4.10 Quantenmechanische Zustandssumme und Imaginärzeit Propagation

Nach dieser Vorarbeit wollen wir nun die quantenmechanische Zustandssumme im Pfadintegralformalismus betrachten. Zu berechnen ist also der Propagator in Imaginärzeit

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{Z_B} \text{tr} \left[e^{-\beta \hat{H}} \right] = \frac{1}{Z_B} \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{r} | U^{(E)}(\hbar\beta) | \mathbf{r} \rangle \\ &= \frac{1}{Z_B} \oint \mathcal{D}\mathbf{r} e^{-S^{(E)}[\mathbf{r}]/\hbar}, \quad \mathbf{r} = \{q, \mathbf{x}\}, \end{aligned} \quad (1.378)$$

wobei Z_B der Zustandssumme des freien Bades entspricht und zur Normierung und weiteren Vereinfachung im Folgenden mit einbezogen wird. Der Index (E) erinnert daran, dass wir einen Imaginärzeitpropagator betrachten und damit im euklidischen Raum sind, entsprechend Abschnitt 1.4.1. Im Vergleich zur bekannten Wirkung bekommen wir hier für die Potenzialterme ein umgekehrtes Vorzeichen, wodurch der Integrand der Wirkung mit der Energiedichte übereinstimmt.

Die Integration erfolgt nun über alle Pfade mit der Randbedingung $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}(\hbar\beta)$, was durch die Notation $\oint \mathcal{D}\mathbf{r}$ im Folgenden symbolisiert wird. Unter Verwendung des Hamiltonians (1.4) erhalten wir

$$Z = \frac{1}{Z_B} \oint \mathcal{D}q e^{-S_S^{(E)}[q]/\hbar} \oint \mathcal{D}\mathbf{x} e^{-S_B^{(E)}[q, \mathbf{x}]/\hbar}, \quad (1.379)$$

$$= \oint \mathcal{D}q e^{-S_S^{(E)}[q]/\hbar} \mathcal{F}[q], \quad (1.380)$$

$$\begin{aligned} S_B^{(E)} &= \sum_{\alpha} \left\{ \frac{1}{2} x_{\alpha}(\tau) \cdot R_{\alpha}(\tau, \tau') \cdot x_{\alpha}(\tau') - c_{\alpha} x_{\alpha}(\tau) \cdot q(\tau) \right. \\ &\quad \left. + \frac{c_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} q(\tau) \cdot q(\tau) \right\}, \end{aligned} \quad (1.381)$$

mit dem so definierten Integralkern des Badtermes H_R aus Gleichung (1.6),

$$R_{\alpha}(\tau, \tau') = R_{\alpha}(\tau - \tau') = -m_{\alpha} : \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta} (\partial_{\tau'}^2 - \omega_{\alpha}^2), \quad (1.382)$$

wobei der kinetische Term partiell integriert wurde. Mit der Notation $:\delta(\nu):_L$ wird in (1.382) die L -periodisch fortgesetzte Delta-Distribution¹⁵ bezeichnet,

$$:\delta(\nu):_L = \sum_n \delta(\nu + nL) = \frac{1}{L} \sum_m \exp \left[i \frac{2\pi}{L} m\nu \right]. \quad (1.383)$$

¹⁵ Bei der Integration über den $\hbar\beta$ -symmetrischen Bereich $\tau \in [0, n\hbar\beta]$ wird die gewöhnliche Delta-Distribution durch $1/n : \delta(\tau) :_{\hbar\beta}$ ersetzt, da n mal darüber integriert wird.

Wegen der Randbedingung $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}(\hbar\beta)$ liefert der Randterm bei der obigen partiellen Integration keinen Beitrag.

Das sogenannte Influenzfunktional $\mathcal{F}[q]$ beschreibt dabei den effektiven Einfluss des Bades auf das System. Für ein freies System ohne Ankopplung an das Bad geht das Influenzfunktional \mathcal{F} gegen 1, was man sofort sieht, wenn man $c_\alpha = 0$ setzt. Dieses Funktional entspricht gerade der klassischen Spur über ρ_B , definiert in Gleichung (1.39) und damit der Zustandssumme Z_B aus Gleichung (1.45). Somit sind wir nun in der Lage, die quantenmechanische Verallgemeinerung von Imaginärzeit-Erwartungswerten der Form (1.40) wie folgt zu definieren:

$$\mathcal{F}[q] = \frac{1}{Z_B} \oint \mathcal{D}\mathbf{x} e^{-S_B^{(E)}[q, \mathbf{x}]/\hbar}, \quad (1.384)$$

$$\langle f(\mathbf{x}, t) \rangle_B = \frac{1}{Z_B} \oint \mathcal{D}\mathbf{x} f(\mathbf{x}, t) e^{-S_B^{(E)}[q, \mathbf{x}]/\hbar}, \quad (1.385)$$

$$= \frac{1}{Z_B} \text{tr} \left[e^{-\beta H} \hat{T} f(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (1.386)$$

Der Faktor Z_B entspricht wie in Gleichung (1.379) der Zustandssumme des freien Bades, also der N Oszillatoren ohne Ankopplung an das System. Dieser Term ist notwendig zur Normierung der gaußschen Integration analog zu (1.279)-(1.285) und wird sich bei der Ausreduktion der Badfreiheitsgrade weiter unten gerade wegkürzen. Dem Erwartungswert über dem Boltzmann-Gewicht des freien Bades (1.38) entspricht dabei gerade

$$\langle f(\mathbf{x}, \tau) \rangle_R = \frac{1}{Z_R} \oint \mathcal{D}\mathbf{x} f(\mathbf{x}, \tau) \exp \left[\frac{-1}{2\hbar} \sum_\alpha x_\alpha(\tau) \cdot R_\alpha(\tau, \tau') \cdot x_\alpha(\tau') \right]. \quad (1.387)$$

Um eine generierende Funktion für die oben definierten Erwartungswerte zu bekommen, definieren wir analog wie in Abschnitt 1.4.6 gezeigt

$$Z_{R/B}[b] = \oint \mathcal{D}\mathbf{x} \exp \left[\frac{-1}{\hbar} \left\{ S_B^{(E)}[q, \mathbf{x}] - \hbar \sum_\alpha x_\alpha(\tau) \cdot b_\alpha(\tau) \right\} \right] \quad (1.388)$$

um Erwartungswerte für $f(x_\alpha)$ in der einfachen Form

$$\langle f(x_\alpha) \cdots f(x_\beta) \rangle_{R/B} = \frac{1}{Z_{R/B}[0]} f \left(\frac{\delta}{\delta b_\alpha} \cdots \frac{\delta}{\delta b_\beta} \right) Z_{R/B}[b] \Big|_{b=0} \quad (1.389)$$

darstellen und berechnen zu können.

Im weiteren geht es nun darum, die Badfreiheitsgrade auszuintegrieren, um zu einem expliziten Ausdruck für das Influenzfunktional $\mathcal{F}[q]$ bzw. der

Zustandssumme $Z_{\text{R/B}}[b]$ zu gelangen. Da der Integralkern $R_\alpha(\sigma)$ aus Gleichung (1.382) symmetrisch im Argument ist und sein Definitionsbereich $\sigma \in [-\hbar\beta, \hbar\beta]$ umfasst, bietet sich eine $\hbar\beta$ -periodische Fortsetzung an, wodurch der inverse Operator als $R_\alpha^{-1}(\sigma)$ als Fourierreihe über den sogenannten Matsubara Frequenzen $\nu_n = 2\pi n/(\hbar\beta)$ dargestellt werden kann. Genaugenommen muss der Integralkern $R_\alpha^{-1}(\tau - \tau')$ periodisch fortgesetzt werden, da der Imaginärzeitpropagator $\langle \mathbf{r} | U^{(\text{E})}(\hbar\beta, 0) | \mathbf{r} \rangle$ in Gleichung (1.378) translationsinvariant ist, also genausogut von δ nach $\hbar\beta + \delta$, $\delta \in \mathbb{R}$ integriert werden kann. Somit erhalten wir für den inversen Operator $R_\alpha^{-1}(\tau - \tau')$ für $\omega_\alpha \neq 0$

$$R_\alpha^{-1}(\tau - \tau') = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\nu_n(\tau - \tau')} \tilde{R}_\alpha^{-1}(\nu_n), \quad (1.390)$$

$$\tilde{R}_\alpha^{-1}(\nu_n) = \frac{1}{m_\alpha} \frac{1}{\nu_n^2 + \omega_\alpha^2}, \quad (1.391)$$

definiert durch die Bedingung

$$R_\alpha(\tau, \tau') \cdot R_\alpha^{-1}(\tau', \tau'') = : \delta(\tau - \tau'') :_{\hbar\beta}. \quad (1.392)$$

Um die Summation über n in Gleichung (1.390) durchzuführen, schreiben wir die Summe als Integral über die periodisch fortgesetzte Delta-Distribution und verwenden das Jordan-Lemma [54], um das Integral mit Hilfe des Residuensatzes wie folgt auszuwerten,

$$R_\alpha^{-1}(\sigma) = \frac{i}{\hbar\beta 2m_\alpha \omega_\alpha} \int d\nu : \delta(\nu) :_{\nu_1} e^{i\nu\sigma} \left[\frac{1}{\nu + i\omega_\alpha} - \frac{1}{\nu - i\omega_\alpha} \right], \quad (1.393)$$

$$= \frac{i}{2\pi 2m_\alpha \omega_\alpha} \sum_m \int d\nu e^{i\nu(\sigma - m\hbar\beta)} \left[\frac{1}{\nu + i\omega_\alpha} - \frac{1}{\nu - i\omega_\alpha} \right], \quad (1.394)$$

$$= \frac{1}{2m_\alpha \omega_\alpha} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\omega_\alpha |\sigma - m\hbar\beta|} \quad (1.395)$$

Die Ersetzung der Summe durch ein Integral mit der ν_1 -periodisch fortgesetzten Delta-Distribution $: \delta(\nu) :_{\nu_1} = \frac{\hbar\beta}{2\pi} \sum_m \exp[im\hbar\beta\nu]$ als Gewicht entspricht dabei der wohlbekanntenen Poissonschen Summenformel [35]. Man erkennt dabei, dass $R_\alpha^{-1}(\sigma)$ symmetrisch und $\hbar\beta$ -periodisch ist. Zur Aufsummation muss man nun σ auf einen Sektor s mit $\sigma \in [s\hbar\beta, (s+1)\hbar\beta]$, $s \in \mathbb{Z}$ beschränken, damit die nicht analytische Betragsfunktion ausgewertet werden kann. Für den Sektor s erhalten wir

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\omega_\alpha |\sigma - m\hbar\beta|} = \sum_{m=-\infty}^s e^{-\omega_\alpha(\sigma - m\hbar\beta)} + \sum_{m=s+1}^{\infty} e^{\omega_\alpha(\sigma - m\hbar\beta)} \quad (1.396)$$

$$= \frac{\cosh[\omega_\alpha(\sigma + \frac{2s+1}{2}\hbar\beta)]}{\sinh[\omega_\alpha\hbar\beta/2]}. \quad (1.397)$$

Diesem Ausdruck liest man nun wieder leicht die Periodizität $\hbar\beta$ ab. Für den im Folgenden relevanten Sektor $s = 0$ erhalten wir somit

$$D_\alpha(\sigma) = 2m_\alpha\omega_\alpha^{(s=0)}R_\alpha^{-1}(\sigma) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\omega_\alpha|\sigma-m\hbar\beta|}, \quad (1.398)$$

$$= \frac{\cosh[\omega_\alpha(\hbar\beta/2 - \sigma)]}{\sinh(\omega_\alpha\hbar\beta/2)}, \quad (1.399)$$

$$= \coth[\omega_\alpha\hbar\beta/2] \cosh[\omega_\alpha\sigma] - \sinh[\omega_\alpha\sigma]. \quad (1.400)$$

Den später benötigten Bereich $\sigma \in [-\hbar\beta, \hbar\beta]$ erreicht man einfach, indem man $D_\alpha(\sigma)$ durch $D_\alpha(|\sigma|)$ ersetzt. Alternativ kann man wegen der Symmetrie des Integralkerns auch über den Bereich $\tau' < \tau$ integrieren, was genau 1/2 des Wertes des ungeordneten Integrals entspricht. Dadurch ist das Argument immer größer Null.

Mit einer Entwicklung um das Extremum analog zu Gleichung (1.284) und (1.285) kann $S_B^{(E)}$ aus Gleichung (1.381) nun quadratisch ergänzt werden – auch ohne den inversen Integralkern R_α^{-1} explizit zu kennen. Man erhält so

$$x_\alpha(\tau) = c_\alpha R_\alpha^{-1}(\tau, \sigma) \cdot q(\sigma) - y_\alpha(\tau), \quad (1.401)$$

$$S_B^{(E)} = \sum_\alpha \left\{ \frac{1}{2} y_\alpha(\tau) \cdot R_\alpha(\tau, \tau') \cdot y_\alpha(\tau') + \frac{1}{2} q(\tau) \cdot k(\tau, \tau') \cdot q(\tau') \right\}, \quad (1.402)$$

wobei der Integralkern für die Pfadkopplung $k(\tau, \tau')$ nun auch den Beitrag des Terms H_T aus Gleichung (1.7) enthält. Man bekommt dadurch

$$k(\tau, \tau') = \sum_\alpha \left\{ -c_\alpha^2 R_\alpha^{-1}(\tau - \tau') + \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} : \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta} \right\}, \quad (1.403)$$

$$= \frac{1}{\hbar\beta} \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\nu_n(\tau-\tau')} \frac{\nu_n^2}{\nu_n^2 + \omega_\alpha^2}, \quad (1.404)$$

$$k(\tau, \tau') = \frac{M}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \xi_n e^{i\nu_n(\tau-\tau')}, \quad \xi_n = \frac{1}{M} \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2} \frac{\nu_n^2}{\nu_n^2 + \omega_\alpha^2}. \quad (1.405)$$

und der lineare Übergang von \mathbf{x} nach \mathbf{y} ändert das Funktionalmaß nicht. Die partikuläre Lösung $x_\alpha^p(\tau) = c_\alpha R_\alpha^{-1}(\tau, \sigma) \cdot q(\sigma)$ erfüllt die Randbedingung $x_\alpha^p(0) = x_\alpha^p(\hbar\beta)$, so dass das Pfadintegral nun über $\oint \mathcal{D}\mathbf{y}$ integriert werden kann. Diese Integration entspricht aber per Definition gerade der Zustands-summe des freien Oszillatorbades, welches sich also gegen Z_B wegekürzt. Die Pole von ξ_n liegen symmetrisch auf der imaginären Achse bei $\omega = \pm i\omega_\alpha$. Wir erhalten also als wichtiges Resultat für die quantenmechanische Zustands-summe aus Gleichung (1.378)

$$Z = \oint \mathcal{D}q \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left(S_S^{(E)}[q] + \frac{1}{2} q(\tau) \cdot k(\tau, \tau') \cdot q(\tau') \right) \right], \quad (1.406)$$

mit der effektiven Wirkung

$$S_{\text{eff}}[q] = S_S^{(\text{E})}[q] + \frac{1}{2}q(\tau) \cdot k(\tau, \tau') \cdot q(\tau') . \quad (1.407)$$

Das Influenzfunktional $\mathcal{F}[q]$ aus Gleichung (1.380), welches den Einfluss des Bades auf das System beschreibt, besitzt also die Form

$$\mathcal{F}[q] = \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} q(\tau) \cdot k(\tau, \tau') \cdot q(\tau') \right] . \quad (1.408)$$

Aus der Darstellung (1.404) sehen wir, dass $k(\tau, \tau')$ durch Fourier-Transformation diagonalisiert wird. Unter Verwendung der Dirac-Notation schreiben wir dies als

$$k(\tau, \tau') = \langle \tau | k | \tau' \rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \langle \tau | \nu_n \rangle M \xi_n \langle \nu_n | \tau' \rangle , \quad (1.409)$$

$$\langle \tau | \nu_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar\beta}} e^{i\nu_n \tau} . \quad (1.410)$$

Die nichtlokale Kopplung in Gleichung (1.402) geht dabei in die lokale Form

$$\frac{1}{2}q(\tau) \cdot k(\tau, \tau') \cdot q(\tau') = \frac{1}{2}M \sum_{n=-\infty}^{\infty} \xi_n \tilde{q}_n \tilde{q}_n^* , \quad (1.411)$$

$$q(\tau) = \langle \tau | q \rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar\beta}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\nu_n \tau} \tilde{q}_n , \quad \tilde{q}_n = \frac{1}{\sqrt{\hbar\beta}} \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau e^{-i\nu_n \tau} q(\tau) \quad (1.412)$$

über. Wegen der Eigenschaft $\xi_0 = 0$ spielt der Gleichstromanteil \tilde{q}_0 im Influenzfunktional $\mathcal{F}[q]$ keine Rolle. Diese Eigenschaft sichert die Translationsinvarianz der Systemkoordinate q zum Bad im Caldeira-Leggett-Modell (1.4). Ohne den Counterterm H_T , Gleichung (1.7), ist dies nicht der Fall.

Mit der spektralen Dichte aus Abschnitt 1.3 in der speziellen Form $J(\omega) = M\gamma\omega^s e^{-\omega\tau_c}$ mit $s > 0$ erhalten wir einen expliziten Ausdruck für ξ_n der Form

$$\xi_n = \frac{2}{M\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \frac{\nu_n^2}{\nu_n^2 + \omega^2} \quad (1.413)$$

$$= \frac{2\gamma}{\pi} \left[\pi |\nu_n|^s \frac{\cos(\pi s/2 + |\nu_n| \tau_c)}{\sin(\pi s)} + \nu_n^2 \tau_c^{2-s} \Gamma[s-2] {}_1F_2\left(1, \frac{3-s}{2}, \frac{4-s}{2}, -\left(\frac{\nu_n \tau_c}{2}\right)^2\right) \right] . \quad (1.414)$$

Im Limes $\tau_c \rightarrow 0$ erhalten wir für $s \in (0, 2)$ das einfache Resultat

$$\xi_n = \gamma \frac{|\nu_n|^s}{\sin[\pi s/2]} . \quad (1.415)$$

In dieser Form bekommen wir für $\tau - \tau' \neq 0$ die explizite Darstellung von $k(\tau, \tau')$ aus Gleichung (1.405) als

$$k(\tau, \tau') = \frac{\gamma}{M} \frac{(2\pi)^s}{(\hbar\beta)^{s+1}} \frac{1}{\sin[\pi s/2]} \left(\text{Li}_{-s} \left[e^{-i\frac{2\pi}{\hbar\beta}(\tau-\tau')} \right] + \text{Li}_{-s} \left[e^{i\frac{2\pi}{\hbar\beta}(\tau-\tau')} \right] \right). \quad (1.416)$$

Die Funktion entspricht dem sogenannten Polylogarithmus mit der Reihendarstellung [52],

$$\text{Li}_s(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^s}. \quad (1.417)$$

Im ohmschen Grenzfall $s = 1$ entsteht daraus die einfache Form

$$k(\tau, \tau') = -\frac{\gamma}{M} \frac{\pi}{(\hbar\beta)^2} \frac{1}{\sin^2 \left[\frac{\pi(\tau-\tau')}{\hbar\beta} \right]}. \quad (1.418)$$

Wir definieren analog auch die in (1.403) enthaltene Summe

$$\begin{aligned} K(\tau, \tau') &= \sum_{\alpha} c_{\alpha}^2 R_{\alpha}^{-1}(\tau - \tau'), \quad (1.419) \\ &= \frac{M}{\hbar\beta} \sum_n \zeta_n e^{i\nu_n(\tau-\tau')}, \quad \zeta_n = \frac{1}{M} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} \frac{\omega_{\alpha}^2}{\nu_n^2 + \omega_{\alpha}^2}. \quad (1.420) \end{aligned}$$

Somit besteht folgender Zusammenhang zwischen $k(\tau, \tau')$ und $K(\tau, \tau')$,

$$k(\tau, \tau') = -K(\tau, \tau') + \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} : \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta} \quad (1.421)$$

Für den Bereich $\tau \neq 0$ sind die Funktionen $k(\tau)$ und $-K(\tau)$ identisch. Da ζ_0 im gegensatz zu ξ_0 nicht verschwindet, liefert $K(\tau, \tau')$ einen Beitrag an der Stelle $\tau - \tau' = 0$. Die Funktion $K(\tau, \tau')$ ist daher im Gegensatz zu $k(\tau, \tau')$ stetig an dem Punkt $\tau - \tau' = 0$. Für den Sektor $\tau \in [0, \hbar\beta]$ erhalten wir aus Gleichung (1.399)

$$K(\tau) = \frac{1}{\pi} \int d\omega J(\omega) \frac{\cosh[\omega(\hbar\beta/2 - \tau)]}{\sinh[\omega\hbar\beta/2]}, \quad (1.422)$$

$$= \frac{1}{\pi} \int d\omega J(\omega) \left[\coth[\omega\hbar\beta/2] \cosh[\omega\tau] - \sinh[\omega\tau] \right]. \quad (1.423)$$

Mithilfe der spektralen Dichte $J(\omega)$ aus Gleichung (1.65) und D_α aus Gleichung (1.398) lässt sich der Integralkern $k(\tau, \tau')$ auch folgendermaßen darstellen

$$k(\tau, \tau') = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left[\frac{\cosh[\omega(\hbar\beta/2 - |\tau - \tau'|)]}{\sinh(\omega\hbar\beta/2)} - \frac{\delta(\tau - \tau')}{\omega} \right], \quad (1.424)$$

$$= \frac{2}{\pi\hbar\beta} \sum_n \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \frac{\nu_n^2}{\nu_n^2 + \omega^2} e^{i\nu_n\tau}. \quad (1.425)$$

1.4.11 Fourier-Darstellung des Pfadintegrals, effektive Masse und klassischer Hochtemperaturlimes

Die schnellen Badmoden führten bei der klassischen Betrachtung zu einer Massenrenormierung der Systemmasse, wie wir in Abschnitt 1.3.1 diskutierten. Im Imaginärzeitfall finden wir nun genau den selben Effekt wieder. Dies sieht man sofort ein, wenn man die Pfadkopplung $q(\tau) \cdot k(\tau, \tau) \cdot q(\tau')$ aus Gleichung (1.407) genauer betrachtet. In der Fourierdarstellung koppeln die Koeffizienten \tilde{q}_n an ξ_n entsprechend Gleichung (1.411) und (1.413). Indem wir wieder eine Trennfrequenz ω_T für niedere und hohe Badfrequenzen einführen, finden wir für den hochfrequenten Badanteil mit der Annahme $\nu_n \ll \omega_T$ in guter Näherung¹⁶

$$\xi_n^{\text{hf}} = \frac{2\nu_n^2}{M\pi} \int d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'^3} = \nu_n^2 \frac{\Delta M_{\text{hf}}}{M}. \quad (1.426)$$

Für Gleichung (1.411) erhalten wir daher

$$\frac{1}{2}M \sum_{n=-\infty}^{\infty} \xi_n \tilde{q}_n \tilde{q}_n^* = \frac{1}{2}M \sum_{|\nu_n| < \omega_T} \xi_n^{\text{lf}} \tilde{q}_n \tilde{q}_n^* + \frac{1}{2}\Delta M_{\text{hf}} \sum_{|\nu_n| < \omega_T} \nu_n^2 \tilde{q}_n \tilde{q}_n^*. \quad (1.427)$$

Dies führt also gerade wieder zu einer Massenrenormierung für das System.

Aufgrund der einfachen und lokalen Form der Pfadwechselwirkung (1.409) im Frequenzraum mit dem besonders einfachen Ergebnis im ohmschen Limes (1.415) betrachten wir nun die gesamte effektive Wirkung (1.407) eines harmonischen Oszillators im Frequenzraum. Mit der Definition (1.412) für die Pfaddarstellung im Frequenzraum $q(\tau)$ und der Kopplungsmode ξ_n aus Gleichung (1.413) finden wir

$$S_{\text{eff}}[\tilde{q}_n] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{M}{2} (\nu_n^2 + \omega^2 + \xi_n) |\tilde{q}_n|^2, \quad (1.428)$$

¹⁶ Eine Diskussion dieser Annahme anhand einer Zeitmittelung wurde in Abschnitt 1.3.1 geführt.

$$= \frac{M}{2} \omega^2 \tilde{q}_0^2 + \sum_{n=1}^{\infty} M(\nu_n^2 + \omega^2 + \xi_n) |\tilde{q}_n|^2. \quad (1.429)$$

Das Pfadintegralmaß zur Berechnung der Zustandssumme aus Gleichung (1.406) geht dabei in die Frequenzraum-Darstellung

$$\int \mathcal{D}q(\tau) \rightarrow \int \frac{d\tilde{q}_0}{\hbar\beta\sqrt{2\pi\hbar/M}} \prod_{n=1}^{\infty} \left[\int \frac{d\tilde{q}'_n d\tilde{q}''_n}{\pi\hbar/M\nu_n^2} \right] \quad (1.430)$$

über [1, 14]. Mit \tilde{q}'_n und \tilde{q}''_n bezeichnen wir den Real- und Imaginärteil der Variable \tilde{q}_n . Da der Pfad $q(\tau)$ reell ist, enthält der Gleichstromanteil \tilde{q}_0 keinen Imaginäranteil, was hier zu einer besonderen Behandlung führt. Die Zustandssumme der obigen effektiven Wirkung nimmt nach der Integration der Fourierkoeffizienten die einfache Form

$$Z = \frac{1}{\omega\hbar\beta} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n^2}{\nu_n^2 + \omega^2 + \xi_n} \quad (1.431)$$

an. Für den freien harmonischen Oszillator erhalten wir daraus sofort die Produktdarstellung

$$Z = \frac{1}{\omega\hbar\beta} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n^2}{\nu_n^2 + \omega^2} = \frac{1}{2 \sinh[\omega\hbar\beta/2]}. \quad (1.432)$$

Damit haben wir gezeigt, dass die Normierung des Integralmaß (1.430) in der Tat korrekt ist. Der klassische Limes der Zustandssumme (1.45) entsteht durch die Integration über die Komponente \tilde{q}_0 , während die Fluktuationen $\tilde{q}_n, \tilde{q}_n^*, n \geq 1$ mit verschwindendem Mittelwert die Quantenkorrekturen beschreiben. Im Grenzfall hoher Temperaturen ist die Integration über Imaginärzeit $d\tau$ auf den sehr kurzen Intervall $\hbar\beta$ beschränkt. Auf dieser Skala trägt nur die konstante Funktion q_0 zur klassischen Lösung bei, während Fluktuationen keine Rolle mehr spielen. Wir können diese Aussage etwas genauer fassen, indem wir das Produkt aus Gleichung (1.432), welches die quantenmechanischen Korrekturen zum klassischen Grenzfall beschreibt, in eine Reihe entwickeln,

$$\prod_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n^2}{\nu_n^2 + \omega^2} = \frac{\omega\hbar\beta/2}{\sinh[\omega\hbar\beta/2]} = 1 - \frac{(\omega\hbar\beta)^2}{24} + \mathcal{O}(\omega\hbar\beta)^4. \quad (1.433)$$

Als Bedingung für den klassischen Temperaturbereich finden wir somit

$$\omega\hbar\beta \ll 1. \quad (1.434)$$

In diesem Bereich verschindet die diskrete Natur der Energieeigenwerte und geht in die kontinuierliche Boltzmann-Verteilung über. Bei einem nichtharmonischen Potenzial $V(q)$ entspricht das harmonische Potenzial der quadratischen Entwicklung um das Extremum.

Zur Beschreibung des semiklassischen Verhaltens betrachten wir nun in Gleichung (1.432) den niederfrequenten Produktanteil mit den Frequenzen $\nu_n, n \leq N$ und den hochfrequenten Anteil mit den Frequenzen $\nu_n, n > N$,

$$Z = Z_{\text{nf}} Z_{\text{hf}}, \quad (1.435)$$

$$Z_{\text{nf}} = \frac{1}{\omega \hbar \beta} \prod_{n=1}^N \frac{\nu_n^2}{\nu_n^2 + \omega^2}, \quad (1.436)$$

$$Z_{\text{hf}} = \prod_{n=N+1}^{\infty} \frac{\nu_n^2}{\nu_n^2 + \omega^2}, \quad (1.437)$$

Beide Produkte lassen sich analytisch mithilfe der Gamma-Funktion darstellen [52]. Wir finden nach einigen Umformungen

$$Z_{\text{nf}} = \frac{1}{2 \sinh[\omega \hbar \beta / 2]} R_N^{-1}, \quad (1.438)$$

$$Z_{\text{hf}} = R_N = \frac{\Gamma[N+1 - i\omega \hbar \beta / (2\pi)]}{\Gamma[N+1]} \frac{\Gamma[N+1 + i\omega \hbar \beta / (2\pi)]}{\Gamma[N+1]}. \quad (1.439)$$

Im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ erhalten wir sofort mithilfe des asymptotischen Verhaltens der Gammafunktion [51, 52, 53],

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\Gamma[N+a]}{\Gamma[N]} = N^a + \mathcal{O}(N^{-1}), \quad (1.440)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} R_N = 1 \quad (1.441)$$

das Resultat (1.432). Für ein endliches N liefert die asymptotische Entwicklung

$$\frac{\Gamma[z+a]}{\Gamma[z+b]} = z^{a-b} \exp\left[\frac{X}{e^{a-b}}\right], \quad (1.442)$$

$$\begin{aligned} X &= \left(\frac{1}{2} - z\right) \left(\ln[1+a/z] - \ln[1+b/z]\right) \\ &\quad + a \ln[1+a/z] - b \ln[1+b/z] \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_{2n}}{2n(2n-1) z^{2n-1}} \left[(1+a/z)^{1-2n} - (1+b/z)^{1-2n}\right]. \end{aligned} \quad (1.443)$$

Mit B_{2n} werden dabei die sogenannten Bernoulli Nummern [51, 52, 53] bezeichnet. Die Reihe in der letzten Zeile besitzt den Konvergenzradius Null,

weswegen eine Auswertung nur asymptotisch möglich ist. Der gesamte Term $\exp\left[\frac{X}{e^a-b}\right]$ kann nun nach Potenzen $\frac{1}{z}$ entwickelt werden. Dabei findet man die im obigen Falle benötigte Entwicklung für R_N ,

$$R_N = \frac{\Gamma[N+1+i\alpha]}{\Gamma[N+1]} \frac{\Gamma[N+1-i\alpha]}{\Gamma[N+1]}, \quad \alpha = \frac{\omega\hbar\beta}{2\pi}, \quad (1.444)$$

$$= 1 - \frac{\alpha^2}{N+1} + \frac{1}{2} \frac{\alpha^2(\alpha^2-1)}{(N+1)^2} + \mathcal{O}(N^{-3}), \quad (1.445)$$

und entsprechend für die inverse Darstellung

$$R_N^{-1} = 1 + \frac{\alpha^2}{N+1} + \frac{1}{2} \frac{\alpha^2(\alpha^2+1)}{(N+1)^2} + \mathcal{O}(N^{-3}). \quad (1.446)$$

Der Fehler, welcher somit durch die Approximation der Zustandssumme durch Auslassen der hohen Frequenzen entsteht, wird durch

$$\delta Z = Z - \frac{1}{\omega\hbar\beta} \prod_{n=1}^N \frac{\nu_n^2}{\nu_n^2 + \omega^2}, \quad (1.447)$$

$$= \frac{1 - R_N^{-1}}{2 \sinh[\omega\hbar\beta/2]} = Z \left[\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2\pi} \right)^2 \frac{1}{N+1} + \mathcal{O}(N^{-2}) \right] \quad (1.448)$$

abgeschätzt. Daraus folgt, dass Frequenzen $\nu_n \gg \omega$ vernachlässigt werden können. Zu diesem Zwecke führen wir wieder eine Grenzfrequenz $\Lambda \gg \omega$ ein. In der Fourierdarstellung bedeutet dies, dass die Pfade im Imaginärzeitregime entsprechend Gleichung (1.112) geglättet werden,

$$\bar{q}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\hbar\beta}} \sum_n e^{i\nu_n\tau} \tilde{q}_n \Theta(\Lambda - |\nu_n|), \quad (1.449)$$

$$= \int_0^{\hbar\beta} d\sigma q(\sigma) \frac{\Lambda}{\pi} \frac{\sin[\Lambda(\sigma - \tau)]}{\Lambda(\sigma - \tau)}, \quad (1.450)$$

und zwar entsprechend Abschnitt 1.3.1 auf einer Zeitskala $\tau \approx \Lambda^{-1}$. Der klassische Fall entsprechend Gleichung (1.433), (1.434) wird durch $\Lambda^{-1} \gg \hbar\beta$ erzeugt. In diesem Falle beschreibt die geglättete Variable $\bar{q}(\tau)$ nur noch den Gleichstromanteil \tilde{q}_0 . Dieser Sachverhalt führt nun im Folgenden wieder dazu, dass wir die spektrale Dichte in einen niederfrequenten Anteil mit Frequenzen $\omega \leq \omega_T$ und einen hochfrequenten Anteil $\omega \geq \omega_T$ aufspalten können (vgl. Abbildung 1.2). Der hochfrequente Anteil der spektralen Dichte $J_{\text{hf}}(\omega)$ führt dabei in guter Näherung für den Bereich $\omega_T \gg \Lambda^{-1}$ zu einer Massenrenormierung analog zu Gleichung (1.124) und entspricht daher dem klassischen Ergebnis, wobei nun aber für die Grenzfrequenz die Temperaturabhängigkeit beachtet werden muss.

Entgegen dem klassischen Fall ist hier von fundamentaler Bedeutung, dass die Cutoff-Frequenz Λ nun von der Temperatur $1/\beta$ abhängt.

Für den Grenzfall Temperatur $T = 0$ ist die gerade vorgeführte Analyse nicht angepaßt, da hier der Restterm R_N für große N nicht gegen Null strebt, da in diesem Limes $\beta \rightarrow \infty$ alle Frequenzen mit dem selben Gewicht in die Zustandssumme eingehen, wie man direkt auch aus dem Term R_N , Gleichung (1.444), abliest. Daher betrachten wir diesen Fall getrennt; wir erhalten mit der Fouriertransformierten $\tilde{q}(\nu)$ im kontinuierlichen Fall

$$\lim_{\hbar\beta \rightarrow \infty} \tilde{q}_n = \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\beta}} \tilde{q}(\nu), \quad \tilde{q}(\nu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{-i\nu\tau} q(\tau). \quad (1.451)$$

Dadurch geht die Summe (1.411), welche die Badankopplung repräsentiert, in das Integral

$$\frac{1}{2} M \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \xi(\nu) |\tilde{q}(\nu)|^2 \quad (1.452)$$

über. Im strikt ohmschen Grenzfall $J(\omega) = \eta\omega$ erhalten wir

$$\xi(\nu) = \frac{2\eta}{M\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\nu^2}{\nu^2 + \omega^2} = \frac{2\eta|\nu|}{M}. \quad (1.453)$$

Der kinetische Anteil der Systemwirkung besitzt die Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \frac{1}{2} M \dot{q}^2 = \frac{1}{2} M \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \nu^2 |\tilde{q}(\nu)|^2. \quad (1.454)$$

Die Wirkung $S[q]/\hbar$ besitzt damit die Form

$$\frac{S[q]}{\hbar} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \left[\frac{M\nu^2}{\hbar} + \frac{2\eta|\nu|}{\hbar} \right] |\tilde{q}(\nu)|^2 \quad (1.455)$$

wobei ein Potenzial $V(q)$ nicht berücksichtigt wurde. In dieser Form entspricht das Resultat dem Ergebnis in Literatur [48], sofern man die dort verwendete Skala

$$\Lambda = \frac{\hbar}{M} \left(\frac{2\pi}{q_0} \right)^2, \quad (1.456)$$

$$\frac{\alpha}{2\pi} = \frac{\eta}{\hbar} \left(\frac{2\pi}{q_0} \right)^2 \quad (1.457)$$

rückübersetzt und den Skalierungsfaktor der dort verwendeten Pfadvariablen $(2\pi/q_0)^2$ weglässt. In dieser Form kann Λ als effektive Cutoff-Frequenz betrachtet werden, da für Frequenzen $\nu \gg \Lambda$ die kinetische Energie weit stärker anwächst als die Energie durch den Badkopplungsterm und somit in der Zustandssumme stark unterdrückt wird. Dies wird in der obigen Literatur durch eine Renormierungsgruppenanalyse bestätigt und entspricht dem Ergebnis im klassischen Fall in Abschnitt 1.3.1.

1.4.12 Imaginärzeit-Erwartungswerte

Für die generierende Funktion von Erwartungswerten (1.388) erhalten wir nach der gleichen Vorgehensweise mit der Transformation

$$x_\alpha(\tau) = c_\alpha K_\alpha^{-1}(\tau, \sigma) \cdot \left[q(\sigma) - \frac{\hbar b_\alpha(\sigma)}{c_\alpha} \right] - y_\alpha(\tau) \quad (1.458)$$

für das freie Bad

$$Z_R[b] = Z_R[0] \exp \left[\frac{\hbar}{2} \sum_\alpha b_\alpha(\tau) \cdot K_\alpha^{-1}(\tau, \tau') \cdot b_\alpha(\tau') \right] \quad (1.459)$$

und für den Fall des an das System gekoppelte Bad

$$\begin{aligned} Z_B[b] = Z_B[0] \exp & \left[\frac{\hbar}{2} \sum_\alpha \left(\frac{q(\tau)}{\hbar} - \frac{b_\alpha(\tau)}{c_\alpha} \right) \cdot c_\alpha^2 K_\alpha^{-1}(\tau, \tau') \cdot \left(\frac{q(\tau')}{\hbar} - \frac{b_\alpha(\tau')}{c_\alpha} \right) \right. \\ & \left. - \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{2m_\alpha \omega_\alpha^2} q(\tau) \cdot \delta(\tau - \tau') \cdot q(\tau') \right]. \end{aligned} \quad (1.460)$$

Somit nimmt der Erwartungswert entsprechend Definition (1.384) für x_α und damit die stochastische Funktion $X(\tau) = \sum_\alpha c_\alpha x_\alpha(\tau)$ die folgende Form an:

$$\langle x_\alpha(\tau) \rangle_R = 0, \quad (1.461)$$

$$\langle x_\alpha(\tau) \rangle_B = c_\alpha K_\alpha^{-1}(\tau, \tau') \cdot q(\tau'), \quad (1.462)$$

$$\langle X(\tau) \rangle_B = \sum_\alpha c_\alpha^2 K_\alpha^{-1}(\tau, \tau') \cdot q(\tau') = K(\tau, \tau') \cdot q(\tau'). \quad (1.463)$$

Wie im klassischen Fall (1.53) können wir wieder die verschobene stochastische Kraft $\xi(t)$ definieren, indem wir den Erwartungswert von X^h subtrahieren, also

$$\xi(\tau) = X(\tau) - \langle X(\tau) \rangle_B, \quad (1.464)$$

$$X(\tau) = \xi(\tau) + \langle X(\tau) \rangle_B. \quad (1.465)$$

Für die Imaginärzeit 2-Punkt Korrelationsfunktionen erhalten wir

$$\langle x_\alpha(\tau) x_{\alpha'}(\tau') \rangle_R = \delta_{\alpha, \alpha'} \hbar K_\alpha^{-1}(\tau, \tau'), \quad (1.466)$$

$$\langle X(\tau) X(\tau') \rangle_R = \langle \xi(\tau) \xi(\tau') \rangle_B = \hbar K(\tau, \tau'), \quad (1.467)$$

$$\begin{aligned} \langle x_\alpha(\tau) x_{\alpha'}(\tau') \rangle_B &= \delta_{\alpha, \alpha'} \hbar K_\alpha^{-1}(\tau, \tau') \\ &+ \left(c_\alpha K_\alpha^{-1}(\tau, \tau') \cdot q(\tau') \right) \left(c_{\alpha'} K_{\alpha'}^{-1}(\tau', \tau) \cdot q(\tau) \right) \end{aligned} \quad (1.468)$$

$$\langle \xi(\tau) \xi(\tau') \rangle_B = \langle X(\tau) X(\tau') \rangle_B - \langle X(\tau) \rangle_B \langle X(\tau') \rangle_B, \quad (1.469)$$

$$\langle X(\tau) X(\tau') \rangle_R = \langle \xi(\tau) \xi(\tau') \rangle_R + \langle X(\tau) \rangle_R \langle X(\tau') \rangle_R \quad (1.470)$$

Wir erhalten damit die quantenmechanischen Imaginärzeit-Erwartungswerte, welche der Form nach genau den klassischen Erwartungswerten aus Abschnitt 1.2.2 entsprechen und im klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ und dem Übergang von Imaginärzeit zu Realzeit durch $\tau \rightarrow it$ genau reproduziert werden; so erhalten wir beispielsweise für den Sektor $\tau - \tau' \in [-\hbar\beta, \hbar\beta]$ aus (1.422)

$$\begin{aligned} \langle \hat{T}X(\tau)X(\tau') \rangle_{\text{R}} &= \hbar K(|\tau - \tau'|) \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int d\omega J(\omega) \left[\coth[\omega\hbar\beta/2] \cosh[\omega(\tau - \tau')] - \sinh[\omega|\tau - \tau'|] \right]. \end{aligned}$$

Im klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ bekommen wir aus der letzten Gleichung das schon bekannte Dissipations-Fluktuations-Theorem (1.55) im Imaginärzeit-formalismus,

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle X(\tau)X(\tau') \rangle = \frac{2}{\pi\beta} \int d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cosh[\omega(\tau - \tau')]. \quad (1.471)$$

1.4.13 Nichtlokaler Anteil der Kopplung

Wegen der Eigenschaft von $k(\tau, \tau')$ einer verschwindenden Null-Mode, wie man aus Gleichung (1.405) abliest, also

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau k(\tau, \tau') = M\xi_0 = 0 \quad (1.472)$$

ist in der Funktion $k(\tau, \tau')$ kein lokaler Anteil (Diagonalanteil) der Form $f(\tau) : \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta}$ enthalten, welcher auf die lokale Form $\int d\tau f(\tau)q^2(\tau)$ des Influenzfunktionals $\mathcal{F}[q]$ in Gleichung (1.408) führen und damit zu einer Renormierung der Systemwirkung beitragen würde¹⁷. Damit lässt sich nun aber das Influenzfunktional $\mathcal{F}[q]$ auch als Differenz umschreiben,

$$\mathcal{F}[q] = \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} q(\tau) \cdot k(\tau, \tau') \cdot q(\tau') \right], \quad (1.473)$$

$$\begin{aligned} &= \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int d\tau d\tau' \{ -k(\tau, \tau') + \kappa : \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta} \} \right. \\ &\quad \left. \times \left\{ \frac{q(\tau) - q(\tau')}{2} \right\}^2 \right], \quad \kappa \in \mathbb{C} \text{ beliebig,} \end{aligned} \quad (1.474)$$

wobei in der zweiten Zeile gerade die Nichtlokalität von $q(\tau) - q(\tau')$ genutzt wurde, um einen beliebigen lokalen Term $\propto \delta(\tau - \tau')$ hinzuzufügen. Damit kann man in der zweiten Zeile als Integralkern gerade D_α aus Gleichung

¹⁷ Diese Nichtlokalität wird gerade durch den Term H_{T} aus Gleichung (1.7) erreicht, wie man direkt aus Gleichung (1.403) ablesen kann.

(1.398) verwenden, welcher sich bequem mit Hilfe der spektralen Dichte $J(\omega)$ darstellen lässt, wie gleich gezeigt wird. Zusammenfassend kann man also sagen, dass der Term H_T in Gleichung (1.4) notwendig ist, um eine Renormierung der Systemwirkung zu vermeiden. Beschränkt man sich dann im Folgenden auf die nichtlokale Darstellung des Influenzfunktionals, welche ja nur dann erlaubt ist, wenn die Bedingung (1.472) eingehalten wurde, kann der Term, welcher von H_T herrührt, vernachlässigt werden, wodurch der Integralkern D_ω eine einfache Darstellung besitzt.

Für die Zustandssumme erhalten wir damit zusammenfassend

$$Z = \oint \mathcal{D}q e^{-S_s^{(E)}/\hbar} \mathcal{F}[q], \quad (1.475)$$

$$\mathcal{F}[q] = \exp\left[-\frac{1}{2\hbar} q(\tau) \cdot k(\tau, \tau') \cdot q(\tau')\right], \quad (1.476)$$

$$\mathcal{F}[q] = \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau d\tau' \left\{ \frac{q(\tau) - q(\tau')}{2} \right\}^2 K(\tau - \tau')\right], \quad (1.477)$$

mit der Pfadwechselwirkung $K(\sigma)$ aus Gleichung (1.422) in der nichtlokalen Darstellung. Wenn die Kopplung an das Bad ausgeschaltet wird, also $J(\omega)$ gegen Null geht, strebt das Influenzfunktional $\mathcal{F}[q]$ gerade gegen 1, wodurch wir wieder zum Pfadintegral des ungekoppelten Systems zurückkommen.

Für den Fall, dass die spektrale Dichte wieder in der Form $J(\omega) = M\gamma\omega^s e^{-\omega\tau_c}$ vorliegt, kann das Integral in Gleichung (1.422) ausgeführt werden und man erhält¹⁸

$$K(\sigma) = \frac{2M\gamma}{\pi} \frac{\Gamma[1+s]}{(\hbar\beta)^{1+s}} \left[\zeta\left(1+s, 1 + \frac{\tau_c - \sigma}{\hbar\beta}\right) + \zeta\left(1+s, \frac{\tau_c + \sigma}{\hbar\beta}\right) \right], \quad (1.478)$$

wobei $\zeta(s, x) = \sum_{k=0}^{\infty} (k+x)^{-s}$ für $\text{Re}[s] > 1$ die Riemannsche Zeta-Funktion darstellt. Für den Fall $s \in \mathbb{N}$, $s \geq 2$ lässt sich die Zeta-Funktion durch die $s-1$ -te Ableitung der Digamma-Funktion ausdrücken, da hier die Reihenentwicklung die Form $\psi^{(1)}(x) = \zeta[2, x]$ besitzt.

Im Limes $T \rightarrow 0$ erhalten wir für $K(\sigma)$ aus (1.478) das einfache Resultat

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} K(\sigma) = \frac{2M\gamma}{\pi} \frac{\Gamma[1+s]}{(\tau_c + \sigma)^{1+s}} \quad (1.479)$$

Im klassischen Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ geht die Imaginärzeit-Korrelationsfunktion (1.422) in die klassische Form (1.471) über, wie wir weiter oben schon gezeigt haben. Im Grenzfall einer ohmschen spektralen Dichte im sogenannten

¹⁸Die Integration wird in Abschnitt 2.2.3 genauer behandelt.

Skalen-Limes¹⁹ mit $\tau_c \rightarrow 0$ ergibt sich das besonders einfache Ergebnis

$$\lim_{\tau_c \rightarrow 0} K(\sigma) = \frac{2\pi M\gamma}{(\hbar\beta)^2 \sin^2 \left[\frac{\pi\sigma}{\hbar\beta} \right]}. \quad (1.480)$$

Wegen der Einschränkung $\sigma \neq 0$ entspricht das obige Ergebnis $-k(\tau, \tau')$ aus Gleichung (1.418). Dieser Zusammenhang steht in Übereinstimmung mit Gleichung (1.421). Anstatt der Summation in Gleichung (1.398) über alle $m \in \mathbb{Z}$ kann die Integration über $d\tau$ oder $d\tau'$ in Gleichung (1.477) von $-\infty$ nach ∞ erfolgen und man erhält für das obige Influenzfunktional

$$\mathcal{F}[q] = \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \left(\frac{q(\tau) - q(\tau')}{2} \right)^2 \frac{1}{\pi} \int d\omega J(\omega) e^{-\omega|\tau - \tau'|} \right]. \quad (1.481)$$

Für den Fall, dass die spektrale Dichte $J(\omega)$ wieder in der obigen Form vorliegt, können wir die Integration über ω durchführen,

$$\int_0^{\infty} d\omega \omega^s e^{-\omega\tau_c} e^{-\omega|\tau - \tau'|} = \frac{\Gamma[1 + s]}{(\tau_c + |\tau - \tau'|)^{1+s}}. \quad (1.482)$$

Dieses Integral ist gerade der Grenzfall $T \rightarrow 0$ von Gleichung (1.422). Somit bekommen wir die formal einfache Darstellung

$$\mathcal{F}[q] = \exp \left[-\frac{M\gamma \Gamma[1 + s]}{4\pi\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \frac{(q(\tau) - q(\tau'))^2}{(\tau_c + |\tau - \tau'|)^{1+s}} \right], \quad (1.483)$$

welche im ohmschen Skalen-Limes die besonders einfache Form

$$\mathcal{F}[q] = \exp \left[-\frac{M\gamma}{4\pi\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \left(\frac{q(\tau) - q(\tau')}{\tau - \tau'} \right)^2 \right] \quad (1.484)$$

annimmt.

Zusammenfassung

Auf einem etwas abstrakteren Level fassen wir nochmals die wichtigsten Schritte dieses Abschnitts zusammen: Begonnen haben wir mit der Zustandssumme des Gesamtsystems (1.378) mit folgender Form entsprechend (1.381),

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{Z_B} \oint \mathcal{D}q \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left(S_S[q] + \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} q(\tau) \cdot q(\tau) \right) \right] \quad (1.485) \\ &\times \prod_{\alpha} \left[\oint \mathcal{D}x_{\alpha} \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} x_{\alpha}(\tau) \cdot K_{\alpha}(\tau, \tau') \cdot x_{\alpha}(\tau') + \frac{1}{\hbar} c_{\alpha} x_{\alpha}(\tau) \cdot q(\tau) \right] \right]. \end{aligned}$$

¹⁹ Siehe dazu auch die Bemerkungen bei der Abbildung des Bades im Skalen-Limes auf das Gauß-Modell, welches invariant unter konformen Abbildungen ist und dadurch keine Skala mehr besitzt.

Die gaußsche Integration über \mathbf{x} kann ausgeführt werden und wir erhalten die Zustandssumme mit der effektiven Wirkung S_{eff} zu

$$Z = \oint \mathcal{D}q \exp \left[- S_{\text{eff}}[q]/\hbar \right], \quad (1.486)$$

$$S_{\text{eff}}[q] = S_{\text{S}}[q] + \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} q(\tau) \cdot q(\tau) - \frac{1}{2} q(\tau) \cdot K(|\tau, \tau'|) \cdot q(\tau') \quad (1.487)$$

$$= S_{\text{S}}[q] + \frac{1}{2} q(\tau) \cdot k(|\tau, \tau'|) \cdot q(\tau'). \quad (1.488)$$

Der Diagonalanteil von $K(\tau, \tau')$ entspricht nun gerade dem Verschiebungsterm aus H_{T} , wodurch sichergestellt wird, dass keine Potenzialrenormierung des Systems entsteht, was ab Gleichung (1.472) näher betrachtet wurde. Mithilfe der spektralen Dichte lässt sich dieser Term entsprechend Abschnitt 1.3 folgendermaßen darstellen,

$$\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} = M\gamma(0). \quad (1.489)$$

Die Kerne $K(\tau)$ und $k(\tau)$ wurden in Gleichung (1.422) und (1.424) angegeben. Damit erhalten wir die effektive Systemwirkung, welche nach der Ausintegration der Badfreiheitsgrade einen nichtlokalen Anteil enthält.

Eine Form, welche die Analogie zum klassischen Fall wieder nahe legt, werden wir weiter unten in Kapitel 1.4.19 betrachten.

1.4.14 Reihenentwicklung nichtquadratischer Terme

Da der kinetische Term des Systems ebenfalls quadratisch in q ist, können wir nun den Potenzialterm der Wirkung $\exp[\int d\tau V(q)]$ durch eine Potenzreihe in q darstellen, sofern $V(q)$ durch ein Polynom in q dargestellt werden kann, und erhalten eine Störungsreihe für die erzeugende Zustandssumme von Erwartungswerten der Systemvariable q aus (1.475)

$$\begin{aligned} Z[b] &= \oint_{q(0)=q(\hbar\beta)} \mathcal{D}q \exp \left[- \frac{1}{2\hbar} q(\tau) \cdot O(\tau, \tau') \cdot q(\tau') + b(\tau) \cdot q(\tau) \right] \\ &\quad \times \exp \left[- \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau V(q(\tau)) \right], \end{aligned} \quad (1.490)$$

$$= Z[0] \exp \left[- \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau V \left(\partial/\partial b(\tau) \right) \right] \exp \left[\frac{1}{2} b(\tau) \cdot O^{-1}(\tau, \tau') \cdot b(\tau') \right], \quad (1.491)$$

welche durch den linearen Term $b(\tau)$ im Exponenten die erzeugende Funktion für Erwartungswerte von $q(\tau)$ darstellt. $Z[0]$ ist dabei die Zustandssumme für $b = 0$ entsprechend der Entwicklung (1.281).

Der Term $\exp[V(\partial/\partial b)]$ kann nun in eine Reihe entwickelt werden,

$$\frac{Z[b]}{Z[0]} = \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau V \left(\frac{\partial}{\partial b(\tau)} \right) + \dots \right\} \exp \left[\frac{1}{2} b(\tau) \cdot O^{-1}(\tau, \tau') \cdot b(\tau') \right]. \quad (1.492)$$

Der Integralkern $O(\tau, \tau')$ setzt sich nun aus dem Anteil des Systems $H_S = P^2/(2M) + M\Omega^2 q^2/2$ und dem Integralkern des Influenzfunktionals aus Gleichung (1.403) zusammen,

$$O(\tau, \tau') = : \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta} M \{ -\partial_{\tau'}^2 + \Omega^2 \} + k(\tau - \tau'). \quad (1.493)$$

Für den inversen Integralkern verwenden wir wieder einen Fourierreihenansatz der Form

$$O^{-1}(\tau, \tau') = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_m e^{i\nu_m(\tau - \tau')} \tilde{O}^{-1}(\nu_m). \quad (1.494)$$

Die Integration über τ' in der Definition für den inversen Kern $O^{-1}(\tau', \tau'')$

$$O(\tau, \tau') \cdot O^{-1}(\tau', \tau'') = : \delta(\tau, \tau'') :_{\hbar\beta} \quad (1.495)$$

kann nun durchgeführt werden und wir erhalten für die Fourierkoeffizienten von O^{-1}

$$\tilde{O}^{-1}(\nu_m) = \frac{1}{M(\nu_m^2 + \Omega^2) + \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} \frac{\nu_m^2}{\nu_m^2 + \omega_{\alpha}^2}}, \quad (1.496)$$

$$= \frac{1}{M(\nu_m^2 + \Omega^2 + \xi_m)}, \quad (1.497)$$

wobei wir die Koeffizienten ξ_m aus Gleichung (1.405) verwendet haben und Ω den quadratischen Entwicklungskoeffizienten in $V(q)$ beschreibt. Im Falle der strikt ohmschen spektralen Dichte $J(\omega) = \alpha\omega$ geht ξ_n in $2\alpha|\nu_n|/M$ über, wie in Gleichung (1.415) gezeigt wurde.

Die Eigenwerte λ_m des Operators O^{-1} können wir direkt aus der Darstellung (1.494) ablesen, da O^{-1} diagonal in der verwendeten Fourier-Darstellung ist und daher die Eigenwerte den Diagonalelementen $\tilde{O}^{-1}(\nu_m)$ entsprechen,

$$\langle \tau | O | \tau' \rangle = O^{-1}(\tau, \tau') = \sum_m \langle \tau | \nu_m \rangle \tilde{O}^{-1}(\nu_m) \langle \nu_m | \tau' \rangle, \quad (1.498)$$

$$\langle \tau | \nu_m \rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar\beta}} e^{i\nu_m\tau}, \quad \langle \nu_n | \nu_m \rangle = \delta_{n,m}, \quad (1.499)$$

$$O^{-1} | \nu_m \rangle = \tilde{O}^{-1}(\nu_m) | \nu_m \rangle. \quad (1.500)$$

Da die Eigenwerte (1.496) symmetrisch sind, d.h. $\lambda_m = \lambda_{-m}$ gilt, besitzt der Integralkern O^{-1} eine reelle Darstellung.

Für die Zustandssumme $Z[b=0]$ benötigen wir die Eigenwerte zu reellen Eigenfunktionen $u_m(\tau)$ mit $u_m(0) = u_m(\hbar\beta)$. Dies sind gerade die zweifach entartete und normierte Funktionen

$$u_m(\tau) = \sqrt{\frac{2}{\hbar\beta}} \left\{ c'_m \cos[\nu_m \tau] - c''_m \sin[\nu_m \tau] \right\}, \quad m > 0, \quad (1.501)$$

$$\text{mit} \quad |c_m|^2 = c_m'^2 + c_m''^2 = 1 \quad (1.502)$$

und die nichtentartete Eigenfunktion

$$u_0(\tau) = \sqrt{\frac{1}{\hbar\beta}} \quad (1.503)$$

mit den dazugehörigen Eigenwerten

$$\lambda_m = M(\nu_m^2 + \Omega^2 + \xi_m), \quad m \in \mathbb{N}. \quad (1.504)$$

Zur Berechnung von $Z[0]$ verwenden wir nun wie in Abschnitt 1.4.9 diskutiert die Zustandssumme des harmonischen Oszillators als Referenz. Mit dieser Wahl erhalten wir den Ausdruck

$$Z[0] = \left[\prod_{l=1}^{\infty} \frac{\nu_l^2 + \Omega^2}{\nu_l^2 + \Omega^2 + \xi_l} \right] \frac{1}{2 \sinh[\Omega \hbar \beta / 2]}. \quad (1.505)$$

Wegen $\xi_0 = 0$ ergibt der Faktor $l = 0$ des obigen Produktes gerade 1 und kann ignoriert werden. Weiterhin bekommen wir das Quadrat der Wurzel einer Determinante und daher die Potenz 1 in der obigen Gleichung, da alle Eigenwerte mit $l \neq 0$ zweifach auftreten. Mit der Produktdarstellung der Zustandssumme des harmonischen Oszillators

$$\frac{1}{2 \sinh[\Omega \hbar \beta / 2]} = \frac{1}{\Omega \hbar \beta} \prod_{l=1}^{\infty} \frac{\nu_l^2}{\nu_l^2 + \Omega^2} \quad (1.506)$$

können wir Gleichung (1.505) folgendermaßen darstellen,

$$Z[0] = \frac{1}{\Omega \hbar \beta} \prod_{l=1}^{\infty} \frac{\nu_l^2}{\nu_l^2 + \Omega^2 + \xi_l}. \quad (1.507)$$

Dies entspricht genau der weiter oben schon gefundenen Form (1.431) aus der Fourierdarstellung des Influenzfunktionalen und der Systemwirkung. Da $(\Omega \hbar \beta)^{-1}$ der klassischen Zustandssumme des harmonischen Oszillators entspricht, beschreibt das folgende Produkt in Gleichung (1.507) die Quantenkorrekturen zu $Z[0]$. Der Koeffizient ξ_l ist über die spektrale Dichte in Gleichung (1.413) definiert.

Als Sonderfälle sind im obigen Modell mit Potenzial $V = 0$ und damit der Zustandssumme

$$Z[b] = Z[0] \exp \left[\frac{1}{2} b(\tau) \cdot O^{-1}(\tau, \tau') \cdot b(\tau') \right]. \quad (1.508)$$

enthalten:

- Der gedämpfte harmonische Oszillator
- Der ungedämpfte harmonische Oszillator mit ($\xi_n = 0$).
In diesem Falle erhalten wir für die Zustandssumme sofort den wohl-bekanntesten Ausdruck $Z[0] = (2 \sinh [\hbar\beta\Omega/2])^{-1}$
- Die Brownsche Bewegung mit ($\Omega = 0$)

In allen Fällen erhalten wir die Imaginärzeit-Erwartungswerte

$$\langle q(\tau) \rangle = 0, \quad (1.509)$$

$$\langle q(\tau)q(\tau') \rangle = \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta^2 Z[b]}{\delta b(\tau) \delta b(\tau')} \Big|_{b=0} = O^{-1}(\tau, \tau'), \quad (1.510)$$

$$= \frac{1}{M\hbar\beta} \sum_m \frac{e^{i\nu_m(\tau-\tau')}}{\nu_m^2 + \Omega^2 + \xi_m}. \quad (1.511)$$

Der Fall, dass eine lineare Kraft F an die Systemkoordinate koppelt, kann dadurch realisiert werden, dass der Erwartungswert (1.510) nicht an der Stelle $b = 0$, sondern an der Stelle $b = F$ ausgewertet wird. Dann bekommt auch der Erwartungswert der Systemkoordinate q einen nichtverschwindenden Term der Form

$$\langle q(\tau) \rangle = \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta Z[F]}{\delta F(\tau)} \quad (1.512)$$

$$= O^{-1}(\tau, \tau') \cdot F(\tau') \exp \left[\frac{1}{2} F(\tau) \cdot O^{-1}(\tau, \tau') \cdot F(\tau') \right], \quad (1.513)$$

und für die Zweipunkt-Korrelationsfunktion

$$\langle q(\tau)q(\tau') \rangle = \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta^2 Z[F]}{\delta F(\tau) \delta F(\tau')} \quad (1.514)$$

$$= \left[: \delta(\tau, \tau') :_{\hbar\beta} O^{-1}(\tau, \tau') + \{ O^{-1}(\tau, \sigma) \cdot F(\sigma) \} \{ O^{-1}(\tau', \sigma') \cdot F(\sigma') \} \right] \\ \times \exp \left[\frac{1}{2} F(\tau) \cdot O^{-1}(\tau, \tau') \cdot F(\tau') \right]. \quad (1.515)$$

Ausgehend von Gleichung (1.492) lassen sich nun alle relevanten thermodynamischen Größen des zu untersuchenden Systems ableiten. Exemplarisch

wollen wir die Grundzustandsenergie des gedämpften harmonischen Oszillators (1.508) betrachten, welcher durch die Freie Energie im Limes $T \rightarrow 0$ gegeben ist. Wir erhalten für die Freie Energie $F = -1/\beta \ln Z[0] \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} E_0$ mit Gleichung (1.507) den Ausdruck

$$F = \frac{1}{\beta} \ln [\Omega \hbar \beta] + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^{\infty} \ln \left[1 + \frac{\Omega^2 + \xi_l}{\nu_l^2} \right]. \quad (1.516)$$

Der erste Term geht im Limes $\beta \rightarrow \infty$ gegen Null, während die Summe durch ein Integral mit Maß $d\nu = \lim_{\beta \rightarrow \infty} 2\pi/(\hbar\beta)$ ersetzt werden kann. Mit der Taylorentwicklung von $\ln(x + \epsilon) \approx \ln(x) + \epsilon/x + \mathcal{O}(\epsilon/x)^2$ erhalten wir für die Grundzustandsenergie

$$E_0 = \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^{\infty} d\nu \ln \left[1 + \frac{\Omega^2}{\nu^2} \right] + \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^{\infty} d\nu \frac{\xi(\nu)}{\nu^2 + \Omega^2}. \quad (1.517)$$

Die obige Entwicklung des Logarithmus ist vertretbar, sofern $\epsilon/x = \xi_l/(\nu_l^2 + \Omega^2) \ll 1$ gilt. Diesen Term können wir nun wie folgt abschätzen,

$$\frac{\xi(\nu)}{\nu^2 + \Omega^2} = \frac{1}{M} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} \frac{1}{\nu^2 + \omega_{\alpha}^2} \frac{\nu^2}{\nu^2 + \Omega^2} \quad (1.518)$$

$$= \frac{\nu^2}{\nu^2 + \Omega^2} \frac{2}{M\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega(\nu^2 + \omega^2)}. \quad (1.519)$$

Während der erste Term zwischen Null und Eins liegt, hängt das Integral von der speziellen Wahl des Bades, d.h. von der Form der spektralen Dichte $J(\omega)$ ab. Unter Verwendung der Darstellung aus Gleichung (1.90) lässt sich das Integral explizit ausführen. Im Grenzfall $\tau_c \rightarrow 0$ erhalten wir das einfache Ergebnis für $0 \leq s < 2$

$$\frac{\nu^2}{\nu^2 + \Omega^2} \frac{2}{M\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{\alpha \omega^s}{\omega(\nu^2 + \omega^2)} = \frac{\alpha}{M \sin[\pi s/2]} \frac{\nu^s}{(\nu^2 + \Omega^2)}, \quad (1.520)$$

welches außerdem eine obere Schranke darstellt, da der Faktor $\exp[-\omega\tau_c]$ mit $\tau_c > 0$ immer zu einem kleineren Wert des Integrals (1.519) führt. Sofern also s nicht im Bereich 0 oder 2 liegt, liefert die obige Näherung des Logarithmus sinnvolle Werte. Das Maximum der obigen Abschätzung in Abhängigkeit von ν finden wir für positive Werte bei $\nu = \Omega \sqrt{s/(2-s)}$. Dies liefert uns nun schlußendlich einen oberen Grenzwert

$$\frac{\xi(\nu)}{\nu^2 + \Omega^2} \leq \frac{\alpha \Omega^{s-2}}{M \sin[\pi s/2]} \frac{s-2}{2} \left(\frac{s}{2-s} \right)^{s/2} \quad (1.521)$$

in Abhängigkeit von s mit einem Minimum an der Stelle $s = 1$.

Wir berechnen nun die Korrektur des untersten Energieniveaus eines harmonischen Oszillators durch das Ankoppeln eines Bades definiert durch die spektrale Dichte $J(\omega)$. Das erste Integral in Gleichung (1.517) ergibt $\hbar\Omega/2$, also gerade die Grundzustandsenergie des freien harmonischen Oszillators, während das zweite Integral die Energieverschiebung ΔE_0 durch die Ankopplung an das Bad über $\xi(\nu)$ liefert. Indem wir das Integral über $d\nu$ ausführen, erhalten wir

$$E_0 = \frac{\hbar\Omega}{2} + \frac{\hbar}{2M\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \frac{1}{\omega + \Omega}. \quad (1.522)$$

Im Falle einer spektralen Dichte der Form (1.90) erhalten wir eine Energiekorrektur

$$\frac{\Delta E_0}{E_0} = \frac{\alpha}{M} \frac{\Omega^{s-2}}{\sin[\pi s]} g(\Omega\tau_c, s), \quad (1.523)$$

$$g(\Omega\tau_c, s) = \frac{\sin[\pi s]}{\pi} \Gamma[s] \Gamma[1-s, \Omega\tau_c] \exp[\Omega\tau_c]. \quad (1.524)$$

Dabei haben wir die Notation $\Gamma[1-a, x] = \int_x^\infty dt t^{-a} e^{-t}$ für die unvollständige Gamma-Funktion verwendet [51]. Im Limes $x \rightarrow 0$ geht $\Gamma[1-a, x]$ in die gewöhnliche Gamma-Funktion $\Gamma[1-a]$ über. Der Term $g(\Omega\tau_c, s)$ beinhaltet die Korrektur durch einen endlichen Frequenz-Cutoff τ_c . Im Grenzfall $\tau_c \rightarrow 0$ geht $g(\Omega\tau_c, s)$ gegen Eins und wir bekommen das einfache Ergebnis

$$\frac{\Delta E_0}{E_0} = \frac{\alpha}{M} \frac{\Omega^{s-2}}{\sin[\pi s]}. \quad (1.525)$$

Zur genaueren Betrachtung entwickeln wir die unvollständige Gammafunktion um den Wert für $\Omega\tau_c = 0$ herum. Wir erhalten dadurch für $g(\Omega\tau_c, s)$ die Reihendarstellung [51]

$$g(\Omega\tau_c, s) = 1 - \frac{e^{-\Omega\tau_c}}{\Gamma[1-s]} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!(1-s+n)} (\Omega\tau_c)^{1-s+n}. \quad (1.526)$$

Im Grenzfall $\tau_c \rightarrow 0$ finden wir somit

$$\lim_{\tau_c \rightarrow 0} g(\Omega\tau_c, s) = 1 - \frac{(\Omega\tau_c)^{1-s}}{\Gamma[2-s]}. \quad (1.527)$$

Dieser Ausdruck divergiert für $s > 1$ im Grenzfall $\tau_c \rightarrow 0$.

Bei Verwendung einer spektralen Dichte mit Drude-Cutoff (1.98) nimmt die Mode ξ_n aus Gleichung (1.413) die einfache algebraische Form

$$\xi_l = \frac{\alpha}{M} \frac{|\nu_l|}{1 + \nu_l \tau_D} \quad (1.528)$$

an. Dadurch kann der Ausdruck (1.507) für die Zustandssumme in die Form

$$Z[0] = \frac{1}{\Omega \hbar \beta} \prod_{l=1}^{\infty} \frac{\nu_l}{\nu_l + \lambda_1} \frac{\nu_l}{\nu_l + \lambda_2} \frac{\nu_l}{\nu_l + \lambda_3} \frac{\nu_l + \omega_D}{\nu_l}. \quad (1.529)$$

gebracht werden, wobei λ_i , $i \in \{1, 2, 3\}$ die 3 Wurzeln der kubischen Gleichung

$$-\lambda^3 + \lambda^2 \omega_D - \lambda(\Omega^2 + \alpha \omega_D/M) + \Omega^2 \omega_D = 0 \quad (1.530)$$

repräsentieren, und $\omega_D = \tau_D^{-1}$ die Cutoff-Frequenz darstellt. Mithilfe der Produktdarstellung der Gamma-Funktion [51]

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^z}{z} \prod_{l=1}^n \frac{l}{l+z}, \quad \text{Re}[z] > 0 \quad (1.531)$$

bekommen wir einen analytisch exakten Ausdruck für die Zustandssumme [1],

$$\begin{aligned} Z[0] &= \frac{\Omega}{\hbar \beta} \frac{\Gamma(\lambda_1/\nu_1) \Gamma(\lambda_2/\nu_1) \Gamma(\lambda_3/\nu_1)}{\Gamma(\omega_D/\nu_1)} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^{\frac{\omega_D - (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)}{\nu_1}} \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}{\omega_D \nu_1^2} \\ &= \frac{\Omega \hbar \beta}{(2\pi)^2} \frac{\Gamma(\lambda_1/\nu_1) \Gamma(\lambda_2/\nu_1) \Gamma(\lambda_3/\nu_1)}{\Gamma(\omega_D/\nu_1)}. \end{aligned} \quad (1.532)$$

Hierbei haben wir die Vieta-Relationen

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = \omega_D, \quad (1.533)$$

$$\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = \omega_D \Omega^2 \quad (1.534)$$

benützt. Diese ergeben sich durch Koeffizientenvergleich der ersten 3 Terme des Nenners in Gleichung (1.529) mit der kubischen Gleichung (1.530). Im Limes $\tau_D \rightarrow 0$ reduziert sich der Nenner von Gleichung (1.507) auf einen in ν_n quadratischen Term mit den beiden Nullstellen

$$\lambda_{\pm} = \frac{\alpha}{2M} \pm i \left[\Omega^2 - \left(\frac{\alpha}{2M} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (1.535)$$

Analog zu obiger Darstellung bekommen wir für die Zustandssumme nun

$$Z[0] = \frac{\Omega \hbar \beta}{(2\pi)^2} \Gamma(\lambda_+/\nu_1) \Gamma(\lambda_-/\nu_1). \quad (1.536)$$

Im Grenzfall verschwindender Badkopplung ($\alpha \rightarrow 0$) bekommen wir mit Gleichung (2.123) erwartungsgemäß die Zustandssumme des harmonischen Oszillators (1.506).

1.4.15 Realzeit Dichtematrix-Propagation

Im Folgenden interessieren wir uns für die effektive Zeitentwicklung eines an ein Bad gekoppelten Systems. Von einer effektiven Zeitentwicklung sprechen wir, da wir nicht an der expliziten Propagation des Bades interessiert sind, sondern nur die Realzeitentwicklung des Systems unter Ankopplung an das Bad betrachten, wobei für das Bad durch eine statistische Ensemble-Beschreibung Rechnung getragen wird.

Die Zeitentwicklung einer Dichtematrix ist durch die Von-Neumann Gleichung gegeben,

$$\rho(t_f) = U(t_f, t_i) \rho(t_i) U^\dagger(t_f, t_i), \quad (1.537)$$

$$U(t_f, t_i) = \hat{T} \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt' \hat{H}(t') \right], \quad t_f \geq t_i, \quad (1.538)$$

wobei $U(t_f, t_i)$ wieder der Zeitentwicklungsoperator aus Gleichung (1.132) ist.

Da wir uns im Folgenden nur für Erwartungswerte der Systemkoordinate q interessieren, können wir über die expliziten Badkoordinaten der Dichtematrix integrieren und erhalten so eine reduzierte (effektive) Dichtematrix ρ_R für den Systemteil S_S . Symbolisch entspricht dies

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr}_B \text{tr}_S [\rho A] = \frac{1}{Z} \text{tr}_S [(\text{tr}_B \rho) A] = \frac{1}{Z} \text{tr}_S [\rho_R A]. \quad (1.539)$$

In der Ortsdarstellung nimmt dies folgende Form an,

$$\langle q_f | \rho_R(t_f) | q'_f \rangle = \rho_R(q_f, q'_f | t_f) = \int d\mathbf{x}_f \langle q_f, \mathbf{x}_f | \rho(t_f) | \mathbf{x}_f, q'_f \rangle, \quad (1.540)$$

$$\begin{aligned} &= \int d\mathbf{x}_f d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}'_i dq_i dq'_i \langle q_f, \mathbf{x}_f | U(t_f, t_i) | \mathbf{x}_i, q_i \rangle \\ &\quad \times \langle q_i, \mathbf{x}_i | \rho(t_i) | \mathbf{x}'_i, q'_i \rangle \langle q'_i, \mathbf{x}'_i | U^\dagger(t_f, t_i) | \mathbf{x}_f, q'_f \rangle. \end{aligned} \quad (1.541)$$

Damit ergeben sich die Propagatoren von $U(t_f, t_i)$ in der Ortsdarstellung, welche in Gleichung (1.157) eingeführt wurden, womit sie sich folgendermaßen als Pfadintegrale in Realzeit darstellen lassen,

$$\begin{aligned} \langle q_f, \mathbf{x}_f | U(t_f, t_i) | \mathbf{x}_i, q_i \rangle &= K(q_f, \mathbf{x}_f, t_f | q_i, \mathbf{x}_i, t_i) \\ &= \int \mathcal{D}q \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_S[q] \right] \int \mathcal{D}\mathbf{x} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_B[q, \mathbf{x}] \right], \end{aligned} \quad (1.542)$$

$$\begin{aligned} \langle q'_i, \mathbf{x}'_i | U^\dagger(t_f, t_i) | \mathbf{x}_f, q'_f \rangle &= K^*(q'_f, \mathbf{x}_f, t_f | q'_i, \mathbf{x}'_i, t_i) \\ &= \int \mathcal{D}q' \exp \left[-\frac{i}{\hbar} S_S[q'] \right] \int \mathcal{D}\mathbf{x}' \exp \left[-\frac{i}{\hbar} S_B[q', \mathbf{x}'] \right], \end{aligned} \quad (1.543)$$

wobei wir mit $S_S[q]$ die Wirkung des Systems aus Gleichung (1.4) bezeichnen, während $S_B[q, \mathbf{x}]$ der Wirkung des harmonischen Bades samt Kopplungsterm

entspricht. Während im Imaginärzeitformalismus (1.378) über periodische Pfade $q(0) = q(\hbar\beta)$ integriert wurde, wird nun im Realzeitformalismus über Pfade mit den folgenden Randbedingungen

$$q(t_i) = q_i, \quad q(t_f) = q_f, \quad q'(t_i) = q'_i, \quad q'(t_f) = q'_f, \quad (1.544)$$

$$\mathbf{x}(t_i) = \mathbf{x}_i, \quad \mathbf{x}(t_f) = \mathbf{x}_f, \quad \mathbf{x}'(t_i) = \mathbf{x}'_i, \quad \mathbf{x}'(t_f) = \mathbf{x}'_f, \quad (1.545)$$

integriert. Die Berechnung des Propagators in Realzeit erweist sich wegen den komplexeren Randbedingungen als etwas aufwändiger und wird detailliert im Anhang A.1 durchgeführt. Die Integration der Badkoordinaten $\{\mathbf{x}\}$, $\{\mathbf{x}'\}$ in Gleichung (1.542), (1.543) kann wieder ausgeführt werden und wir erhalten den Ausdruck

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}\mathbf{x} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_B[q, \mathbf{x}] \right] \quad (1.546) \\ &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_T[q] \right] \int \mathcal{D}\mathbf{x} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} \frac{1}{2} x_{\alpha}(t) \cdot N_{\alpha}(t, t') \cdot x_{\alpha}(t') + c_{\alpha} x_{\alpha}(t) \cdot q(t) \right] \\ &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_T[q] \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_R[\mathbf{x}_{kl}] \right] \exp \left[-i \frac{\hbar}{2} q(t) \cdot N^{-1}(t, t') \cdot q(t') \right] Z_T[0]. \end{aligned}$$

Mit $S_T[q]$ haben wir die im Exponenten in $q(t)$ quadratische Wirkung aus Gleichung (1.7) verwendet,

$$S_T[q] = - \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} q(t) \cdot q(t) = -M\gamma(0) q(t) \cdot q(t). \quad (1.547)$$

Der Beitrag $S_R[\mathbf{x}_{kl}]$ repräsentiert die Wirkung der klassischen Lösung, welche ebenfalls im Anhang A.1 berechnet wird, mit dem Resultat

$$\begin{aligned} S_R[\mathbf{x}_{kl}] &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} \left(c_{\alpha} q(t) \cdot \frac{x_{\alpha,i} \sin[\omega_{\alpha}(t_f - t)] + x_{\alpha,f} \sin[\omega_{\alpha}(t - t_i)]}{\sin[\omega_{\alpha}(t_f - t_i)]} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{m_{\alpha}\omega_{\alpha}}{2 \sin[\omega_{\alpha}(t_f - t_i)]} \{ (x_{\alpha,f}^2 + x_{\alpha,i}^2) \cos[\omega_{\alpha}(t_f - t_i)] - 2x_{\alpha,i}x_{\alpha,f} \} \right) \right]. \quad (1.548) \end{aligned}$$

Für den dritten Term in Gleichung (1.546) benötigen wir die inverse Darstellung des Integralkernes

$$N_{\alpha}(t, t') = -m_{\alpha} \delta(t - t') (\partial_{t'}^2 + \omega_{\alpha}^2), \quad (1.549)$$

welche ebenfalls für den relevanten Funktionenraum im Anhang, Gleichung (A.59) abgeleitet wird und die folgende Darstellung besitzt,

$$N^{-1}(t, t') = \sum_{\alpha} c_{\alpha}^2 N_{\alpha}^{-1}(t, t') \quad (1.550)$$

$$\begin{aligned}
&= \Theta(t - t') \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \frac{\sin[\omega_{\alpha}(t_f - t)] \sin[\omega_{\alpha}(t' - t_i)]}{\sin[\omega_{\alpha}(t_f - t_i)]} \\
&+ \Theta(t' - t) \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \frac{\sin[\omega_{\alpha}(t_f - t')] \sin[\omega_{\alpha}(t - t_i)]}{\sin[\omega_{\alpha}(t_f - t_i)]}.
\end{aligned}$$

Mithilfe der spektralen Dichte $J(\omega)$ nimmt der obige Ausdruck die Form

$$N^{-1}(t, t') = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \frac{\sin[\omega(t_f - t_{>})] \sin[\omega(t_{<} - t_i)]}{\sin[\omega(t_f - t_i)]} \quad (1.551)$$

an, wobei $t_{>}$, $t_{<}$ für den jeweils größeren/kleineren Zeitwert von t' , t'' steht.

Zur Vermeidung der Fallunterscheidung durch die beiden Theta-Funktionen in der Darstellung von N^{-1} können wir alternativ ein zeitgeordnetes Integral verwenden, wodurch ein Faktor 1/2 entfällt, da nur über die halbe von t und t' aufgespannte Fläche integriert wird. Dies geht allerdings nur dann, wenn alle weiteren Terme in Abhängigkeit von t und t' symmetrisch vorliegen, wie dies z.B. in Gleichung (1.546) der Fall ist.

Der Term $Z_T[0]$ in Gleichung (1.546) repräsentiert die Quantenfluktuationen des ungekoppelten Bades analog zu Gleichung (A.60) und $Z_T[0]$ im Imaginärzeitfall in Gleichung (1.388) mit dem Wert

$$Z_T[0] = \prod_{\alpha} \sqrt{\frac{m_{\alpha}\omega_{\alpha}}{2\pi i\hbar \sin[\omega_{\alpha}T]}}. \quad (1.552)$$

Der in Gleichung (1.541) enthaltene Imaginärzeitpropagator

$$\langle q_i, \mathbf{x}_i | \rho(t_i) | \mathbf{x}'_i, q'_i \rangle = \int \mathcal{D}q \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_S^{(E)}[q] \right] \int \mathcal{D}\mathbf{x} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S_B^{(E)}[q, \mathbf{x}] \right], \quad (1.553)$$

mit der euklidischen Wirkung $S^{(E)}$ kann nur dann weiter ausgewertet werden, wenn die Dichtematrix zur Zeit t_i spezifiziert wird. Wir betrachten nun zuerst den Fall eines Produktansatzes für die Dichtematrix zur Anfangszeit t_i . Dabei sei

$$\rho(t_i) = \rho_S(t_i) \otimes W_R(t_i), \quad (1.554)$$

$$W_R(t_i) = \frac{1}{Z_R} e^{-\beta H_R}. \quad (1.555)$$

Das nichtgekoppelte Bad befindet sich also zur Zeit t_i im thermodynamischen Gleichgewicht bei der inversen Temperatur β , während die Dichtematrix des Systems nicht weiter spezifiziert sein muss. Für Zeiten $t > t_i$ wird nun spontan das System an das Bad angekoppelt. Im Caldeira-Leggett Modell können wir dazu den Kopplungsterm H_I aus Gleichung (1.7) mit einer

Theta-Funktion multiplizieren und als Störung betrachten, welche zur Zeit t_i eingeschaltet wird,

$$H_I \rightarrow \Theta(t - t_i) H_I \quad (1.556)$$

Dies ist experimentell zwar fast unmöglich, jedoch für die Berechnung der Zeitentwicklung der reduzierten Dichtematrix von ungemeinem Vorteil, da in der Ortsdarstellung nun die Dichtematrix ebenfalls in einen Systemanteil und einen Badanteil faktorisiert,

$$\langle q_i, \mathbf{x}_i | \rho(t_i) | \mathbf{x}'_i, q'_i \rangle = \langle q_i | \rho_S(t_i) | q'_i \rangle \langle \mathbf{x}_i | W_R(t_i) | \mathbf{x}'_i \rangle . \quad (1.557)$$

Die Dichtematrix des Bades in der Ortsdarstellung in der obigen Gleichung entspricht einem Imaginärzeitpropagator, wobei im Gegensatz zu der zuvor behandelten Zustandssumme hier keine periodischen Randbedingungen vorliegen, sondern der obige Propagator dem analytisch fortgesetzten allgemeinen Realzeitpropagator entspricht. Aus Gleichung (A.76) erhalten wir ohne Kopplungsterm ($b = 0$) den hier relevanten Propagator

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_i | W_R(t_i) | \mathbf{x}'_i \rangle &= Z_\beta[0] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \sum_\alpha \frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2 \sinh[\omega_\alpha \hbar \beta]} \right. \\ &\quad \left. \times \left\{ (x'^2_{\alpha,i} + x^2_{\alpha,i}) \cosh[\omega_\alpha \hbar \beta] - 2x_{\alpha,i} x'_{\alpha,i} \right\} \right] , \quad (1.558) \end{aligned}$$

mit der Imaginärzeitversion von $Z_T[0]$,

$$Z_\beta[0] = \prod_\alpha \sqrt{\frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2\pi \hbar \sinh[\omega_\alpha \hbar \beta]}} . \quad (1.559)$$

Die Integration über die Endkoordinate \mathbf{x}_f und die Anfangskoordinaten \mathbf{x}_i und \mathbf{x}'_i kann nun durchgeführt werden. Wegen der etwas langwierigen Rechnung wird dies im Anhang A.2 explizit ausgeführt. Die Integration über die Endkoordinate \mathbf{x}_f erzeugt dabei eine Bedingung an die beiden Pfade q und q' entsprechend den Anfangswerten \mathbf{x}_i und \mathbf{x}'_i in der Gestalt einer Delta-Funktion. Physikalisch bedeutet dies, dass nicht jede beliebige Pfadkonfiguration von $q(t)$ und $q'(t)$ bei gegebener Anfangsbedingung des Bades $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_i$ mit der gemeinsamen Endkonfiguration des Bades \mathbf{x}_f verträglich ist. Die beiden verbleibenden Integrationen führen zu einer nichtlokalen Kopplung der Pfade q und q' .

Ein weiterer Effekt stellt der Bruch der Invarianz unter Zeitspiegelungen $t \rightarrow -t$ dar, welcher ein klares Signal für Dissipation darstellt. Während der inverse Integralkern (1.550) diese Symmetrie noch explizit besitzt, wird bei der Ausintegration der Anfangs- und Endkoordinaten ein nicht symmetrisierter Ausdruck addiert, so dass ein retardierter Kern (A.107) entsteht.

Als Resultat erhalten wir die effektive Zeitentwicklung der reduzierten Dichtematrix in der Ortsdarstellung aus Gleichung (1.540) in der Darstellung

$$\rho_{\text{R}}(q_{\text{f}}, q'_{\text{f}} | t_{\text{f}}) = \int dq_{\text{i}} dq'_{\text{i}} J_{\text{FV}}(q_{\text{f}}, q'_{\text{f}}, t_{\text{f}} | q_{\text{i}}, q'_{\text{i}}, t_{\text{i}}) \rho_{\text{S}}(q_{\text{i}}, q'_{\text{i}} | t_{\text{i}}). \quad (1.560)$$

Diese Gleichung liefert uns als Spezialfall das Betragsquadrat der Übergangsamplitude des Systems vom Ort q_{i} zum Ort q_{f} unter der Ankopplung an ein Bad, indem wir für die Dichtematrix des Systems zur Zeit $t = t_{\text{i}}$ die lokale Form $\rho_{\text{S}}(q, q' | t_{\text{i}}) = \delta(q - q_{\text{i}}) \delta(q' - q_{\text{i}})$ verwenden und erhalten daraus direkt

$$|\langle q_{\text{f}}, t_{\text{f}} | q_{\text{i}}, t_{\text{i}} \rangle|^2 = J_{\text{FV}}(q_{\text{f}}, q_{\text{f}}, t_{\text{f}} | q_{\text{i}}, q_{\text{i}}, t_{\text{i}}) = P(q_{\text{f}}, t_{\text{f}} | q_{\text{i}}, t_{\text{i}}). \quad (1.561)$$

Der Feynman-Vernon Propagator J_{FV} beschreibt somit die effektive Zeitentwicklung der reduzierten Dichtematrix ρ_{R} und besitzt die explizite Darstellung

$$J_{\text{FV}}(q_{\text{f}}, q'_{\text{f}}, t_{\text{f}} | q_{\text{i}}, q'_{\text{i}}, t_{\text{i}}) = \int_{q_{\text{i}}, q'_{\text{i}}}^{q_{\text{f}}, q'_{\text{f}}} \mathcal{D}q \mathcal{D}q' e^{i(S_{\text{S}}[q] - S_{\text{S}}[q'])/\hbar} \mathcal{F}_{\text{FV}}[q, q'], \quad (1.562)$$

mit den Randbedingungen

$$q(t_{\text{i}}) = q_{\text{i}}, \quad q(t_{\text{f}}) = q_{\text{f}}, \quad q'(t_{\text{i}}) = q'_{\text{i}}, \quad q'(t_{\text{f}}) = q'_{\text{f}}. \quad (1.563)$$

Das sogenannte Feynman-Vernon Influenzfunktional $\mathcal{F}_{\text{FV}}[q, q']$, welches der Kopplung des Systems an das Bad Rechnung trägt und bei verschwindender Ankopplung gegen eins geht, liefert den Beitrag zur nichtlokalen Kopplung der beiden Systempfade q und q' . Dies kann nun folgendermaßen als komplexe Phase $\Phi_{\text{FV}}[q, q']$ dargestellt werden [1], und wird im Anhang, Gleichung (A.124) explizit abgeleitet,

$$\mathcal{F}_{\text{FV}}[q, q'] = \exp \left[-\Phi_{\text{FV}}[q, q'] \right], \quad (1.564)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{FV}}[q, q'] &= \frac{1}{2\hbar} \left[q(t) \cdot L(|t - t'|) \cdot q(t') + q'(t) \cdot L^*(|t - t'|) \cdot q'(t') \right. \\ &\quad \left. - q'(t) \cdot L(t - t') \cdot q(t') - q(t) \cdot L^*(t - t') \cdot q'(t') \right] \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} M\gamma(0) \left[q(t) \cdot q(t) - q'(t) \cdot q'(t) \right]. \end{aligned} \quad (1.565)$$

Der Integralkern $L(t)$ ist dabei der analytisch fortgesetzte Kern $K(\tau = it) = L(t)$ aus der Imaginärzeitdarstellung, Gleichung (1.422), mit

$$L(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \frac{\cosh[\omega(\hbar\beta/2 - it)]}{\sinh[\omega\hbar\beta/2]}, \quad (1.566)$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \left[\coth[\omega\hbar\beta/2] \cos[\omega t] - i \sin[\omega t] \right], \quad (1.567)$$

und entspricht in der symmetrischen Form dem thermischen Zweipunkt-Erwartungswert der Badkoordinate $X(t) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha}(t)$, Gleichung (1.231),

$$\langle \hat{T} X(t) X(t') \rangle = \hbar L(|t - t'|) . \quad (1.568)$$

In der Literatur wird $L(t)$ daher oftmals als Badkorrelationsfunktion bezeichnet. Genaugenommen muss dazu aber der Betrag im Argument genommen werden, wie wir aus der obigen Gleichung sehen. Die Funktion $L(t)$ besitzt die wichtige analytische Eigenschaft entsprechend dem weiter oben abgeleiteten Resultat (1.211),

$$L(-t) = L^*(t) = L(t - i\hbar\beta) . \quad (1.569)$$

Die letzte Zeile in Gleichung (1.565) entspricht den quadratischen Anteil S_T aus Gleichung (1.547). Gleichung (1.565) legt die Einführung einer Relativ- und Schwerpunktskoordinate für die Pfade q, q' nahe,

$$r = \frac{q + q'}{2} , \quad y = q - q' . \quad (1.570)$$

Der Weg $r(t)$ entspricht der Propagation entlang der Diagonalelemente der Dichtematrix, während $y(t)$ Wege entlang Nichtdiagonalelementen darstellt. Deshalb spricht man bei $r(t)$ auch vom quasiklassischen Weg, während man bei $y(t)$ von den Quantenfluktuationen spricht. Für die Influenzphase finden wir dadurch den Ausdruck entsprechend Gleichung (A.118),

$$\Phi_{\text{FV}}[y, r] = \Phi^{(\text{N})}[y] + i\Phi^{(\text{F})}[y, r] , \quad (1.571)$$

$$\Phi^{(\text{N})}[y] = \frac{1}{2\hbar} y(t) \cdot L'(t, t') \cdot y(t') , \quad (1.572)$$

$$\Phi^{(\text{F})}[y, r] = \frac{1}{\hbar} \left[2M\gamma(0) r(t) \cdot y(t) + y(t) \cdot 2\Theta(t - t') L''(t - t') \cdot r(t') \right] . \quad (1.573)$$

Durch partielle Integration erhalten wir unter Verwendung der Identität (vgl. Abschnitt A.2)

$$-2\Theta(t - t') L''(t - t') = M \partial_{t'} \gamma(t - t') + 2M\gamma(0) \delta(t - t') , \quad (1.574)$$

für den Rauschterm $\Phi^{(\text{F})}[y, r]$ eine Kopplung an die Systemgeschwindigkeit \dot{r} , wodurch die Translationsinvarianz wieder explizit zutage kommt,

$$\Phi^{(\text{N})}[y] = \frac{1}{2\hbar} y(t) \cdot L'(t, t') \cdot y(t') , \quad (1.575)$$

$$\Phi^{(\text{F})}[y, r] = \frac{1}{\hbar} \left[Mr(t_i) y(t) \cdot \gamma(t - t_i) + M y(t) \cdot \gamma(t - t') \cdot \dot{r}(t') \right] . \quad (1.576)$$

Für den Feynman-Vernon Propagator J_{FV} aus Gleichung (1.562) finden wir, sofern das System in der Standardform $1/2M\dot{q}^2 - V(q)$ vorliegt,

$$\begin{aligned}
J_{\text{FV}} &= \int_{r(t_i)=(q_i+q'_i)/2}^{r(t_f)=(q_f+q'_f)/2} \mathcal{D}r \int_{y(t_i)=q_i-q'_i}^{y(t_f)=q_f-q'_f} \mathcal{D}y \\
&\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(M\dot{r}(t) \cdot \dot{y}(t) - \int dt V \left[r(t) + \frac{y(t)}{2} \right] - V \left[r(t) - \frac{y(t)}{2} \right] \right) \right] \\
&\times \exp \left[-\Phi_{\text{FV}}[y, r] \right].
\end{aligned} \tag{1.577}$$

Der Realteil $\Phi^{(\text{N})}[y]$ hängt nur von der Nichtdiagonalkoordinate y ab und entspricht einem gaußschen Filter für die Nichtdiagonalkoordinate. Im klassischen Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ bekommen wir für den Realteil von $L(t)$ einen divergenten Term proportional zu $1/(\hbar\beta)$,

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} L'(t) = \frac{2}{\pi\hbar\beta} \int d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos[\omega t] = \frac{M}{\hbar\beta} \gamma(|t-t'|), \tag{1.578}$$

während der Imaginärteil von $L(t)$ keine $\hbar\beta$ Abhängigkeit besitzt und wie weiter oben im Text gezeigt wurde, im wesentlichen der dynamischen Suszeptibilität der effektiven Badkoordinate $X = \sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha}$ entspricht,

$$L''(t) = -\frac{1}{\pi} \int d\omega J(\omega) \sin[\omega t]. \tag{1.579}$$

Für den Realteil finden wir den klassischen Dämpfungskern $\gamma(t)$ aus Gleichung (1.30). In diesem Grenzfall tragen nur noch Diagonalezustände mit $y(t) = 0$ bei, d.h. wir bekommen den klassischen Grenzfall. Da die Fluktuationskoordinate y kein klassisches Analogon hat, muss die Integration über $\int \mathcal{D}y$ ausgeführt werden, um ein klassisches Resultat zu bekommen. Dies ist auch möglich, da die semiklassische Entwicklung in y in diesem Grenzfall ein exaktes Resultat liefert und explizit durchgeführt werden kann. Wegen des expliziten Auftretens des Faktors \hbar liefert die semiklassische Entwicklung hier keine Korrektur in Ordnung \hbar . Zur Beschreibung des klassischen Limes ist diese gaußsche Integration also zwingend notwendig. Im nächsten Abschnitt werden wir dies demonstrieren.

Die Unterdrückung der Nichtdiagonalezustände führt, wie wir in der Einleitung des ersten Kapitels schon bemerkt haben, zur Zerstörung von kohärentem Verhalten.

Da der Kopplungsterm über den Imaginärteil $L''(t)$ die Invarianz unter Zeitumkehr bricht, entspricht dieser Term einem dissipativen Term; dies sieht man auch daran, dass nach partieller Integration dieser Term an die klassische

Geschwindigkeit $\dot{r}(t)$ koppelt. Dass der Propagator eines Systems mit fester Energie eine definierte Phasenbeziehung entsprechend der Darstellung nach Energieeigenfunktionen hat,

$$\langle q'|U(t)|q\rangle = \sum_n \langle q'|n\rangle \langle n|q\rangle \exp[iE_n t/\hbar] \quad (1.580)$$

zeigt uns ebenfalls, dass der Term $i\Phi^{(F)}[y, r]$ für Dissipation von Energie des Systems verantwortlich ist.

Zusammenfassung

In den drei Propagatoren der Gleichung (1.540) für die reduzierte Dichtematrix konnten wir mithilfe des Pfadintegralformalismus die Integration der Badfreiheitsgrade durchführen und erhielten so eine effektive nichtlokale Beschreibung des Systems (1.560) der Form

$$\begin{aligned} & \langle q_f | \rho_R(t_f) | q'_f \rangle \quad (1.581) \\ &= \int dq_i dq'_i \int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}q \int_{q'(t_i)=q'_i}^{q'(t_f)=q'_f} \mathcal{D}q' \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_S[q] - S_S[q']) \right] \langle q_i | \rho_S(t_i) | q'_i \rangle \\ & \quad \times \int d\mathbf{x}_f d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}'_i \int_{\mathbf{x}(t_i)=\mathbf{x}_i}^{\mathbf{x}(t_f)=\mathbf{x}_f} \mathcal{D}\mathbf{x} \int_{\mathbf{x}'(t_i)=\mathbf{x}'_i}^{\mathbf{x}'(t_f)=\mathbf{x}_f} \mathcal{D}\mathbf{x}' \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_B[q, \mathbf{x}] - S_B[q', \mathbf{x}']) \right] \\ & \quad \times \langle \mathbf{x}_i | W_R(t_i) | \mathbf{x}'_i \rangle . \end{aligned}$$

Die beiden letzten Zeilen der obigen Gleichung (1.581) entsprechen dem Influenzfunktional $\mathcal{F}_{FV}[q, q']$ aus Gleichung (1.564); hier konnte im Falle eines harmonischen Bades mit bilinearer Systemankopplung entsprechend dem Caldeira-Leggett-Modell aus Gleichung (1.4) die Integration über die Badfreiheitsgrade durchgeführt werden.

1.4.16 Klassischer Limes der Feynman-Vernon Influenzfunktionalbeschreibung

In diesem Abschnitt untersuchen wir den klassischen Grenzfall des Feynman-Vernon Propagators in der Darstellung von Gleichung (1.577). Da wir einen klassischen Prozess untersuchen wollen, verlangen wir als Randbedingung für die Pfade, dass die Fluktuationskoordinate $y(t)$ zu den Zeiten t_i und t_f verschwindet,

$$\begin{aligned} r(t_i) &= q_i = q'_i, & r(t_f) &= q_f = q'_f, \\ y(t_i) &= q_i - q'_i = 0, & y(t_f) &= q_f - q'_f = 0. \end{aligned} \quad (1.582)$$

Da der Rauschterm $\Phi^{(N)}[y]$ aus Gleichung (1.571) Fluktuationen in y im klassischen Limes stark unterdrückt, können wir das Potenzial des Systems nach $y(t)$ entwickeln und Potenzen ab Ordnung $\mathcal{O}(y^3)$ in guter Näherung ignorieren. Wir finden dadurch für den Feynman-Vernon Propagator (1.577) die Form

$$J_{\text{FV}} = \int \mathcal{D}r \mathcal{D}y \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(M\ddot{r}(t) \cdot y(t) + V'[r(t)] \cdot y(t) \right) - \Phi_{\text{FV}}[y, r] \right]. \quad (1.583)$$

Für den harmonischen Oszillator mit einem quadratischen Potenzial $V(x) = 1/2M\omega^2(x - a)^2$ ist diese Form exakt, da in Gleichung (1.577) Terme der Ordnung $\mathcal{O}(y^n)$ für $n > 2$ nicht auftreten. Wir schreiben den Feynman-Vernon Propagator nun in der Form

$$J_{\text{FV}} = \int \mathcal{D}r \mathcal{D}y \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} y(t) \cdot L'(t - t') \cdot y(t') \right] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} y(t) \cdot X[r](t) \right]. \quad (1.584)$$

Der Realteil $L'(t - t')$ der Badkorrelationsfunktion $L(t - t')$ aus Gleichung (1.566) geht im klassischen Limes in den symmetrisierten Dämpfungskern $M/(\hbar\beta) \gamma(|t - t'|)$ über, was in Gleichung (1.578) gezeigt wurde. Ein Randterm der Gestalt $M\dot{r}y$ verschwindet wegen der obigen Randbedingung an einen klassischen Übergang von einem Diagonalzustand in einen neuen Diagonalzustand. In der letzten Gleichung haben wir die Terme in Abhängigkeit von $r(t)$ als Funktional $X[r](t)$ geschrieben, welches linear an die Fluktuationskoordinate $y(t)$ koppelt. Dieses Funktional hat dabei die Gestalt

$$\begin{aligned} X[r](t) &= M\ddot{r}(t) + V'(r) + M\gamma(t - t') \cdot \dot{r}(t') + Mr(t_i)\gamma(t - t_i), \quad (1.585) \\ &= M\ddot{r}(t) + V'(r) - 2M\gamma(0)r(t) - 2\Theta(t - s)L''(t - s) \cdot r(s). \end{aligned}$$

Wenn wir dies nun mit der klassischen Langevin-Gleichung (1.32), (1.33) vergleichen, dann erkennen wir sofort, dass das Funktional $X[r](t)$ der klassischen fluktuierenden Kraft $X^{\text{h}}(t)$ aus Gleichung (1.26) entspricht [1, 3]. Im Falle des harmonischen Oszillators entspricht das obige Funktional einer linearen Abbildung,

$$X[r](t) = O(t - s) \cdot r(s), \quad (1.586)$$

$$O(t - s) = M\delta(t - s) \left[\partial_s^2 + \omega^2 - 2\gamma(0) \right] - 2\Theta(t - s)L''(t - s). \quad (1.587)$$

Für diesen speziellen Fall des harmonischen Oszillators lässt sich die Funktionalabhängigkeit der stochastischen Kraft $X[r](t)$ von der klassischen Oszillatorkoordinate $r(s)$ formal invertieren,

$$r[X](t) = O^{-1}(t - s) \cdot X(s). \quad (1.588)$$

Der Integralkern $O^{-1}(t-s)$ entspricht dabei der Greenfunktion des frequenzabhängig gedämpften harmonischen Oszillators.

Da die Funktion $y(t)$ nun maximal quadratisch in der Wirkung in Gleichung (1.584) vorliegt, können wir diese gaußsche Integration durchführen. Der dabei auftretende Vorfaktor ist proportional zu $\prod_l (\lambda_l)^{-1/2}$, wobei λ_l die Eigenwerte des Integralkerns $L'(t-t')$ repräsentiert, welche zu den Eigenfunktionen $y_l(t)$ gehören, die der Randbedingung $y_l(t_i) = y_l(t_f) = 0$ für die Fluktuationsmode genügen. Eine allgemeine Lösung, welche den obigen Randbedingungen genügt, lautet in der Form eines Fourier-Reihenansatzes

$$y(s) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \tilde{y}_l \sin[\nu_l(t_f - s)], \quad \nu_l = \frac{\pi}{t_f - t_i} l. \quad (1.589)$$

Eingesetzt in die Eigenwertgleichung

$$L'(s-s') \cdot y(s') = \lambda y(s) \quad (1.590)$$

findet man erwartungsgemäß, dass die Eigenwerte zu den Eigenfunktionen $\sin[\nu_l(t_f - s)]$ nur von der spektralen Dichte und der Eigenfrequenz ν_l abhängen. Die gaußsche Integration über $\mathcal{D}y$ in Gleichung (1.584) liefert uns nun den Ausdruck

$$J_{\text{FV}} = \mathcal{N} \int \mathcal{D}r \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} X[r](t) \cdot L'^{-1}(t-t') \cdot X[r](t') \right]. \quad (1.591)$$

Der Normierungsfaktor hängt nur von der spektralen Dichte $J(\omega)$ und den Eigenfrequenzen $\pi l / (t_f - t_i)$ ab. Im klassischen Limes erhalten wir daraus

$$\lim_{\hbar \beta \rightarrow 0} J_{\text{FV}} = \mathcal{N} \int \mathcal{D}r \exp \left[-\frac{1}{2} X[r](t) \cdot \frac{\beta}{M} \gamma^{-1}(|t-t'|) \cdot X[r](t') \right]. \quad (1.592)$$

Unter der Notation $\gamma^{-1}(|t-t'|)$ verstehen wir hier wie im folgenden explizit den inversen Kern der Betragsfunktion, also $[\gamma(|t-t'|)]^{-1}$. Wichtig ist hierbei, dass im klassischen Grenzfall kein Faktor \hbar im Exponenten steht. Das verbleibende Integral liefert daher keine Quantenkorrekturen. Dies versteht man wie folgt: normalerweise findet man bei der Pfadintegraldarstellung eines Propagators die klassische Lösung dadurch, dass sie die Wirkung im Exponenten extremalisiert. Wenn nun allerdings eine stochastische Kraft an das System angreift, so findet man für jede Realisierung der stochastischen Kraft $X(t)$ eine dazugehörige klassische Lösung $r(t)$, da die Differenzialgleichung (1.585) eine eindeutige Lösung hat,

$$\text{explizite Rauschkraft } X(t) \longrightarrow \text{klassische Bahnkoordinate } r(t). \quad (1.593)$$

Umgekehrt kann man via Gleichung (1.586) im klassischen Fall zu jeder denkbaren klassischen Koordinate $r(t)$ eine Realisierung der Rauschkraft $X(t)$ zuordnen,

$$\text{klassische Bahnkoordinate } r(t) \longrightarrow \text{explizite Rauschkraft } X(t) . \quad (1.594)$$

Dieser Fall entspricht der Langevin-Gleichung (1.585), also der klassischen Beschreibung. Der umgekehrte Fall ist im Allgemeinen nicht explizit darstellbar. Im Markov-Grenzfall, also strikt ohmscher spektraler Dichte $J(\omega) = M\gamma\omega$, geht der klassische Dämpfungskern in eine Delta-Distribution über, wodurch die funktionale Abhängigkeit der Rauschkraft $X(t)$ von der klassischen Koordinate $r(t')$ in eine funktionelle, zeitlich lokale Abhängigkeit übergeht. Für ein harmonisches Potenzial ist dann eine Invertierung mittels einer Green-Funktion möglich. Das Wahrscheinlichkeitsgewicht (Funktionalgewicht) $P_X[X]$ für die stochastischen Funktionen $X(t)$ ist durch Gleichung (1.592) gegeben,

$$P_X[X] = \exp \left[-\frac{1}{2} X(t) \cdot \frac{\beta}{M} \gamma^{-1}(|t - t'|) \cdot X(t') \right] . \quad (1.595)$$

Die stochastische Kraft wird also durch einen gaußschen Prozess beschrieben, wobei wir für die einzige nichtverschwindende 2-Punkt-Kumulante

$$\langle X(t)X(t') \rangle = \frac{\beta}{M} \gamma(|t - t'|) \quad (1.596)$$

finden. Dies ist nun genau das klassische Resultat (1.55), welches wir zu Beginn der Arbeit im klassischen Grenzfall abgeleitet haben.

Daraus ergibt sich sofort das Wahrscheinlichkeitsgewicht $P_R[r]$ für die klassische Bahnkoordinate $r(t)$, indem wir $X(t)$ als Funktional von $r(t)$ mittels Gleichung (1.585) ausdrücken,

$$P_R[r] = \exp \left[-\frac{1}{2} X[r](t) \cdot \frac{\beta}{M} \gamma^{-1}(|t - t'|) \cdot X[r](t') \right] . \quad (1.597)$$

Daraus erkennen wir, dass Gleichung (1.591) für den Feynman-Vernon Propagator einer Monte-Carlo Sampling Technik entspricht: es wird über alle klassischen Lösungen $r(t)$ summiert, wobei sich aus $r(t)$ eindeutig eine explizite Realisierung der stochastischen Kraft $X(t)$ ergibt. Da für selbige das Funktionalgewicht $P_X[X]$ bekannt ist, lässt sich daraus das Funktionalgewicht $P_R[r]$ für $r(t)$ darstellen, welches die Funktionen $r(t)$ gewichtet, über welche summiert wird.

Somit können wir beispielsweise die Wahrscheinlichkeit dafür berechnen, dass sich das klassische Teilchen zur Zeit t_f am Ort $q(t_f)$ befindet, wenn es

sich zur Zeit t_i am Ort $q(t_i)$ befand, da der Propagator $J_{\text{FV}}(q_f, q_f, t_f | q_i, q_i, t_i)$ die Wahrscheinlichkeitsinterpretation aus Gleichung (1.561) besitzt,

$$\langle q(t_f) \rangle \Big|_{q_i(t_i)=q_i} = \int_{-\infty}^{\infty} dx x J_{\text{FV}}(x, x, t_f | q_i, q_i, t_i), \quad (1.598)$$

Im streng ohmschen Grenzfall geht $\gamma(t)$ in eine Delta-Funktion über. Dadurch ist das stochastische Rauschen nicht mehr zeitlich korreliert und entspricht einem weißen Rauschen. Der Feynman-Vernon Propagator (1.561) erhält dadurch die Markov-Eigenschaft

$$\int dx P(q_f, t_f | x, t_x) P(x, t_x | q_i, t_i) = P(q_f, t_f | q_i, t_i), \quad t_f > t_x > t_i. \quad (1.599)$$

Dies bedeutet nun auch, dass wir $P(q_f, t_f | x, t_x)$ in der aus der Quantenmechanik vertrauten Schreibweise

$$P(q_f, t_f | q_i, t_i) = \langle q_f | e^{\hat{H}_{\text{FP}}(t_f - t_i)} | q_i \rangle \quad (1.600)$$

darstellen können, sofern das System nicht explizit von der Zeit abhängt. Der Operator wird dabei als Fokker-Plank Operator bezeichnet und ist hermitesch, da die Gesamtwahrscheinlichkeit erhalten wird [11, 44].

Die Diskussion des Übergangs vom Funktionalmaß $\mathcal{D}r$ zu $\mathcal{D}X$ in Literatur [3] ist leider nur für ein maximal harmonisches Potenzial richtig. Der Grund liegt in der asymmetrisch gewählten Diskretisierung der Langevin-Gleichung. Eine direkte Betrachtung der Funktionaldeterminante ist für Funktionale im Allgemeinen nicht trivial, da diese wieder die Determinante eines Operators enthält, welche in der Regel divergent ist. Eine Besonderheit stellt dabei die sogenannte Fredholm-Integralgleichung [13, 55] der Form

$$y(t) = y[x](t) = x(t) + \lambda K(t, s) \cdot x(s) \quad (1.601)$$

dar, welche einen linearen Integralmaß-Übergang von $\mathcal{D}x$ nach $\mathcal{D}y$ beschreibt. Die Funktionalabhängigkeit kann dabei mit folgendem Ansatz

$$x(t) = x[y](t) = y(t) - \lambda R_\lambda(t, s) \cdot y(s) \quad (1.602)$$

invertiert werden. Die Größe $R_\lambda(t, s)$ stellt dabei die sogenannte Resolvente [34] dar, welche symbolisch die Form

$$\lambda R_\lambda(t, s) = \left[\delta(t - s) + \lambda K^{-1}(t, s) \right]^{-1} \quad (1.603)$$

$$= \lambda K^{-1}(t, s) + \frac{\lambda^2}{2} \cdot K^{-1}(t, u) \cdot K^{-1}(u, s) + \dots \quad (1.604)$$

besitzt. Wegen der Identität

$$\det[1 + A] = \exp \left[\text{tr} \ln[1 + A] \right] = \exp \left[\text{tr} A - \frac{1}{2} \text{tr} A^2 + \dots \right] \quad (1.605)$$

können wir die Determinante auf die Spurbildung des Operators $A(s, s')$ zurückführen, wobei dies gerade die Bedeutung einer Integration über die Diagonalelemente der Form

$$\text{tr} A = \int ds A(s, s) \quad (1.606)$$

hat. Für die Funktionalableitung $\delta y(t)/\delta x(s)$ finden wir nun gerade

$$\frac{\delta y(t)}{\delta x(s)} = \delta(t - s) + \lambda K(t, s). \quad (1.607)$$

Somit kann die Funktionaldeterminante auf die Spurbildung des Operators $K(t, s)$ zurückgeführt werden. Ein besonders einfacher Fall liegt vor, wenn der Integralkern $K(t, s)$ kausal ist, also für $s > t$ verschwindet. Dann spricht man von einer Volterra-Integralgleichung. In diesem Fall verschwinden nämlich alle Terme der Gestalt

$$\text{tr} K^n = \text{tr} \left[K(t, s_1) \cdot K(s_1, s_2) \cdots K(s_{n-1}, t) \right] \quad (1.608)$$

für Terme $n > 1$ und wir erhalten das exakte Resultat

$$\det \left| \frac{\delta y(t)}{\delta x(s)} \right| = \exp \left[\lambda \int ds K(s, s) \right]. \quad (1.609)$$

In diskretisierter Darstellung wird dieses Resultat in [13] abgeleitet. Im Falle der Funktionalableitung von $X(t)$ nach $r(s)$ finden wir eine ähnliche Struktur,

$$\frac{\delta X[r](t)}{\delta r(s)} = \delta(t - s) \left[M \partial_s^2 + V''(r) - 2M\gamma(0) \right] - 2\Theta(t - s) L''(t - s). \quad (1.610)$$

Sofern nun der Vorfaktor $\mathcal{W} = M \partial_s^2 + V''(r) - 2M\gamma(0)$ unabhängig von $r(t)$ ist, ist in der Tat der Übergang vom Funktionalmaß $\mathcal{D}r$ zu $\mathcal{D}X$ unabhängig von $r(t)$. Dies ist jedoch nur der Fall, wenn das Potenzial $V(r)$ maximal quadratisch in der Koordinate r vorliegt. Dann finden wir sofort, da $L''(0)$ identisch verschwindet,

$$\mathcal{N} \int \mathcal{D}r \exp \left[-\frac{1}{2} X[r](t) \cdot \frac{\beta}{M} \gamma^{-1}(|t - t'|) \cdot X[r](t') \right] \quad (1.611)$$

$$= \mathcal{N}' \int \mathcal{D}X \exp \left[-\frac{1}{2} X(t) \cdot \frac{\beta}{M} \gamma^{-1}(|t - t'|) \cdot X(t') \right]. \quad (1.612)$$

Daher gilt Gleichung (1.595) und (1.596) genaugenommen nur für den harmonischen Oszillator. Da im Falle eines harmonischen Potentials $V'(r) = m\omega^2 r$ das Funktional $X[r](t)$ als lineares Funktional von r in der Form

$$X[r](t) = O(t, s) \cdot r(s), \quad (1.613)$$

$$O(t, s) = M \left[\delta(t-s)(\partial_s^2 + \omega^2) - \partial_s \gamma(t-s) \right] \quad (1.614)$$

geschrieben werden kann, finden wir für das Funktionalgewicht $P_R[r]$ die explizite Darstellung

$$P_R[r] = \exp \left[-\frac{1}{2} r(s) \cdot \mathcal{X}(s, s') \cdot r(s') \right], \quad (1.615)$$

$$\mathcal{X}(s, s') = O^T(s, u) \cdot \frac{\beta}{M} \gamma^{-1}(|u - u'|) \cdot O(u', s'). \quad (1.616)$$

Das obige Resultat (1.591) entspricht dem rein klassischen Grenzfall. Quantenmechanische Korrekturen finden wir an zwei Stellen: zum einen haben wir den Integralkern $L'(t)$ im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ dadurch approximiert, dass wir die Funktion $\coth[\omega\hbar\beta/2]$ nur durch die führende Potenz $2/(\omega\hbar\beta)$ ersetzt haben. Die allgemeine Entwicklung

$$\coth[x] = \frac{1}{x} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2^{2n} B_{2n}}{2n!} x^{2n-1}, \quad |x| < \frac{\pi}{2}. \quad (1.617)$$

liefert daher Korrekturen in der Ordnung \hbar^{2n-1} , $n \geq 1$. Die zweite Näherung lag in der Entwicklung des Potenzialausdrucks

$$V \left[r + \frac{y}{2} \right] - V \left[r - \frac{y}{2} \right] = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{V^{(2n+1)}(r)}{(2n+1)!} \left(\frac{y}{2} \right)^{2n+1}, \quad (1.618)$$

wofür wir nur den linearen Term in y betrachtet haben. Den ersten Fall können wir ohne weiteres exakt behandeln, da dies nur das Funktionalgewicht, also die Statistik betrifft und die exakte Darstellung des Integralkerns $L'(t)$ bekannt ist – siehe dazu Gleichung (1.578). Andererseits kann die Linearisierung des Potentials in der Fluktuationskoordinate y im Allgemeinen nur durch eine Störungsentwicklung in höheren Termen in y behoben werden.

Für den harmonischen Oszillator bedeutet dies, dass das klassische Resultat exakt ist und die quantenmechanische Korrektur nur die Badkorrelationsfunktion und daher die statistische Gewichtung ändert.

1.4.17 Influenzfunktional als generierendes Funktional von thermischen Erwartungswerten

Wir zeigen nun, dass das Influenzfunktional $\mathcal{F}_{\text{FV}}[q, q']$ aus Gleichung (1.564) dem erzeugenden Funktional für thermische Erwartungswerte (1.189) aus Abschnitt 1.4.2 entspricht. Dazu schreiben wir Gleichung (1.581) in der weiter oben verwendeten Form

$$\langle q_f | \rho_{\text{R}}(t_f) | q'_f \rangle = \int dq_i dq'_i J_{\text{FV}}(q_f, q'_f, t_f | q_i, q'_i, t_i) \langle q_i | \rho_{\text{S}}(t_i) | q'_i \rangle, \quad (1.619)$$

wobei der Feynman-Vernon Propagator aus Gleichung (1.560) verwendet wurde. Das Influenzfunktional $\mathcal{F}_{\text{FV}}[q, q']$ stellen wir in der Pfadintegral-Darstellung folgendermaßen dar,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{FV}}[q, q'] &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_{\text{T}}[q] - S_{\text{T}}[q'] \right) \right] \int d\mathbf{x}_f d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}'_i \quad (1.620) \\ &\times \int_{\mathbf{x}(t_i)=\mathbf{x}_i}^{\mathbf{x}(t_f)=\mathbf{x}_f} \mathcal{D}\mathbf{x} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_{\text{R}}[\mathbf{x}] + S_{\text{I}}[q, \mathbf{x}] \right) \right] \\ &\times \int_{\mathbf{x}'(t_i)=\mathbf{x}'_i}^{\mathbf{x}'(t_f)=\mathbf{x}_f} \mathcal{D}\mathbf{x}' \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(-S_{\text{R}}[\mathbf{x}'] - S_{\text{I}}[q', \mathbf{x}'] \right) \right] \\ &\times \int_{\bar{\mathbf{x}}'(t_i)=\mathbf{x}'_i}^{\bar{\mathbf{x}}(t_i - i\hbar\beta)=\mathbf{x}_i} \mathcal{D}\bar{\mathbf{x}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left(S_{\text{R}}^{(\text{E})}[\bar{\mathbf{x}}] \right) \right]. \end{aligned}$$

Abgesehen von dem Vorfaktor $\exp[i(S_{\text{T}}[q] - S_{\text{T}}[q'])/\hbar]$ entspricht Gleichung (1.620) genau der Definitionsgleichung (1.189) für thermische Erwartungswerte. Der Integrationsweg entspricht der in Abbildung 1.3 gezeigten Kontur. Mithilfe des Vektors

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} q \\ q' \end{pmatrix} \quad (1.621)$$

und der Kopplungsmatrix

$$\underline{L}(t) = \sum_{\alpha} c_{\alpha}^2 \begin{pmatrix} \kappa_{\alpha}(t) & \kappa_{\alpha}^{-}(t) \\ \kappa_{\alpha}^{+}(t) & \kappa_{\alpha}^{*}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L(|t|) & L^{*}(t) \\ L(t) & L^{*}(|t|) \end{pmatrix}, \quad (1.622)$$

schreiben wir das Influenzfunktional $\mathcal{F}_{\text{FV}}[q, q']$ in der einfachen Form

$$\mathcal{F}_{\text{FV}} = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_{\text{T}}[q] - S_{\text{T}}[q'] \right) \right] Z_{\beta}[q, q'], \quad (1.623)$$

$$Z_{\beta}[q, q'] = \exp \left[\frac{1}{2\hbar} \mathbf{q}^{\text{T}}(t) \cdot \underline{L}(t - t') \cdot \mathbf{q}'(t') \right], \quad (1.624)$$

wobei $\kappa(t)$ entsprechend den Gleichungen (1.207) bis (1.213) verwendet wurde und thermischen Zweipunktkorrelationsfunktionen der Badkoordinaten x, x' entsprechen und $L(t)$ in Gleichung (1.566) definiert wurde.

1.4.18 Das generierendes Funktional für den Feynman-Vernon Propagator

Wir definieren nun, ausgehend von den Erkenntnissen in Abschnitt 1.4.6, ein generierendes Funktional $Z_{\text{FV}}[b, b']$ für den Feynman-Vernon Propagator J_{FV} aus dem vorhergehenden Abschnitt, Gleichung (1.562). Wir schreiben dazu den im Exponenten in $q(\tau)$ maximal quadratischen Ausdruck als

$$\begin{aligned}
 Z_{\text{FV}}[b, b'](q_f, q'_f, t_f | q_i, q'_i, t_i) = & \quad (1.625) \\
 & \int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}q \int_{q'(t_i)=q'_i}^{q'(t_f)=q'_f} \mathcal{D}q' \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(q(t) \cdot N(t, t') \cdot q(t') - q'(t) \cdot N(t, t') \cdot q'(t') \right) \right] \\
 & \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(b(t) \cdot q(t) - b'(t) \cdot q'(t) \right) \right] \\
 & \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \left(q(t) \dot{q}(t) - q'(t) \dot{q}'(t) \right) \Big|_{t=t_i}^{t=t_f} \right] \\
 & \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} M \gamma(0) \left(q(t) \cdot q(t) - q'(t) \cdot q'(t) \right) \right] \\
 & \times \exp \left[- \frac{1}{2\hbar} \left(q(t) \cdot L(|t-t'|) \cdot q(t') + q'(t) \cdot L^*(|t-t'|) \cdot q'(t') \right) \right] \\
 & \times \exp \left[- \frac{1}{\hbar} q'(t) \cdot L(t-t') \cdot q(t') \right].
 \end{aligned}$$

Der Integralkern $N(t, t')$ entspricht dem Integralkern des harmonischen Oszillators aus Gleichung (1.549) bzw. der Notation in Abschnitt A.1.2 mit

$$N(t, t') = -M\delta(t-t') (\partial_t^2 + \Omega^2), \quad (1.626)$$

wobei das zu betrachtende System durch die Wirkung

$$S_S[q] = \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} M \dot{q}^2 - \frac{1}{2} M \Omega^2 q^2 - V(q) \quad (1.627)$$

gegeben sei. Der inverse Integralkern N^{-1} ist aus Gleichung (A.59) bekannt und besitzt die Darstellung

$$\begin{aligned}
 N^{-1}(t, t') = & \Theta(t-t') \frac{\sin[\Omega(t_f-t)] \sin[\Omega(t'-t_i)]}{M\Omega \sin[\Omega(t_f-t_i)]} \\
 & + \Theta(t'-t) \frac{\sin[\Omega(t_f-t')] \sin[\Omega(t-t_i)]}{M\Omega \sin[\Omega(t_f-t_i)]}. \quad (1.628)
 \end{aligned}$$

Den Feynman-Vernon Propagator für ein System mit beliebigem Potenzial $V(q)$ erhalten wir nun formal durch die Funktionalableitung nach b, b' der Gestalt

$$J_{\text{FV}} = \exp \left[\int_{t_i}^{t_f} dt V[\delta/\delta b(t)] - V[\delta/\delta b'(t)] \right] Z_{\text{FV}}[b, b'] \Big|_{b, b'=0}, \quad (1.629)$$

wodurch sich eine formal einfache Störungstheorie ergibt.

1.4.19 Stochastische Badbeschreibung

Anhand der klassischen Bewegungsgleichung (1.32) äusserte sich der Einfluß eines harmonischen Bades mit bilinearer Kopplung an das System durch eine stochastische Kraft $\xi(x)$, welche durch ihre Zweipunktkorrelationsfunktion (1.55) charakterisiert wird und einen Dämpfungskern $\gamma(t)$ aus Gleichung (1.30), welcher zu einer nichtlokalen Kopplung an die Systemgeschwindigkeit \dot{q} führte und im ohmschen Limes in einen gewöhnlichen Reibungsterm übergang. Im Realzeitfall fanden wir nun die Zeitentwicklung der reduzierten Dichtematrix über Gleichung (1.560).

Auf den ersten Blick lässt sich die klassische Bewegungsgleichung (1.32) nicht unbedingt mit dem quantenmechanischen Fall vergleichen beziehungsweise identifizieren. Andererseits sahen wir beispielsweise, dass im klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ die Zweipunktkorrelationsfunktion der effektiven Badkoordinate $X(t) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha}$ aus Gleichung (1.22) in $(M/\beta) \gamma_s(t)$ entsprechend Gleichung (1.238), also in die klassische Zweipunktkorrelationsfunktion der stochastischen Kraft $\xi(t)$ übergeht.

Es stellt sich nun die Frage, ob ähnlich der Schrödingergleichung ein quantenmechanisches Analogon zur Langevin-Gleichung (1.32) gefunden werden kann. Ein starkes Argument dagegen wurde schon in der Einleitung erwähnt: da die Ausintegration eine nichtlokale Kopplung der Systemkoordinate erzeugt, kann die gesuchte Form nicht einfach durch eine zeitlich lokale Schrödingergleichung dargestellt werden.

Betrachten wir dazu die reduzierte Dichtematrix $\rho_{\text{R}}(t)$, welche durch Gleichung (1.540) beschrieben wurde. Über das Influenzfunktional $\mathcal{F}_{\text{FV}}[q, q']$ aus Gleichung (1.564) koppeln die Pfade $q(t)$ und $q'(t')$ zeitlich nichtlokal über den komplexen Kern $L(s, s')$ aus Gleichung (1.566) in der Form

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{FV}}[y, r] = & -\frac{1}{2\hbar} \left[q(t) \cdot L(|t-t'|) \cdot q(t') + q'(t) \cdot L^*(|t-t'|) \cdot q'(t') \right. \\ & \left. - 2q'(t) \cdot L(t-t') \cdot q(t') \right]. \end{aligned} \quad (1.630)$$

Während in der ersten Zeile die beiden Pfade nur zeitlich nichtlokal an die eigene Koordinate koppeln, findet in der zweiten Zeile auch eine nichtlokale

Ankopplung der beiden Pfade untereinander statt. Dieser Term verhindert nun gerade, dass wir eine Zeitentwicklung des Zustandsvektors für das System in der bekannten Form einer unitären Operation

$$|\psi(t')\rangle = U(t', t)|\psi(t)\rangle \quad (1.631)$$

finden. Wäre dies der Fall, dann würde der Propagator J_{FV} der reduzierten Dichtematrix aus Gleichung (1.562) gemäß der Zeitentwicklung

$$\begin{aligned} \langle q_f'|\psi(t')\rangle\langle\psi(t')|q_f\rangle &= \int dq_i dq_i' \langle q_f'|U(t', t)|q_i'\rangle \\ &\times \langle q_i'|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|q_i\rangle \langle q_i|U^*(t', t)|q_f\rangle \end{aligned} \quad (1.632)$$

in zwei getrennte Anteile in Abhängigkeit von $q(t)$ und $q'(t)$ faktorisieren. Nun wissen wir aus Gleichung (1.347)-(1.349), dass ein Term mit hermitescher Kopplung gerade durch eine gaußsche Integration über ein komplexes Feld $Z(t)$ erzeugt werden kann. Explizit schreiben wir also diesen Term, welcher $q(t)$ an $q'(t')$ koppelt, durch ein komplexes gaußsches Integral analog zu Gleichung (1.350) der Form [11, 63, 64, 65]

$$\begin{aligned} &\int \mathcal{D}Z \mathcal{D}\bar{Z} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \left\{ -\bar{Z}(s) \cdot L^{-1}(s, s') \cdot Z(s') + iq(s) \cdot Z(s) - iq'(s) \cdot \bar{Z}(s) \right\} \right] \\ &= \mathcal{Z}[q, q'] = \mathcal{Z}[0, 0] \exp \left[\frac{1}{\hbar} q'(s) \cdot L(s, s') \cdot q(s') \right] \end{aligned} \quad (1.633)$$

$$= \left\langle \exp \left[\frac{1}{\hbar} \left\{ q(s) \cdot Z(s) - q'(s) \cdot \bar{Z}(s) \right\} \right] \right\rangle_{[Z, \bar{Z}]} . \quad (1.634)$$

Durch Einführung einer komplexen Kraft $Z(t)$ mit einem Funktionalgewicht

$$P[Z, \bar{Z}] = \exp \left[-\frac{1}{\hbar} Z(s) \cdot L^{-1}(s, s') \cdot \bar{Z}(s') \right] \quad (1.635)$$

gelingt es uns also, die Kopplung des Pfades $q(t)$ an den Pfad $q'(t')$ formal aufzulösen, wobei im Funktionalgewicht (1.635) gerade der inverse Kern $L^{-1}(s, s')$ auftritt. Gleichung (1.633) und (1.634) entsprechen einer Verallgemeinerung einer Erwartungswertbildung einer Variable z und einer Gewichtsfunktion $P(z)$ der Form

$$\langle f(z) \rangle = \int dz P(z) f(z) \quad (1.636)$$

auf Funktionen $Z(t)$, $\bar{Z}(t)$ mit einer Gewichtsfunktion in Form eines Funktionals entsprechend Gleichung (1.635). Das Funktionalmaß $\mathcal{D}Z \mathcal{D}\bar{Z}$ in Gleichung (1.633) können wir nun immer so skalieren, dass der Term $\mathcal{Z}[0, 0]$

gerade Eins liefert. Unter dieser Gewichtung finden wir folgende Korrelationsfunktionen für $Z(t)$, $\overline{Z}(t)$,

$$\langle Z(t) \rangle = \langle \overline{Z}(t) \rangle = 0, \quad (1.637)$$

$$\langle Z(t)Z(t') \rangle = \langle \overline{Z}(t)\overline{Z}(t') \rangle = 0, \quad (1.638)$$

$$\langle Z(t)\overline{Z}(t') \rangle = \hbar L(t-t'), \quad (1.639)$$

wie wir leicht verifizieren, indem wir den linken und rechten Teil von Gleichung (1.633) nach $q(t)$ bzw. $q'(t)$ ableiten und an der Stelle $q(t) = q'(t) = 0$ auswerten, also $\mathcal{Z}[q, q']$ als generierendes Funktional auffassen, wie schon in Gleichung (1.288) bis (1.290) weiter oben im Text gezeigt wurde. Für den Real- bzw. Imaginärteil von $Z = Z' + iZ''$ bedeutet dies²⁰

$$\langle Z'(t) \rangle = \langle Z''(t) \rangle = 0, \quad (1.640)$$

$$\langle Z'(t)Z'(t') \rangle = \langle Z''(t)Z''(t') \rangle = \frac{\hbar}{2} L'(t-t'), \quad (1.641)$$

$$\langle Z''(t)Z'(t') \rangle = -\langle Z'(t)Z''(t') \rangle = \frac{\hbar}{2} L''(t-t'). \quad (1.642)$$

Der Imaginärteil der Badkorrelationsfunktion koppelt somit den Realteil an dem Imaginärteil der komplexen stochastischen Kraft $Z(t)$. Die Transformation (1.633) bzw. (1.634) läuft in der Literatur unter dem Namen Hubbard-Stratonovich Transformation und hat vielfältige Anwendungsmöglichkeiten in der Physik gefunden.

Wir sind nun mit diesen Vorüberlegungen in der Lage, den Feynman-Vernon Propagator (1.562) in faktorisierter Form anzugeben,

$$J_{\text{FV}}(q_f, q'_f, t_f | q_i, q'_i, t_i) = \left\langle G[Z](q_f, t_f | q_i, t_i) \overline{G}[\overline{Z}](q'_f, t_f | q'_i, t_i) \right\rangle_{[Z, \overline{Z}]}, \quad (1.643)$$

wobei entsprechend dem Funktionalgewicht $P[Z, \overline{Z}]$ aus Gleichung (1.635) gemittelt wird und die Propagatoren $G[Z]$ und $\overline{G}[\overline{Z}]$ die folgende Darstellung besitzen,

$$G[Z](q_f, t_f | q_i, t_i) = \int_{q_i(t_i)}^{q_f(t_f)} \mathcal{D}q \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_S[q] + S_T[q] + q(s) \cdot Z(s) \right) - \frac{1}{2\hbar} q(s) \cdot L(|s-s'|) \cdot q(s') \right], \quad (1.644)$$

$$\overline{G}[\overline{Z}](q'_f, t_f | q'_i, t_i) = \int_{q'_i(t_i)}^{q'_f(t_f)} \mathcal{D}q' \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \left(S_S[q'] + S_T[q'] + q'(s) \cdot \overline{Z}(s) \right) - \frac{1}{2\hbar} q'(s) \cdot L^*(|s-s'|) \cdot q'(s') \right]. \quad (1.645)$$

²⁰ Siehe dazu auch Fußnote auf Seite 74

Der Propagator $G[Z]$ liefert uns damit natürlich auch die effektive Zeitentwicklung des Zustandsvektors für eine gewählte Funktion der stochastischen Kraft $Z(t)$

$$\langle q' | \psi[Z](t) \rangle = \int dq G[Z](q', t | q, t) \langle q | \psi[Z](t) \rangle, \quad (1.646)$$

$$\rho_R(t') = \left\langle |\psi[Z](t')\rangle \langle \psi[Z](t')| \right\rangle_{[Z, \bar{Z}]}. \quad (1.647)$$

Durch Differenziation dieser ersten Gleichung erhalten wir einen Ausdruck für die Schrödingergleichung, also eine Darstellung für die Zeitentwicklung $i\hbar\partial_t|\psi[Z](t)\rangle$. Da nun allerdings noch immer eine zeitlich nichtlokale Kopplung in Gleichung (1.644) vorhanden ist, führt dies auf eine Schrödingergleichung, in welcher noch eine Funktionalableitung auftritt,

$$i\hbar\partial_t|\psi[Z](t)\rangle = H_S|\psi[Z](t)\rangle - \hat{q}Z(t)|\psi[Z](t)\rangle - L(t, s) \cdot \frac{\delta|\psi[Z]\rangle}{\delta Z(s)}. \quad (1.648)$$

Wir erhalten somit zwar formal eine Schrödingergleichung, allerdings erreichen wir damit noch keine zeitlich lokale Entwicklung des Zustandes, womit die Lösung solcher Differenzialgleichungen nur für spezielle Probleme überhaupt möglich ist. Selbst bei einer numerischen Auswertung bereitet das Optimierungsproblem für die Funktion $q(t)$ große Probleme [63].

Als Ausweg bietet sich nun eine ähnliche Prozedur für den verbleibenden Kopplungsterm der Pfade $q(t)$ an $q(t')$ und analog $q'(t)$ an $q'(t')$ aus Gleichung (1.630) an,

$$\frac{1}{2\hbar} \left[q(t) \cdot L(|t - t'|) \cdot q(t') + q'(t) \cdot L^*(|t - t'|) \cdot q'(t') \right]. \quad (1.649)$$

Im Unterschied zum obigen Fall handelt es sich bei diesem Kopplungsterm um einen symmetrischen Integralkern, was wiederum eine Hubbard-Stratonovich Transformation ermöglicht, da hier nun im Unterschied zum vorhergehenden Fall die gleichen Pfade koppeln,

$$\int \mathcal{D}Y \exp \left[\frac{1}{\hbar} \left\{ -\frac{1}{2} Y(s) \cdot [L(|s - s'|)]^{-1} \cdot Y(s') + iq(s) \cdot Y(s) \right\} \right] \\ = Z[0] \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} q(s) \cdot L(|s - s'|) \cdot q(s') \right] \quad (1.650)$$

$$= \left\langle \exp \left[\frac{i}{\hbar} q(s) \cdot Y(s) \right] \right\rangle_{[Y]}. \quad (1.651)$$

Hier soll wieder das Integralmaß $\mathcal{D}y$ so skaliert werden, dass $Z[0] = 1$ gilt. Die Statistik für diese reelle gaußsche stochastische Kraft ist wiederum durch

die Korrelationsfunktionen

$$\langle Y(t) \rangle = 0, \quad (1.652)$$

$$\langle Y(t)Y(t') \rangle = \hbar L(|t - t'|), \quad (1.653)$$

gegeben. Da die Zweipunkt-Korrelationsfunktion im Falle der reellen Kraft $Y(s)$ im Gegensatz zu Gleichung (1.639) symmetrisch ist, entspricht es der Erwartung, dass hier das Argument der Badkorrelationsfunktion als Betrag eingeht. Während jedoch bei der stochastischen Kraft $Z(t)$ und $\bar{Z}(t)$ ein reelles Wahrscheinlichkeitsmaß entsprechend Gleichung (1.641) und (1.642) für den Real- und Imaginärteil vorliegt, handelt es sich im letzten Fall um einen komplexen und damit nicht komplett reell stochastischen Gewichtungsfaktor. Dies ist ein deutlicher Hinweis auf ein quantenmechanisches Verhalten. Im klassischen Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ verschwindet der Imaginärteil von $\hbar L(|t - t'|)$ und die stochastische Kraft $Y(t)$ wird dann mit einem reellen Wahrscheinlichkeitsmaß gewichtet und ist somit klassisch interpretierbar. Ein analoges Vorgehen mit einer komplexen stochastischen Kraft Y , \bar{Y} würde ebenfalls keinen Ausweg darstellen, da der Kern $L(|t - t'|)$ nicht hermitesch ist und damit das gaußsche Integral entsprechend Gleichung (1.347) ebenfalls einen nichtrealen Exponenten aufweisen würde.

Der Feynman-Vernon Propagator J_{FV} besitzt nach der letzten Transformation die einfache Gestalt

$$J_{\text{FV}}(q_f, q'_f, t_f | q_i, q'_i, t_i) = \left\langle H[Y, Z](q_f, t_f | q_i, t_i) \bar{H}[Y', \bar{Z}](q'_f, t_f | q'_i, t_i) \right\rangle_{[Y, Y', Z, \bar{Z}]} \quad (1.654)$$

mit dem Propagator $H[Y, Z]$, welcher nun ein Funktional der komplexen stochastischen Kraft Z und der reellen stochastischen Kraft Y darstellt,

$$H[Y, Z] = \int_{q_i(t_i)}^{q_f(t_f)} \mathcal{D}q \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_S[q] + S_T[q] + q(s) \cdot \{Z(s) + Y(s)\} \right) \right]. \quad (1.655)$$

Die reelle Kraft $Y(s)$ setzt sich somit additiv mit der komplexen Kraft $Z(s)$ zu der effektiven komplexen stochastischen Kraft $\Xi(t) = Y(t) + Z(t)$ zusammen. Die Schrödingergleichung erhält dadurch die bekannte zeitlokale Gestalt

$$i\hbar \partial_t |\psi[Y, Z](t)\rangle = H_S |\psi[Y, Z](t)\rangle - \hat{q} \Xi(t) |\psi[Y, Z](t)\rangle, \quad (1.656)$$

und ist im Vergleich mit Gleichung (1.648) frei von Funktionalableitungen. Die effektive stochastische Kraft $\Xi(t)R$ genügt den Korrelationsfunktionen

$$\langle \Xi(t) \rangle = 0, \quad (1.657)$$

$$\langle \Xi(t) \bar{\Xi}(t') \rangle = 2\hbar L'(t - t') + 2i \Theta(t - t') L''(t - t'), \quad (1.658)$$

mit einem kausalen Imaginärteil entsprechend Gleichung (1.574) und dem entsprechenden Anzeit des Propagators $\overline{H}[Y', \overline{Z}]$ mit dazugehöriger Schrödingergleichung und Kraft $\Xi'(t) = Y'(t) + Z(t)$.

Bei der Beschreibung des Influenzfunktionalis in Abschnitt 1.4.15 erwies sich die Darstellung der Pfade q, q' durch eine klassische Koordinate $r = (q + q')/2$ und eine Fluktuationskoordinate $y = q - q'$ als wohl angepaßt – speziell auch zur Beschreibung des klassischen Grenzfalls in Abschnitt 1.4.16. Daher betrachten wir nun noch die Pfadkopplung in der Darstellung entsprechend Gleichung (1.572) und (1.573),

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{FV}}[y, r] &= \frac{1}{2\hbar} y(t) \cdot L'(t, t') \cdot y(t') \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} y(t) \cdot \left[2\Theta(t - t') L''(t - t') + 2M\gamma(0)\delta(t - t') \right] \cdot r(t'). \end{aligned} \quad (1.659)$$

Auch hier ist eine Entkopplung analog zu den vorausgegangenen gaußschen Transformationen möglich [66, 67, 68]. Man erhält analog

$$\left\langle \exp \left[\frac{1}{\hbar} \left(y(t) \cdot Y(t) + y \cdot \overline{Z} + ir(t) \cdot Z(t) \right) \right] \right\rangle_{[Y, Z, \overline{Z}]}, \quad (1.660)$$

wobei nun die Statistik die folgende Form annimmt,

$$\langle Y(t)Y(t') \rangle = \hbar L'(t - t'), \quad (1.661)$$

$$\langle Z(t)\overline{Z}(t') \rangle = \hbar \mathcal{X}(t - t'). \quad (1.662)$$

Der reelle und kausale Kern $\mathcal{X}(t - t')$ entsprechend Gleichung (1.660) hat dabei die Gestalt

$$\mathcal{X}(t - t') = 2\Theta(t - t')L''(t - t') + 2M\gamma(0)\delta(t - t'), \quad (1.663)$$

$$= 2\Theta(t - t') \left(L''(t - t') + 2M\gamma(0)\delta(t - t') \right). \quad (1.664)$$

Im klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ erhält man nicht sofort eine reelle effektive stochastische Kraft, wie man dies vielleicht im Hinblick auf die klassische Langevin-Gleichung (1.32) erwarten würde. Der Grund hierfür liegt darin, dass die Koordinate $y(t)$ keine klassische Koordinate darstellt und daher wie in Abschnitt 1.4.16 gezeigt und diskutiert wurde, zuerst ausintegriert werden muss.

Um nun beispielsweise eine Monte-Carlo Simulation durchführen zu können, muss man sich die stochastischen Kräfte Y und Z generieren. Dazu bedient man sich der Eigenschaft aus Gleichung (1.106) welche besagt, dass die Koeffizienten der Fouriertransformierten der stochastischen Kraft selbst nicht untereinander gekoppelt sind. Daher kann man sich diese Koeffizienten auswürfeln und danach eine Rücktransformation auf die gesuchte Kraft durchführen.

Kapitel 2

Tight-Binding Modelle

2.1 Betrachtung des ungekoppelten Systems

In Kapitel 1.4.10 und 1.4.15 haben wir die Zustandssumme (Imaginärzeitpropagation) und die Realzeitentwicklung eines an ein Bad gekoppelten Systems, welches durch die Hamiltonfunktion (1.4) beschrieben wird, betrachtet. In beiden Fällen konnten wir die harmonischen Badfreiheitsgrade ausintegrieren, wodurch das sogenannte Influenzfunktional \mathcal{F} entstand, welches die Systemkoordinate q zu verschiedenen Zeiten koppelt¹. Diese nichtlokale zeitliche Kopplung entsteht quasi als Strafe dafür, dass wir die Badfreiheitsgrade ausintegrieren. Das Gesamtsystem bleibt lokal in der Zeit, die effektive Systembeschreibung durch das Influenzfunktional generiert jedoch einen Gedächtnisterm für die Systemkoordinate.

Im Folgenden wollen wir uns mit Systemen bei tiefen Temperaturen beschäftigen. Unter tiefer Temperatur verstehen wir dabei folgendes: wenn sich das System mit der Ortskoordinate q im Potenzial $V(q)$ bewegt, dann soll ein Übergang in ein benachbartes Minima nur durch Tunneln mittels eines Tunnelmatrixelements Δ (Übergangsamplitude) möglich sein – ein thermisch aktivierter Übergang soll aufgrund der niederen Systemenergie ω_0 und der tiefen Temperatur T stark unterdrückt sein². Gleiches gilt dann natürlich auch für externe Störungen mit einer Kraft ϵ . Zwischen den lokalen Minima soll eine genügend hohe Barriere V_b vorhanden sein, so dass das Tunneln exponentiell unterdrückt wird. Wenn man nun diese Größen in Energien aus-

¹ Bei der Imaginärzeitpropagation fanden wir eine Kopplung des selben Pfades q zu verschiedenen Zeiten (1.475), (1.477), während bei der Realzeitpropagation eine Kopplung der beiden Pfade q und q' zu verschiedenen Zeiten vorlag (1.564).

²Erst bei Erreichen des absoluten Temperatur-Nullpunkts $T = 0$ verschwindet der Beitrag des thermisch aktivierten Übergangs vollständig.

drückt, so erhält man den Parameterbereich für Tight-Binding Systeme [1]

$$V_b \gg \hbar\omega_0 \gg k_B T, \hbar|\epsilon|, \hbar\Delta. \quad (2.1)$$

Aus den Betrachtungen des 1. Kapitels wissen wir, dass zum Pfadintegral im wesentlichen der klassische Pfad und Fluktuationen um diesen Pfad herum beitragen. Aufgrund der klassischen Mechanik erkennen wir jedoch sofort, dass es für die oben gemachten Annahmen keine klassische Lösung gibt, welche zwei benachbarte Minima miteinander verbindet und gleichzeitig die Wirkung des Systems minimieren würde. Dahinter verbirgt sich die Tatsache, dass Tunneln keinem klassischen Vorgang entspricht, sondern nur voll quantenmechanisch beschreibbar ist. Die Quantenmechanik liefert hier also keine Korrektur zum klassischen Pfad, sondern der gesamte Prozess trägt die quantenmechanische Signatur.

Es stellt sich nun nach diesen Vorüberlegungen die Frage, wie der Propagator für einen solchen Übergang approximativ berechnet werden kann, wenn die Entwicklung um den stationären Zustand nicht möglich ist, weil eine solche klassische Lösung nicht existiert. Eine wohlbekannte Möglichkeit besteht nun darin, den Propagator in Imaginärzeit $\tau = it$ zu berechnen und erst am Ende der Berechnung zur Realzeit t zurückzuwechseln. Dies liegt daran, dass die euklidische Wirkung ein invertiertes Potenzial besitzt, womit eine klassische Lösung asymptotisch existiert. Dies wollen wir im Folgenden genauer anhand zweier Beispiele betrachten; zum einen untersuchen wir das Schmid-Modell (Sine-Gordon Potenzial)

$$V_S[q] = \mu_S^2 \left(1 - \cos[2\pi q/q_0]\right), \quad \mu_S^2 = \frac{M\Omega^2 q_0^2}{(2\pi)^2}, \quad (2.2)$$

und zum anderen das sehr eng verwandte Doppelmuldenmodell mit der euklidischen Wirkung

$$V_D[q] = \mu_D^2 \left(q - \frac{q_0}{2}\right)^2 \left(q + \frac{q_0}{2}\right)^2, \quad \mu_D^2 = \frac{M\Omega^2}{2q_0^2}. \quad (2.3)$$

Entwickelt man die beiden Potenziale um eines ihrer Minima q_{\min} , so erhalten wir für die Fluktuationen $\eta = q - q_{\min}$ mit der obigen Parametrierung der Kopplungskonstanten μ_S bzw. μ_D in erster Näherung das harmonische Potenzial

$$M\Omega^2 \eta^2 / 2. \quad (2.4)$$

Der Parameter Ω ist daher der entscheidende Kopplungsparameter der beiden Modelle.

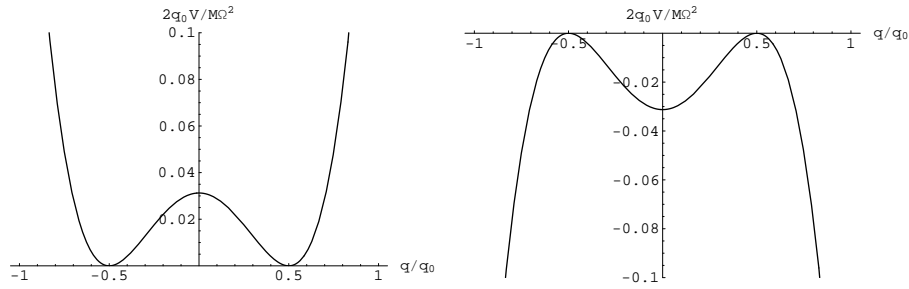


Abbildung 2.1: Das linke Bild zeigt das Potenzial des Doppelmuldensystems im Realzeitfall. Eine klassische Lösung, welche das linke mit den rechten Minima verbindet, existiert nicht. Geht man nun zu Imaginärzeit über, so hat man ein invertiertes Potenzial. Hier gibt es eine asymptotische klassische Lösung für die Bewegung von einem Maxima zum anderen.

Die Wirkung wird extremal unter der Voraussetzung $\frac{\delta S^{(E)}[q]}{\delta q(\tau)} \equiv 0$. Im Realzeitfall finden wir keine Lösung zur Bewegungsgleichung, welche als Randbedingung einen Übergang von einem Potenzialminima in ein benachbartes Minima erlaubt. Für die Bewegungsgleichung in Imaginärzeit finden wir jedoch den Ausdruck

$$M\ddot{q}(\tau) - \partial_q V(q(\tau)) = 0. \quad (2.5)$$

Dies entspricht dem Realzeitfall mit invertiertem Potenzial $-V(q)$, entsprechend Abbildung 2.1. Die erste Integration dieser Gleichung liefert den Energieerhaltungssatz in euklidischer Zeit mit der Integrationskonstanten E für die Systemenergie,

$$\frac{1}{2}M\dot{q}^2(\tau) - V(q(\tau)) = E. \quad (2.6)$$

Eine triviale Lösung des Schmid-Modells ist dabei durch die konstante Funktion

$$q = nq_0 \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{Z} \quad (2.7)$$

bzw. für das Doppelmuldenmodell durch

$$q = \pm \frac{q_0}{2} \quad (2.8)$$

gegeben und entspricht einer stationären Lösung in einem der beiden Potenzialminima. Übergänge von einer Mulde in eine benachbarte Mulde werden, sofern man nur das Potenzial betrachtet, durch eine Theta-Funktion minimiert, also $q \rightarrow q \pm q_0 \Theta(\tau - \tau_0)$. Demgegenüber konkurriert der kinetische

Term mit einer energetisch favorisierten glatten Funktion, so dass je nach den vorgegebenen Modellparametern ein mehr oder weniger rascher Wechsel von q_n nach $q_{n\pm 1}$ stattfindet. Integriert man Gleichung (2.6), so erhält man als sogenannte Kink-Lösung (Instantonlösung) zur Energie $E = 0$ die Form

$$\bar{q}_S^{(\pm)}(\tau) = nq_0 \pm \frac{2q_0}{\pi} \arctan [e^{\Omega(\tau-\tau_0)}] \quad (2.9)$$

für das Schmid-Modell und entsprechend

$$\bar{q}_D^{(\pm)}(\tau) = \pm \frac{q_0}{2} \tanh [\Omega(\tau - \tau_0)/2] \quad (2.10)$$

für das Doppelmuldenmodell. Diese asymptotische Lösung existiert nur für einen Übergang von $\tau = -\infty$ nach $\tau = \infty$. Allerdings strebt die Kink-Lösung sehr schnell gegen den Grenzwert des Minimums, so dass für eine endliche Übergangszeit die Differenz exponentiell gegen Null strebt, solange die Übergangszeit viel größer als die Übergangsbreite Ω^{-1} ist. Wichtig ist zu erkennen, dass es sich bei einer solchen Kink-Lösung um eine nichtperturbative Entwicklung in μ bzw. Ω handelt, da im Falle $\Omega \rightarrow 0$ die Kink-Lösung konstant wird und damit in den Grundzustand entsprechend Gleichung (2.4) übergeht und damit der Kink-Beitrag gänzlich verschwindet. Die Wirkung des Systems für diese Kink-Lösung $S_{kl} = S[\bar{q}]$ nimmt die folgende Gestalt an,

$$S_S[\bar{q}_S^{(\pm)}] = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau M \dot{\bar{q}}_S^{(\pm)}(\tau)^2 = \int_0^{\pm q_0} dq \sqrt{2MV_S(q)} = \pm \frac{2}{\pi^2} M\Omega q_0^2, \quad (2.11)$$

$$S_D[\bar{q}_D^{(\pm)}] = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau M \dot{\bar{q}}_D^{(\pm)}(\tau)^2 = \int_{\mp q_0/2}^{\pm q_0/2} dq \sqrt{2MV_D(q)} = \pm \frac{1}{6} M\Omega q_0^2. \quad (2.12)$$

Der Übergang von der Integration über $d\tau$ zur Integration über dq ergibt sich aus Gleichung (2.5) und ermöglicht eine einfache Berechnung der klassischen Wirkung. Wir entwickeln nun die Wirkung um die Kink-Lösung herum. Der lineare Term verschwindet aufgrund der Bewegungsgleichung. Für die quadratische Entwicklung finden wir

$$\begin{aligned} \hat{F}_S(\tau, \tau') &= \left. \frac{\delta^2 S_S[q]}{\delta q(\tau) \delta q(\tau')} \right|_{\bar{q}_S^{(\pm)}} \quad (2.13) \\ &= -M\delta(\tau - \tau') \left\{ \partial_{\tau'}^2 - \Omega^2 \left[1 - \frac{2}{1} \frac{1}{\cosh^2[\Omega(\tau - \tau_0)]} \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{F}_D(\tau, \tau') &= \left. \frac{\delta^2 S_D[q]}{\delta q(\tau) \delta q(\tau')} \right|_{\bar{q}_D^{(\pm)}} \quad (2.14) \\ &= -M\delta(\tau - \tau') \left\{ \partial_{\tau'}^2 - \Omega^2 \left[1 - \frac{3 \cdot 2}{4} \frac{1}{\cosh^2[\Omega(\tau - \tau_0)/2]} \right] \right\}. \end{aligned}$$

In beiden Fällen bekommen wir ein wohlbekanntes Potenzial, welches in der Quantenmechanik unter dem Namen Rosen-Morse oder Eckhardt Potenzial bekannt ist bzw. unter der Bezeichnung Pöschel-Teller Potenzial zu finden ist [14, 16, 23, 24, 25]. Der Fluktuationsoperator (2.13), (2.14) entspricht bis auf einen Vorfaktor $\hbar^2/(2M)$ dem Hamiltonoperator eines Teilchens mit Masse M mit der generischen Form der dazugehörigen Schrödingergleichung

$$\left[\partial_\tau^2 + \kappa^2 + \frac{\alpha^2 \lambda(\lambda - 1)}{\cosh[\alpha\tau]} \right] u(\tau) = 0 \quad (2.15)$$

in diesem Potenzial, sofern wir die Imaginärzeit τ mit der Ortskoordinate identifizieren. Für Bereiche weit entfernt vom Zentrum des lokalen Potenzialminimum erhalten wir als Lösung sofort eine Impulseigenfunktion $\propto e^{i\kappa\tau}$ zur Energie $E(\kappa) = \hbar^2 \kappa^2 / (2M)$. Für Energien unterhalb dieser Schwelle gibt es eine feste Anzahl von gebundenen Lösungen.

Die zur Berechnung des Pfadintegrals benötigten Eigenfunktion $\eta_\kappa(\tau)$ und Eigenwerte $\xi(\kappa)$ des Fluktuationsoperators

$$\hat{F}(\tau, \tau') \cdot \eta_\kappa(\tau') = \xi(\kappa) \eta_\kappa(\tau) , \quad (2.16)$$

$$\xi(\kappa) = M(\kappa^2 + \Omega^2) = M \left(\Omega^2 + \frac{2ME(\kappa)}{\hbar^2} \right) \quad (2.17)$$

entsprechen daher bis auf einen Vorfaktor den Energieeigenfunktionen und Energieeigenwerten des Rosen-Morse Potenzials. Dessen Form ist in Abbildung 2.2 dargestellt und besitzt ein lokales Minimum an der Stelle $\tau = \tau_0$. Interessanterweise besitzen beide Modelle eine fast identische Beschreibung für die Fluktuationen um die Kink-Lösung herum. Wie in Literatur [24] beschrieben, lässt sich die Differenzialgleichung (2.16) in die Standardform einer Hypergeometrischen Differenzialgleichung überführen. Eine ausführliche Diskussion der Eigenfunktionen und Eigenwerte findet man in der zuletzt genannten Literatur. Es zeigt sich dabei, dass es im Falle des Doppelmuldenmodells eine und beim Schmid-Modell genau zwei gebundene Eigenfunktionen gibt. Im ersten Fall finden wir die Eigenwerte

$$\xi_0^b = 0 , \quad \xi_1^b = \frac{3}{4} M \Omega^2 , \quad (2.18)$$

zu den Eigenfunktionen

$$\eta_0^b(\tau) = \sqrt{\frac{3\Omega}{8}} \frac{1}{\cosh^2[\Omega(\tau - \tau_0)/2]} , \quad \eta_1^b(\tau) = \sqrt{\frac{3\Omega}{4}} \frac{\sinh[\Omega(\tau - \tau_0)/2]}{\cosh^2[\Omega(\tau - \tau_0)/2]} , \quad (2.19)$$

während beim Schmid-Modell nur der Eigenwert

$$\xi_0^b = 0 \quad \text{zur Eigenf.} \quad \eta_0^b(\tau) = \sqrt{\frac{\Omega}{2}} \frac{1}{\cosh[\Omega(\tau - \tau_0)]} \quad (2.20)$$

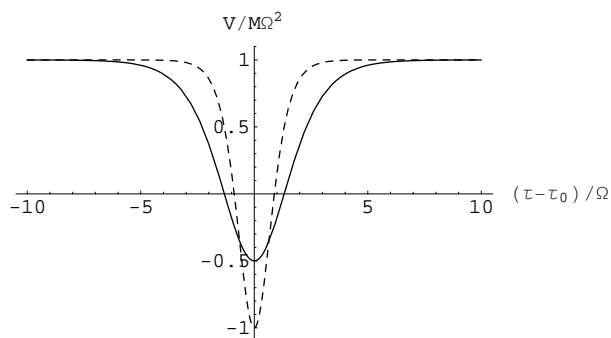


Abbildung 2.2: Die Grafik zeigt das Rosen-Morse Potenzial. Der gestrichelte Graph gibt das Potenzial entsprechend dem Doppelmuldenmodell wieder, während der Graph mit der durchgezogenen Linie das entsprechende Potenzial für das Schmid-Modell zeigt. Die Verschiebung in y -Richtung ist dabei Definitionssache.

auftritt. Der jeweils nächste Energieeigenwert fällt bei beiden Modellen auf den Beginn des kontinuierlichen Spektrums mit den Energieeigenwert $E = V_{\pm\infty} = M\Omega^2$. Der niederste Energieeigenwert ξ_0^b gehört in beiden Modellen zur Energie $E_0 = 0$. Die physikalische Bedeutung werden wir in Kürze diskutieren. Interessanterweise kommt bei beiden Modellen noch hinzu, dass die Parameter genau so vorliegen, dass es sich um sogenannte reflexionsfreie Potentiale handelt. Wie wir oben schon erwähnt haben, liegen die Lösungen zur Energie $E \geq V_{\pm\infty}$ asymptotisch als Impulseigenfunktionen vor und werden an dem lokal ausgebildeten Minima um τ_0 herum gestreut. Die exakten reellen Lösungen zu Gleichung (2.15) entsprechen Eigenfunktionen zum Fluktuationsoperator mit Eigenwert $\kappa^2 + \Omega^2$. Da ein spiegelsymmetrisches Potenzial vorliegt, finden wir Eigenfunktionen mit gerader/ungerader Parität in der Form

$$u_e(\tau) = \cosh^\lambda[\alpha\tau] {}_2F_1\left(a, a^*, \frac{1}{2}, -\sinh^2[\alpha\tau]\right), \quad (2.21)$$

$$u_o(\tau) = \cosh^\lambda[\alpha\tau] \sinh[\alpha\tau] {}_2F_1\left(a + \frac{1}{2}, a^* + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\sinh^2[\alpha\tau]\right), \quad (2.22)$$

$$a = \frac{1}{2}\left(\lambda + i\frac{\kappa}{\alpha}\right). \quad (2.23)$$

Als asymptotische Lösung findet man für die obige Lösung die Form [24, 51]

$$\lim_{|\tau| \gg \Omega^{-1}} u_e(\tau) = C_e \cos[\kappa|\tau| + \delta_e], \quad (2.24)$$

$$\lim_{|\tau| \gg \Omega^{-1}} u_o(\tau) = \text{sign}[\tau] C_o \cos[\kappa|\tau| + \delta_o], \quad (2.25)$$

also wie zu erwarten die Impulseigenfunktionen, wobei die Koeffizienten die

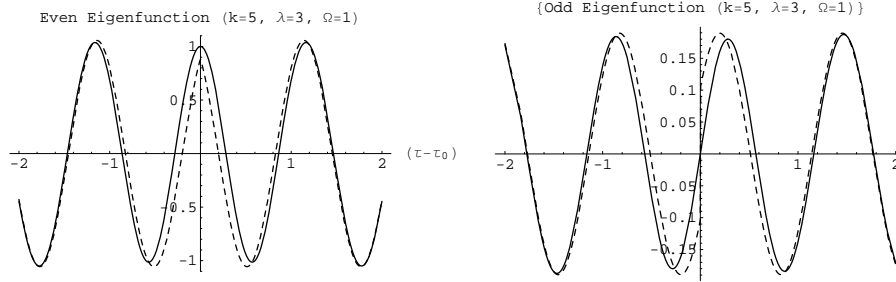


Abbildung 2.3: In dieser Abbildung ist die asymptotische Lösung (gestrichelt) gegen die exakte Lösung der Eigenfunktionen des Fluktationsoperators \hat{F}_S aufgetragen. Die asymptotische Lösung strebt dabei rasch gegen die exakte Lösung, wobei der Übergangsbereich der Breite des Rosen-Morse Topfs (Abb. 2.2) entspricht.

folgende Form besitzen

$$\delta_{e,o} = \arg[X_{e,o}], \quad C_{e,o} = |X_{e,o}|, \quad (2.26)$$

$$X_e = \frac{\Gamma[i\kappa/\alpha] \exp[-i\kappa \ln[2]/\alpha]}{\Gamma[\lambda/2 + i\kappa/(2\alpha)] \Gamma[(1-\lambda)/2 + i\kappa/(2\alpha)]}, \quad (2.27)$$

$$X_o = \frac{\Gamma[i\kappa/\alpha] \exp[-i\kappa \ln[2]/\alpha]}{\Gamma[(\lambda+1)/2 + i\kappa/(2\alpha)] \Gamma[(2-\lambda)/2 + i\kappa/(2\alpha)]}. \quad (2.28)$$

Abbildung 2.3 zeigt die schnelle Konvergenz der Funktion $u_{e,o}$ im Vergleich an die asymptotischen Lösung, welche gestrichelt gezeichnet ist.

Für eine von links einlaufende Welle ergibt sich dabei der stationäre Zustand [24]

$$\lim_{\tau \ll \Omega^{-1}} u(\tau) \sim e^{i\kappa\tau} + R_\kappa e^{-i\kappa\tau}, \quad (2.29)$$

$$\lim_{\tau \gg \Omega^{-1}} u(\tau) \sim T_\kappa e^{i\kappa\tau}, \quad (2.30)$$

wobei T_k dem Transmissionskoeffizienten und R_k dem Reflexionskoeffizienten einer Welle mit Wellenvektor k entspricht. Ausgedrückt durch die Parameter der generischen Differentialgleichung (2.15) finden wir für die entsprechenden Amplituden

$$|R|^2 = \frac{1}{1+p^2}, \quad |T|^2 = \frac{p^2}{1+p^2}, \quad p = \frac{\sinh[\pi\kappa/\alpha]}{\sin[\pi\lambda]}, \quad (2.31)$$

wobei der Erhaltungssatz $|R|^2 + |T|^2 = 1$ automatisch erfüllt ist. Dabei entspricht $\kappa^2 = 2ME/\hbar^2 - 1 = \xi_n - 1$. Im Falle des Doppelmuldenpotenzials finden wir $\alpha = \Omega/2$ und $\lambda = 2$, während dem Schmid-Modell $\alpha = \Omega$ und $\lambda = 3$ entspricht. In beiden Fällen geht dabei der Parameter p gegen Unendlich, da λ ganzzahlig vorliegt, so dass die Amplitude $|R|^2$ verschwindet und

$|T|^2$ gegen Eins geht. Der Parameter λ hängt dabei in keiner Weise von den ursprünglichen Parametern des Doppelmuldenpotenzials bzw. des Schmid-Modells ab. Gleichzeitig besteht für den Phasenversatz $\delta_{e,o}$ die Beziehung

$$\delta_e = \frac{\pi}{2} + \delta_o = \delta, \quad p = \tan[\delta_e - \delta_o], \quad (2.32)$$

so dass die Funktionen u_e und u_o sich asymptotisch entsprechend der folgenden Darstellung verhalten,

$$\lim_{|\tau| \gg \Omega^{-1}} u_e(\tau) = C_e \cos[\kappa|\tau| + \delta], \quad (2.33)$$

$$\lim_{|\tau| \gg \Omega^{-1}} u_o(\tau) = \text{sign}[\tau] C_o \sin[\kappa|\tau| + \delta]. \quad (2.34)$$

Für ganzzahliges l , wie es in den hier betrachteten Modellen der Fall ist, vereinfacht sich die Phase δ zu [14]

$$\delta = -\frac{i}{2} \ln \left[\prod_{\ell=1}^{\lambda-1} \frac{\kappa + i\alpha\ell}{\kappa - i\alpha\ell} \right]. \quad (2.35)$$

2.1.1 Berechnung des freien Kink-Beitrags

Mit diesen Vorüberlegungen können wir nun den System-Beitrag zu genau einem Kink-Übergang berechnen. Betrachtet man die Amplitude eines Übergangs, so tragen dazu auch Übergänge höherer Ordnung bei; diese werden hier zunächst nicht berücksichtigt. Dazu entwickeln wir nun das System um die klassische Imaginärzeit-Lösung herum (vgl. Abschnitt 1.4.6). Dadurch bekommen wir in der quadratischen Entwicklung für den Propagator, welcher von Minimum n zum Minimum $n+1$ führt, den Ausdruck

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \langle n \pm 1 | U(\tau'' = L, \tau' = -L) | n \rangle_{\mathcal{O}(1)} &= \int_{(n)}^{(n\pm 1)} \mathcal{D}q \exp[-S[q]/\hbar] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi_0(\tau_0)}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-S[\bar{q}^{(\pm)}]/\hbar} \mathcal{N} \int_{\eta \perp \partial\tau_0 \bar{q}} \mathcal{D}\eta \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \eta(\tau) \cdot \hat{F}(\tau, \tau') \cdot \eta(\tau') \right], \end{aligned} \quad (2.37)$$

wobei der Fluktuationsoperator $\hat{F}(\tau, \tau')$ in Gleichung (2.16) definiert wurde. Hier sind nun ein paar klärende Worte notwendig. Zum einen gibt es, wie wir im vorigen Abschnitt gesehen haben, nicht nur eine klassische Lösung sondern ein kontinuierliches Set von Lösungen, welches durch die Übergangskoordinate τ_0 repräsentiert wird. Daher wird hier über dieses Set integriert.

Bei der Integration über die Fluktuationskoordinate $\eta(\tau)$ müssen wir nun sicherstellen, dass nur Fluktuationen beitragen, welche zu einer infinitesimalen Verschiebung der klassischen Lösung in τ_0 orthogonal sind, so dass hier nicht zweimal über dieselbe Koordinate integriert wird. Dies wird mit der Symbolik $\eta \perp \partial_{\tau_0} \bar{q}$ verdeutlicht. Da eine Verschiebung in τ_0 Richtung keiner Energie bedarf, entspricht die Eigenfunktion $\eta_0(\tau)$ zum Fluktuationsoperator \hat{F} aus Gleichung (2.13), (2.14) mit Einwert $\xi_0 = 0$ gerade einer solchen Mode. Im letzten Abschnitt haben wir gesehen, dass in beiden Modellen gerade eine solche Eigenfunktion zum Eigenwert Null existiert. Durch Vergleich finden wir den genauen Zusammenhang zwischen der Translationsmode und der Eigenfunktion zum Eigenwert Null (2.19)/(2.20),

$$\partial_{\tau_0} \bar{q}_S^{(\pm)} = \mp \sqrt{S_S/M} y_0^S, \quad (2.38)$$

$$\partial_{\tau_0} \bar{q}_D^{(\pm)} = \mp \sqrt{S_D/M} y_0^D. \quad (2.39)$$

Dies ist auch zu erwarten, da in beiden Modellen eine Translationsinvarianz der Kink-Lösung entlang τ_0 und somit entlang der Koordinate τ vorliegt. Mit der Kenntnis der normierten Eigenfunktionen und Eigenwerte entsprechend Gleichung (2.16) ist es nun ein leichtes, das Pfadintegral über die Fluktuationskoordinate zu berechnen,

$$\int_{\eta \perp \partial_{\tau_0} \bar{q}} \mathcal{D}\eta \exp \left[\frac{1}{2} \eta(\tau) \cdot \hat{F}(\tau, \tau') \cdot \eta(\tau') \right] = \mathcal{N} \prod_{n=1} \left[\int \frac{d\xi_n}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{1}{2\hbar} \lambda_n \xi_n^2} \right] \quad (2.40)$$

$$= \mathcal{N} \prod_{n=1} \frac{1}{\sqrt{\lambda_n}} = \mathcal{N} \frac{1}{\sqrt{\det' \hat{F}}}. \quad (2.41)$$

Der Pfad $q(\tau)$ wurde dabei durch die normierten Eigenfunktionen $\eta_n(\tau)$ entsprechend der Gleichung

$$q(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n \eta_n(\tau) \quad (2.42)$$

parametriert. Dieser Übergang bei der Pfadintegralbeschreibung wurde in ähnlicher Form in Abschnitt 1.4.11 behandelt. Der Prime der Determinante erinnert daran, dass hier der Eigenwert zur Eigenfunktion $\sim \partial_{\tau_0} \bar{q}$ ignoriert wird. Um nun die Normierungskonstante festzulegen, vergleichen wir den Kink-Propagator mit dem Propagator ohne einen Kink-Übergang. In quadratischer Entwicklung der Wirkung finden wir sofort den wohlbekanntem Propagator eines harmonischen Oszillators, welcher in allgemeiner Form in Gleichung (A.80) gegeben ist

$$\langle n | U_0(\infty, -\infty) | n \rangle = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\eta \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \eta(\tau) \cdot \hat{F}_0(\tau, \tau') \cdot \eta(\tau') \right], \quad (2.43)$$

$$(2.44)$$

und den folgenden Normierungsfaktor enthält,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh[\Omega L]}} = \lim_{L \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{M\Omega}{\pi\hbar}} e^{-\Omega L/2}. \quad (2.45)$$

Um ein diskretes Spektrum vom Eigenwerten zu erhalten, betrachten wir dazu den Propagator zu einer endlichen Imaginärzeit-Differenz L . Der Fluktuationsoperator $\hat{F}_0(\tau, \tau')$ besitzt hier die einfache harmonische Form

$$\hat{F}_0(\tau, \tau') = -M\delta(\tau - \tau') \{ \partial_{\tau'}^2 - \Omega^2 \}, \quad (2.46)$$

mit den Eigenwerten ξ^0 im Vergleich zu den Eigenwerten ξ des Fluktuationsoperators \hat{F} . Für den Fluktuationsanteil (2.40) finden wir damit

$$\mathcal{N} \prod_{n=1} \frac{1}{\sqrt{\xi_n}} = \mathcal{N} \frac{1}{\sqrt{\prod_n \xi_n^0}} \frac{\sqrt{\prod_n \xi_n^0}}{\sqrt{\prod_n \xi_n}} = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh[\Omega L]}} \sqrt{\frac{\prod_n \xi_n^0}{\prod_n \xi_n}}. \quad (2.47)$$

Dabei ist zu beachten, dass es Eigenwerte zum Operator \hat{F} für gebundene Zustände gibt, welche im freien Fall nicht existieren. Diese Eigenwerte zu gebundenen Zuständen müssen separat behandelt werden. Zur Berechnung des Quotienten

$$\sqrt{\frac{\prod_n \xi_n^0}{\prod_n \xi_n}} = \sqrt{\frac{\prod_n \xi_n^0}{\prod_n \xi_n}} \Big|_{\text{unbound}} \sqrt{\frac{1}{\prod_{l=1} \xi_l^b}} \quad (2.48)$$

entsprechend den nichtgebundenen Zuständen existieren mehrere Methoden. Als Fußgänger methode können die diskreten Eigenwerte für eine endliche Imaginärzeit L verglichen werden, oder aber es kann beispielsweise die Methode von Gelfand-Yaglom angewandt werden [14, 15]. Dabei finden wir für das Doppelmuldenpotenzial den Wert $3\Omega^2$ und für das Schmid Modell 2Ω . Indem wir nun noch durch die gebundenen Zustände (2.18) bzw. (2.20) dividieren, finden wir für den Fluktuationsfaktor (2.40) im Doppelmuldenmodell

$$\mathcal{N} \prod_{n=1} \frac{1}{\sqrt{\xi_n}} = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh[\Omega L]}} \frac{3\Omega^2}{\sqrt{3/4}\Omega} = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh[\Omega L]}} \sqrt{12}\Omega, \quad (2.49)$$

während beim Schmid-Modell nur der gebundene Zustand mit Eigenwert Null vorhanden ist und wir somit direkt

$$\mathcal{N} \prod_{n=1} \frac{1}{\sqrt{\xi_n}} = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh[\Omega L]}} 2\Omega, \quad (2.50)$$

erhalten.

Für die verbleibende Integration über die Verschiebung entlang τ_0 finden wir mithilfe von Gleichung (2.38)/(2.39)

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{d\xi_0(\tau_0)}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \lim_{L \rightarrow \infty} \sqrt{S_{D/S}} L. \quad (2.51)$$

Damit erhalten wir zusammenfassend für das Zweizustandssystem

$$\Delta_D^{(\pm)} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \langle n \pm 1 | U(\tau'' = L, \tau' = -L) | n \rangle_{\mathcal{O}(1)} \quad (2.52)$$

$$= \lim_{L \rightarrow \infty} e^{\mp M q_0^2 \Omega / (6\hbar)} \frac{M q_0 \Omega^2}{\pi \hbar} e^{-\Omega L / 2} \quad (2.53)$$

während wir für das Schmid-Modell

$$\Delta_S^{(\pm)} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \langle n \pm 1 | U(\tau'' = L, \tau' = -L) | n \rangle_{\mathcal{O}(1)} \quad (2.54)$$

$$= \lim_{L \rightarrow \infty} e^{\mp 2M q_0^2 \Omega / (\pi^2 \hbar)} \frac{2M q_0 \Omega^2}{\pi^2 \hbar} e^{-\Omega L / 2} \quad (2.55)$$

finden.

2.1.2 Tunnelmatrixelement Δ bei Badankopplung und adiabatische Renormierung

Im letzten Abschnitt haben wir das Tunnelmatrixelement für ein freies System betrachtet. Wenn dieses System nun an ein Bad ankoppelt, so erwarten wir eine Korrektur des Tunnelmatrixelements. Im Grenzfall schwacher Kopplung sollte bei verschwindender Badankopplung das im letzten Abschnitt gefundene Resultat auftreten, während der Grenzfall starker Badankopplung ein komplett anderes Verhalten aufweisen kann. Die volle Berechnung des Tunnelmatrixelements bei Badankopplung wurde für das Zweizustandssystem in Literatur [5] durchgeführt und für das Kosinus-Potenzial in [1] angegeben.

2.1.3 Tight-Binding Beschreibung für das Bad und das Influenzfunktional

Im diesem Grenzübergang können wir nun Übergänge zu benachbarten Potenzialminima durch instantane Übergänge zur Zeit t , also Pfade q proportional zur Theta-Funktion $\Theta(t)$ folgendermaßen parametrisieren

$$q(t) = q_i + q_0 \sum_i u_i \Theta(t - t_i), \quad (2.56)$$

$$q'(t) = q'_i + q_0 \sum_j u'_j \Theta(t - t'_j), \quad (2.57)$$

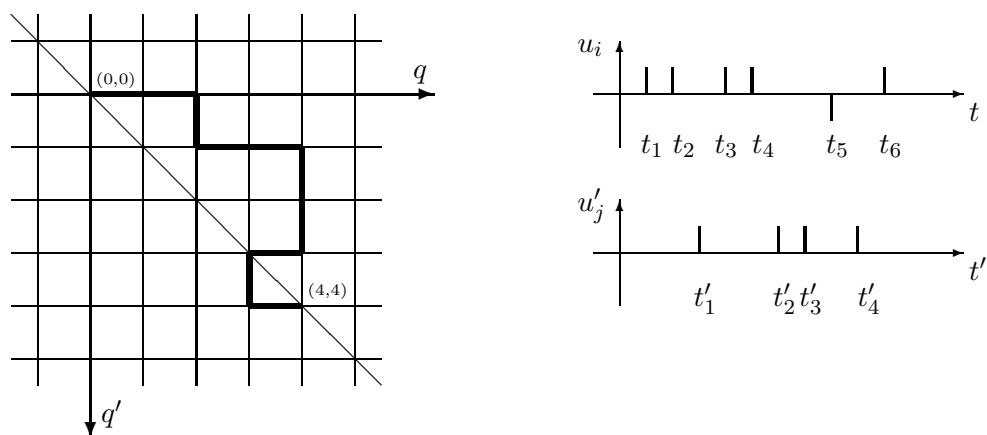


Abbildung 2.4: Ein möglicher Weg im TB Modell.

wobei die Zeiten t_i und t'_j in chronologischer Reihenfolge geordnet sein sollen, so dass ein gegebenes Ladungsset $\{u_i, u'_j\}$ genau einem Pfad auf dem zweidimensionalen Gitter, aufgespannt durch q und q' , entspricht. Dies wird in Abbildung 2.4 verdeutlicht. Für die Sprungzeiten gilt dabei die Einhaltung der chronologischen Reihenfolge

$$0 \leq t_1 \leq t_2 \leq t'_1 \leq t_3 \leq t_4 \leq t'_2 \leq t'_3 \leq t_5 \leq t'_4 \leq t_6 \leq t. \quad (2.58)$$

Wir gehen dabei der Einfachheit halber immer davon aus, dass die Potenzialminima äquidistant mit dem Abstand q_0 angeordnet seien, so dass die Sprunggewichte u_i, u'_j die Werte ± 1 annehmen. Da die Ableitung der Theta-Funktion eine Delta-Distribution liefert, bietet sich eine zweifache partielle Integration des Influenzfunktionals an, so dass wir von der doppelten Zeitintegration zu einer zweifachen Summe über die Sprungzeiten gelangen. Weiterhin müssen wir den Einfluss von Fluktuationen um diese statischen Lösungen herum betrachten - analog zu Fluktuationen um die klassische Lösung im Realzeitfall.

Mit diesen Vorüberlegungen wollen wir nun die Realzeitpropagation und die Zustandssumme solcher Systeme betrachten

2.2 Influenzfunktional

Im nun folgenden Abschnitt werden wir das Influenzfunktional, welches den effektiven Effekt des Bades auf das System beschreibt, an den Formalismus der Sprungpfade in der Tight-Bindung Darstellung anpassen.

2.2.1 Imaginärzeit-Influenzfunktional

Für das Influenzfunktional in der Imaginärzeitdarstellung zur Berechnung der Zustandssumme fanden wir die Form (1.486),

$$Z = \oint \mathcal{D}q \exp \left[\frac{-S_{\text{eff}}[q]}{\hbar} \right], \quad (2.59)$$

$$S_{\text{eff}}[q] = S_S[q] + M\gamma(0) q(\tau) \cdot q(\tau) - \frac{1}{2} q(\tau) \cdot K(|\tau - \tau'|) \cdot q(\tau'). \quad (2.60)$$

Es geht nun darum, für den Kopplungsterm $K(\tau - \tau')$ in der obigen Darstellung mit den Sprungpfaden aus Gleichung (2.56) eine angepasste Form zu finden. Der Betrag im Argument von $K(\tau)$ in der obigen Gleichung ermöglicht die Erweiterung des Definitionsbereiches von $K(\tau)$ auf den hier benötigten Bereich $-\hbar\beta \leq \tau \leq \hbar\beta$ durch periodische Fortsetzung, wie in Abschnitt 1.4.10 detailliert gezeigt wurde. Wir repräsentieren nun den Kopplungsterm $K(\tau - \tau')$ als zweifache Ableitung einer Funktion $\tilde{W}(\tau - \tau')$ nach den Zeiten τ und τ' wie folgt,

$$K(\tau - \tau') = \partial_\tau \partial_{\tau'} \tilde{W}(\tau - \tau'). \quad (2.61)$$

Es erweist sich im Folgenden als hilfreich, die Integrationskonstante so festzulegen, dass $\tilde{W}(0)$ gerade Null ergibt und keine linearen Glieder in τ oder τ' vorliegen. Dann ergibt sich aus $K(\tau)$ die explizite Form für $\tilde{W}(\tau)$ mit

$$\tilde{W}(\tau) = \frac{1}{\pi} \int d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \left[\coth \left(\frac{\omega \hbar \beta}{2} \right) [1 - \cosh(\omega \tau)] + \sinh(\omega \tau) \right], \quad (2.62)$$

wobei ein Betrag im Argument von $\tilde{W}(\tau)$ wieder den erweiterten Definitionsbereich $-\hbar\beta \leq \tau \leq \hbar\beta$ ermöglicht. Da $\tilde{W}(\tau)$ an der Stelle $\tau = 0$ gerade Null ergibt, erzeugt die erste Ableitung keinen Randterm, wohl aber die zweite Ableitung nach dem Argument. Als Korrekturterm finden wir daher für die zweite Ableitung von $\tilde{W}(|t|)$ mit dem Betrag des Arguments,

$$\partial_\tau \partial_{\tau'} \tilde{W}(|\tau - \tau'|) = K(|\tau - \tau'|) - 2 : \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega}, \quad (2.63)$$

$$= K(|\tau - \tau'|) - 2M\gamma(0) : \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta}. \quad (2.64)$$

Weil nun im Imaginärzeitfall die Pfade der Randbedingung $q(0) = q(\hbar\beta)$ genügen, erhalten wir durch partielle Integration des in q quadratischen Termes aus Gleichung (2.60) die einfache Form

$$-\frac{1}{2} q(\tau) \cdot \left[K(|\tau - \tau'|) - 2M\gamma(0) : \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta} \right] \cdot q(\tau') \quad (2.65)$$

$$= \dot{q}(\tau) \cdot \tilde{W}(|\tau - \tau'|) \cdot \dot{q}(\tau') = q_0^2 \sum_{i,j} u_i \tilde{W}(|\tau_i - \tau_j|) u_j. \quad (2.66)$$

Die Randterme der partiellen Integration heben sich wegen der Eigenschaft $\tilde{W}(0) = 0$ des Kernes und den Randbedingungen der Pfade q gerade weg. Durch die partielle Integration sind wir von der Systemkoordinate q zur Systemgeschwindigkeit \dot{q} übergegangen. Dadurch wird das Bad automatisch translationsinvariant, wodurch der Counterterm wie schon im klassischen Fall, Gleichung (1.28) und (1.29), verschwindet. Dadurch nimmt die effektive Wirkung (2.60) die einfache Form

$$S_{\text{eff}}[q] = S_S[q] + q_0^2 \sum_{i,j} u_i \tilde{W}(|\tau_i - \tau_j|) u_j, \quad (2.67)$$

an. Gleichzeitig gilt wegen der Periodizität der Pfade die Einschränkung des Set der Ladungsgewichte u_i auf

$$\sum_i u_i = 0. \quad (2.68)$$

Das Pfadintegral $\int \mathcal{D}q$ geht nun in eine Summe über alle Sets $\{u_i\}$ über, welche mit der obigen Randbedingung (2.68) kompatibel sind. Dies sind gerade alle ladungsneutralen Konfigurationen. Weiterhin wird über alle zu den Ladungsgewichten gehörenden Sprungzeiten $\tau_i = t_i - t_{i-1}$ integriert, wodurch sich die Ordnung des Ladungssets $\{u_i\}$ nicht verändert.

2.2.2 Realzeit-Influenzfunktional

Im Realzeitfall haben wir nun zwei Pfade $q(t)$ und $q'(t')$ mit den allgemeineren Randbedingungen $q(t_i) = q'(t_i) = q_i$ und $q(t_f) = q'(t_f) = q_f$, wenn wir uns für das Betragsquadrat der Übergangsamplitude entsprechend Gleichung (1.561) interessieren. Das Influenzfunktional (1.564) nimmt dadurch ebenfalls eine etwas komplexere Form an als im vorangegangenen Imaginärzeitfall. Wir definieren nun wieder den relevanten Integralkern $L(t)$ aus Gleichung (1.566) als zweifache Ableitung einer Funktion $\tilde{Q}(t)$,

$$L(t - t') = -\partial_t \partial_{t'} \tilde{Q}(t - t'), \quad (2.69)$$

wobei wir das Vorzeichen wechseln, damit die analytische Fortsetzung $\tau \rightarrow it$ und damit der Zusammenhang $K(\tau = it) = L(t)$ auch zwischen $\tilde{W}(\tau)$ und $\tilde{Q}(t)$ gilt. Die Integrationskonstante wählen wir wie im vorigen Fall so, dass $\tilde{Q}(0) = 0$ gilt, damit bei Anwendung der Betragsfunktion im Argument von L Gleichung (2.69) nicht verletzt wird, womit wir die explizite Form von $\tilde{Q}(t)$ festlegen,

$$\tilde{Q}(t) = \frac{1}{\pi} \int d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \left[\coth\left(\frac{\omega \hbar \beta}{2}\right) [1 - \cos(\omega t)] + i \sin(\omega t) \right]. \quad (2.70)$$

Ähnlich wie im Imaginärzeitfall (2.63) im letzten Abschnitt finden wir für die zweifache Ableitung von $\tilde{Q}(|t-t'|)$ aufgrund der Betragsfunktion einen zusätzlichen Randterm

$$\partial_t \partial_{t'} \tilde{Q}(|t-t'|) = -L(|t-t'|) - i2M\gamma(0) \delta(t-t') . \quad (2.71)$$

Somit finden wir für die Pfadkopplungsterme der Influenzunktionalphase Φ_{FV} aus Gleichung (1.565)

$$\begin{aligned} 2\hbar \Phi_{\text{FV}}[q, q'] &= q(t) \cdot L(|t-t'|) \cdot q(t') + q'(t) \cdot L^*(|t-t'|) \cdot q'(t') \\ &\quad - q'(t) \cdot L(t-t') \cdot q(t') - q(t) \cdot L^*(t-t') \cdot q'(t') \\ &\quad + i2M\gamma(0) \left[q(t) \cdot q(t) - q'(t) \cdot q'(t) \right] , \\ &= -\dot{q}(t) \cdot \tilde{Q}(|t-t'|) \cdot \dot{q}(t') - \dot{q}'(t) \cdot \tilde{Q}^*(|t-t'|) \cdot \dot{q}'(t') + 2\dot{q}'(t) \cdot \tilde{Q}(t-t') \cdot \dot{q}(t') \\ &= q_0^2 \sum_{i,j} \left\{ -u_i \tilde{Q}(|t_i-t_j|) u_j - u'_i \tilde{Q}^*(|t'_i-t'_j|) u'_j + 2u'_i \tilde{Q}(t'_i-t_j) u_j \right\} . \end{aligned} \quad (2.72)$$

Es heben sich also wieder alle Randterme der partiellen Integrationen identisch auf.

Bei einem Prozess, welcher von der Diagonalposition $q = q' = 0$ zur Position $q = q' = nq_0$ führt, gilt für die Ladungsgewichte die Randbedingung

$$\sum_i u_i = n = \sum_j u_j . \quad (2.73)$$

Anstatt der Summation über alle i, j können wir bei den Termen in Gleichung (2.72), bei welchen die Differenzzeit als Betrag eingeht, explizit zeitordnen. Analog zu Abschnitt 1.4.15 erhalten wir den Ausdruck

$$-2q_0^2 \left\{ \sum_{i>j} u_i \tilde{Q}(t_i-t_j) u_j + \sum_{i>j} u'_i \tilde{Q}^*(t'_i-t'_j) u'_j - \sum_{i,j} u'_i \tilde{Q}(t'_i-t_j) u_j \right\} . \quad (2.74)$$

Die Kerne $\tilde{Q}(t)$ bzw. $\tilde{W}(\tau)$ besitzen die selben analytischen Eigenschaften wie die entsprechenden zweiten Ableitungen $L(t)$ aus Gleichung (1.569) bzw. $K(\tau)$ entsprechend Gleichung (1.422) mit

$$\tilde{Q}(-t) = \tilde{Q}^*(t) = \tilde{Q}(t - i\hbar\beta) , \quad (2.75)$$

$$\tilde{W}(-\tau) = \tilde{W}(\tau + \hbar\beta) , \quad (2.76)$$

$$\tilde{W}(|\tau \pm \hbar\beta|) = \tilde{W}(|\tau|) , \quad (2.77)$$

$$\tilde{W}(\tau = it) = \tilde{Q}(t) . \quad (2.78)$$

Zusammenfassend erhalten wir in der Realzeitdarstellung das folgende Influenzfunktional,

$$\mathcal{F}_{\text{FV}}[\{u_i\}, \{u'_j\}] = \exp \left[- \Phi_{\text{FV}} \right], \quad (2.79)$$

mit der Influenzphase

$$\Phi_{\text{FV}} = -\frac{q_0^2}{2\hbar} \sum_{i,j} u_i \tilde{Q}(|t_i - t_j|) u_j + u'_i \tilde{Q}^*(|t'_i - t'_j|) u'_j - 2u'_i \tilde{Q}(t'_i - t_j) u_j, \quad (2.80)$$

$$= -\frac{q_0^2}{\hbar} \sum_{i>j} u_i \tilde{Q}(t_i - t_j) u_j + u'_i \tilde{Q}^*(t'_i - t'_j) u'_j - \sum_{i,j} u'_i \tilde{Q}(t'_i - t_j) u_j. \quad (2.81)$$

Bei der Herleitung des Realzeit-Influenzfunktionals in Abschnitt 1.4.15 haben wir gesehen, dass die Verwendung der Schwerpunktskoordinate $r = (q + q')/2$ und der Relativkoordinate $y = q - q'$ zu einer einfachen Darstellung des Feynman-Vernon Influenzfunktionals in der Form (1.571) führt. Den gleichen Schritt wollen wir nun ebenfalls im Tight-Binding Bild durchführen. Dazu definieren wir die Pfade

$$\eta(t) = 2r(t) = q(t) + q(t') = q_0 \sum_{k=1}^{2m} \eta_k \Theta(t - t_k), \quad (2.82)$$

$$\xi(t) = y(t) = q(t) - q(t') = q_0 \sum_{k=1}^{2m} \xi_k \Theta(t - t_k), \quad (2.83)$$

wobei nun aus jeder Ladung u_i bzw. u'_i zur Zeit t_i 2 Ladungen η_i und ξ_i zur selben Zeit t_i entstehen. Dies verdeutlicht man sich einfach anhand der Abbildung 2.5 bzw. an der obigen Gleichung. Es gibt also die Substitution

$$u = + \rightarrow \eta = +, \quad \xi = +, \quad (2.84)$$

$$u = - \rightarrow \eta = -, \quad \xi = -, \quad (2.85)$$

$$u' = + \rightarrow \eta = +, \quad \xi = -, \quad (2.86)$$

$$u' = - \rightarrow \eta = -, \quad \xi = +, \quad (2.87)$$

Für die Ladungen η und ξ gilt nun anstatt Gleichung (2.73) die Randbedingung

$$\sum_{k=1}^{2m} \eta_k = 2n, \quad \sum_{k=1}^{2m} \xi_k = 0. \quad (2.88)$$

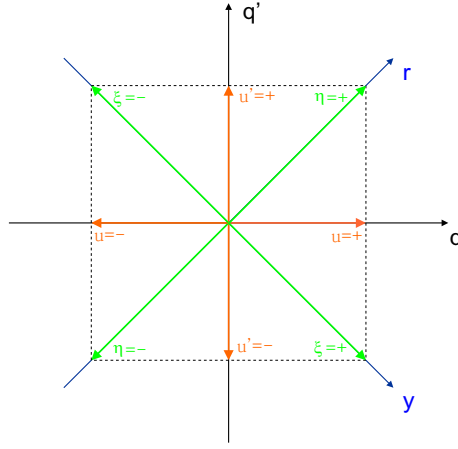


Abbildung 2.5: Das Gewicht u (u') erzeugt einen Sprung auf der q (q')-Achse mit entsprechendem Vorzeichen. Um dies durch die Pfade r und y zu erreichen, muss immer ein Sprung auf der r - und y -Achse zeitgleich ausgeführt werden. Entsprechend gibt es zu den 4 möglichen Ladungen $u = \pm 1$, $u' = \pm 1$ entsprechend 4 Kombinationen $\eta = \pm 1$, $\xi = \pm 1$.

Die Influenzphase besitzt, ausgehend von der Darstellung (1.571), mit den Ladungen ξ und η die Form

$$\Phi_{\text{FV}} = -\frac{1}{2\hbar} \left\{ y(t) \cdot \partial_t \partial_{t'} \tilde{Q}'(t-t') \cdot y(t') \right. \\ \left. + i y(t) \cdot 2\Theta(t-t') \partial_t \partial_{t'} \tilde{Q}''(t-t') \cdot 2r(t') \right\} \quad (2.89)$$

$$= -\frac{q_0^2}{2\hbar} \sum_{i,j} \xi_i \tilde{Q}'(t_i - t_j) \xi_j + i \xi_i 2\Theta(t_i - t_j) \tilde{Q}''(t_i - t_j) \eta_j, \quad (2.90)$$

$$= -\frac{q_0^2}{\hbar} \sum_{i>j} \xi_i \tilde{Q}'(t_i - t_j) \xi_j + i \xi_i \tilde{Q}''(t_i - t_j) \eta_j. \quad (2.91)$$

Dabei haben wir analog zu Gleichung (2.71) die Eigenschaft für den Realteil \tilde{Q}' des Integralkerns

$$\partial_t \partial_{t'} \tilde{Q}'(t-t') = -L'(t-t'), \quad (2.92)$$

und des Imaginärteils \tilde{Q}'' in der Form

$$\partial_t \partial_{t'} \tilde{Q}''(|t-t'|) = -L''(|t-t'|) - 2M\gamma(0) \delta(t-t') \quad (2.93)$$

verwendet. Mit der Theta-Funktion erhalten wir die gewünschte Form

$$2\Theta(t-t') \partial_t \partial_{t'} \tilde{Q}''(t-t') = -2\Theta(t-t') L''(t-t') - 2M\gamma(0) \delta(t-t') \quad (2.94)$$

Da $\tilde{Q}(0) = 0$ gilt, liefert die Summation in Gleichung (2.91) über Indizes $i = j$ keinen Beitrag und wurde deshalb ignoriert.

Im weiteren Verlauf werden wir eine lineare Kraft F an das System an-koppeln. Die Realzeitpropagation erhält dabei den zusätzlichen Faktor

$$B = \exp \left[\frac{iF}{\hbar} \int_0^t ds \left(q(s) - q'(s) \right) \right]. \quad (2.95)$$

In der Ladungsdarstellung erhalten wir dafür

$$B_m = \exp \left[\frac{iFq_0}{\hbar} \sum_{k=1}^{2m} \xi_k \int_0^t ds \Theta(s - t_k) \right] = \exp \left[i\epsilon \sum_{k=1}^{2m} \xi_k (t - t_k) \right], \quad (2.96)$$

wobei wir die umskalierte Kraft $\epsilon = Fq_0/\hbar$ im rechten Teil der Gleichung verwendet haben.

2.2.3 Umskalierter Wechselwirkungskern

Es bietet sich nun an, sämtliche permanent auftretenden Vorfaktoren in die spektrale Dichte mit einzubeziehen. Dazu definieren wir die für die Tight-Binding Darstellung relevante intrinsische spektrale Dichte $G(\omega)$,

$$\frac{q_0^2}{\hbar} \frac{1}{\pi} J(\omega) = G(\omega). \quad (2.97)$$

Speziell für die schon oftmals gewählte Dichte der Form $J(\omega) = M\gamma\omega^s e^{-\omega\tau_c}$ definieren wir dazu den Parameter K mit

$$K = \frac{q_0^2 M\gamma}{2\pi\hbar}, \quad G(\omega) = 2K\omega^s e^{-\omega\tau_c}. \quad (2.98)$$

Im weiteren verwenden wir daher zur Vereinfachung der Notation die folgenden umskalierten Kopplungskerne, was wir im folgenden durch das Weglassen der Tilde kennzeichnen,

$$W(\tau) = \frac{q_0^2}{\hbar} \tilde{W}(\tau), \quad (2.99)$$

$$= \int d\omega \frac{G(\omega)}{\omega^2} \left[\coth \left(\frac{\omega\hbar\beta}{2} \right) [1 - \cosh(\omega\tau)] - \sinh(\omega\tau) \right], \quad (2.100)$$

$$Q(t) = \frac{q_0^2}{\hbar} \tilde{Q}(t), \quad (2.101)$$

$$= \int d\omega \frac{G(\omega)}{\omega^2} \left[\coth \left(\frac{\omega\hbar\beta}{2} \right) [1 - \cos(\omega t)] + i \sin(\omega t) \right]. \quad (2.102)$$

Mit der Form der spektralen Dichte $G(\omega)$ aus Gleichung (2.98) kann die Integration über ω explizit durchgeführt werden [1, 2]. Der Term in den eckigen Klammern geht im Limes $\omega \rightarrow 0$ linear in ω . Für die Konvergenz des Integrals ist das Verhalten in diesem Grenzfall wichtig. Bei einer spektralen Dichte $\propto \omega^s$ finden wir somit Konvergenz des obigen Integrals für $s > 1$. Zur Berechnung des Integrals $W(\tau)$ bzw. $Q(t)$ kann man auf die beiden Standardintegrale [51]

$$\int_0^\infty du u^{\mu-1} e^{-\beta u} \coth[u] = \Gamma[\mu] \left(2^{1-\mu} \zeta[\mu, \beta/2] - \beta^{-\mu} \right) \quad (2.103)$$

für $\text{Re}[\mu] > 1$ und $\text{Re}[\beta] > 0$ und

$$\int_0^\infty du u^{\mu-1} e^{-\beta u} = \Gamma[\mu] \beta^{-\mu} \quad (2.104)$$

für $\text{Re}[\mu] > 0$ und $\text{Re}[\beta] > 0$ zurückgreifen. Mit

$$\zeta[s, x] = \sum_{k=0}^{\infty} (k+x)^{-s} = \frac{1}{\Gamma[s]} \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-xt} \frac{1}{1-e^{-t}} \quad (2.105)$$

wird dabei wieder die verallgemeinerte Riemannsche Zeta-Funktion bezeichnet, welche über den Konvergenzbereich $s < 1$ erweitert werden kann [52]. Die Integraldarstellung erhält man, indem man den Summanden $(k+x)^{-s}$ als Gamma-Integral darstellt und die Summation über k durchführt.

Bei der für die Integration der Gleichung (2.99), (2.101) notwendigen Zerlegung des Termes $\coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right)[1 - \cosh(\omega\tau)] + \sinh(\omega\tau)$ geht allerdings das lineare Verhalten in ω verloren, so dass die einzelnen Integrale erst für $s > 2$ konvergieren, wobei das gesamte Integral für $s > 1$ wieder wohl definiert ist. Dies ist der Grund, warum der Limes $s \rightarrow 1$ weiter unten genauer betrachtet werden muss.

Für $Q(t)$ erhalten wir zusammenfassend den Ausdruck

$$Q(t) = 2K \left(\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \Gamma[s-1] \left(2\zeta[s-1, \kappa] - \frac{1}{\kappa^{s-1}} - \zeta[s-1, \kappa + i\vartheta] + \frac{1}{(\kappa + i\vartheta)^{s-1}} - \zeta[s-1, \kappa - i\vartheta] \right). \quad (2.106)$$

Zur Vereinfachung haben wir dabei die beiden umskalierten Variablen

$$\kappa = \frac{\tau_c}{\hbar\beta} \quad \text{und} \quad \vartheta = \frac{t}{\hbar\beta} \quad (2.107)$$

eingeführt. Mit der Eigenschaft,

$$\zeta[s, x] = \zeta[s, x+1] + x^{-s} \quad (2.108)$$

der Zeta-Funktion, welche sich durch die obige Reihendarstellung sofort ergibt, kann dies in die Form von Lit. [1] gebracht werden. Wir verwenden im Folgenden die angepasste Darstellung

$$Q(t) = 2K \left(\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \Gamma[s-1] \left(\zeta[s-1, \kappa] - \zeta[s-1, \kappa + i\vartheta] + \zeta[s-1, 1 + \kappa] - \zeta[s-1, 1 + \kappa - i\vartheta] \right). \quad (2.109)$$

Diese Form erhält man auch direkt aus dem ursprünglichen Integral (2.101), sofern man die trigonometrischen Funktionen durch Exponentialfunktionen ersetzt und die Integraldarstellung der Zeta-Funktion anwendet.

Den Imaginärteil des Kerns $Q(t)$ können wir ebenfalls einfach berechnen; wir finden ausgehend von Gleichung (2.101) für den Imaginärteil den Ausdruck [51]

$$Q''(t) = 2K \int_0^\infty d\omega \omega^{s-2} \exp[-\omega\tau_c] \sin[\omega t] \quad (2.110)$$

$$= 2K \left(\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \Gamma[s-1] \operatorname{sign}[\vartheta] |\vartheta|^{1-s} \left(1 + \frac{\kappa^2}{\vartheta^2} \right)^{(1-s)/2} \times \sin \left[(s-1) \arctan[|\vartheta|/\kappa] \right]. \quad (2.111)$$

Im Grenzfall $\tau_c \rightarrow 0$ ($\kappa \rightarrow 0$) bekommen wir daraus für Zeiten $t \gg \tau_c$ das einfache Resultat

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} Q''(t) = -2K \left(\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \Gamma[s-1] \operatorname{sign}[\vartheta] |\vartheta|^{1-s} \cos[\pi s/2]. \quad (2.112)$$

Im Falle $s \rightarrow 1$ geht der Term $\Gamma[s-1] \cos[\pi s/2]$ gegen $-\pi/2$ und wir erhalten allgemein für $s \in \mathbb{N}^+$ exemplarisch

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} Q''(t)|_{s=1} = \pi K \operatorname{sign}[\vartheta], \quad \operatorname{sign}[0] = 0, \quad (2.113)$$

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} Q''(t)|_{s=2} = \begin{cases} \frac{2K}{\hbar\beta} \frac{1}{\vartheta} & \vartheta \neq 0 \\ 0 & \vartheta = 0 \end{cases}, \quad (2.114)$$

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} Q''(t)|_{s=3} = 0. \quad (2.115)$$

2.2.4 Darstellung des Integralkerns für $s = 1$

Für den Grenzübergang $s \rightarrow 1$ des Integralkerns $Q(t)$ aus Gleichung (2.109) sind nun 2 Eigenschaften der Zeta-Funktion wichtig [52]; erstens die analytische Fortsetzung an die Stelle $s = 0$,

$$\zeta[0, x] = \frac{1}{2} - x, \quad (2.116)$$

und zum zweiten die lineare Entwicklung um die Stelle $s = 0$ über die Ableitung

$$\frac{d}{ds} \zeta[s, x] \Big|_{s=0} = \ln \Gamma[x] - \frac{1}{2} \ln[2\pi] . \quad (2.117)$$

Terme entsprechend Gleichung (2.116) heben sich identisch auf, da die Summe der Argumente z der Zeta-Funktionen $\zeta[s, z]$ in Gleichung (2.109) Null ergibt, während Terme der Form von Gleichung (2.117) zusammen mit dem Term $\lim_{s \rightarrow 1} \Gamma[s-1] = 1/(s-1)$ einen wohldefinierten Beitrag ergeben. Man erhält somit im Grenzfall $s \rightarrow 1$

$$Q(t)|_{s=1} = 2K \ln \left[\frac{\Gamma[1+\kappa]^2}{\Gamma[1+\kappa+i\vartheta] \Gamma[1+\kappa-i\vartheta]} \frac{\kappa+i\vartheta}{\kappa} \right] . \quad (2.118)$$

Für den Realteil Q' und Imaginärteil Q'' finden wir

$$Q'(t)|_{s=1} = 2K \ln \left[\frac{\Gamma[1+\kappa]^2}{\Gamma[1+\kappa+i\vartheta] \Gamma[1+\kappa-i\vartheta]} \frac{\sqrt{\kappa^2+\vartheta^2}}{\kappa} \right] , \quad (2.119)$$

$$Q''(t)|_{s=1} = 2K \arctan[\vartheta/\kappa] . \quad (2.120)$$

Der Faktor $\sqrt{\kappa^2+\vartheta^2}/\kappa$ in Gleichung (2.119) lässt sich analog zum Imaginäranteil als

$$\frac{\sqrt{\kappa^2+\vartheta^2}}{\kappa} = (\sin[\arctan[\kappa/\vartheta]])^{-1} \quad (2.121)$$

schreiben. Im Grenzfall eines strikt ohmschen Bades, $\tau_c \rightarrow 0$ ($\kappa \rightarrow 0$), geht die Gleichung (2.118) in die Form

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} Q(t)|_{s=1} = 2K \ln \left[i \frac{\kappa+i\vartheta}{i\vartheta} \frac{\text{sign}[\vartheta] \sinh[\pi|\vartheta|]}{\kappa\pi} \right] \quad (2.122)$$

über, wobei wir die Spiegelungsrelation [51, 52]

$$\Gamma[1+x] \Gamma[1-x] = \frac{\pi x}{\sin[\pi x]} \quad (2.123)$$

der Gamma-Funktion verwendet haben. Der Hauptwert des Logarithmus, $\ln[i \text{sign}[\vartheta]]$ ergibt einen Beitrag $i\pi/2 \text{sign}[\vartheta]$. Der Term $\frac{\kappa+i\vartheta}{i\vartheta}$ kann für Zeiten $t > \tau_c$ ($\vartheta > \kappa$) vernachlässigt werden, womit wir zur Darstellung des Integralkernes $Q(t)$ in Skalen-Limes kommen [1],

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} Q(t)|_{s=1} = 2K \ln \left[\frac{\sinh[\pi|\vartheta|]}{\kappa\pi} \right] + i\pi K \text{sign}[\vartheta] , \quad \vartheta \gg \kappa . \quad (2.124)$$

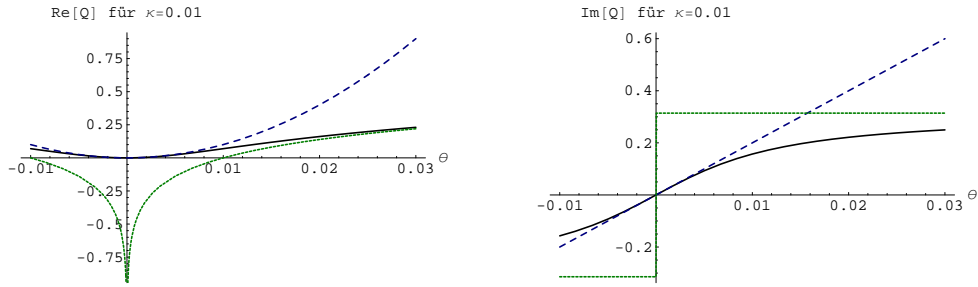


Abbildung 2.6: Die durchgezogene Linie repräsentiert das Verhalten des Real- bzw. Imaginärteils von $Q(t)$ entsprechend Gleichung (2.119) und (2.120), während die kurzgestrichelte Linie die Skalenform entsprechend Gleichung (2.124) und die langgestrichelte Linie das Kurzzeitverhalten durch Gleichung (2.125) wiedergibt. Für $t \ll \tau_c$ ($\vartheta \ll \kappa$) liefert der Realteil in der Skalenform ein komplett falsches Verhalten.

Der Imaginärteil ist dabei in Übereinstimmung mit dem in Gleichung (2.113) und (2.120) gefundenen Wert. Für den Kurzzeitbereich $\vartheta \ll \kappa$ erhalten wir die Näherung

$$\lim_{t \rightarrow 0} Q(t)|_{s=1} = K \left(\frac{\vartheta}{\kappa} \right)^2 + i 2K \frac{\vartheta}{\kappa}, \quad \vartheta \ll \kappa. \quad (2.125)$$

Wegen der obigen Einschränkung ($\vartheta > \kappa$) in Gleichung (2.124) verletzt diese Form die wichtige Eigenschaft $Q(0) = 0$, wie man direkt an Gleichung (2.101) sieht. Soll diese Bedingung erhalten bleiben, dann darf der Faktor $\frac{\kappa + i\vartheta}{i\vartheta}$ nicht vernachlässigt werden. Im Limes $\kappa \rightarrow 0$ entspricht dieser Term einer Distribution mit der Eigenschaft

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\kappa + i\vartheta}{i\vartheta} = \begin{cases} 1 & \vartheta \neq 0 \\ -i\frac{\kappa}{\vartheta} & \vartheta = 0 \end{cases}. \quad (2.126)$$

Abbildung 2.6 zeigt dieses Verhalten. Im Skalenlimes $\kappa \rightarrow 0$ ist die Form (2.124) daher bis auf den Punkt $t = 0$ mit dem vollen Ausdruck $Q(t)$ identisch. Der Imaginärteil verhält sich auch an der Stelle $t = 0$ regulär.

Für den Kern $Q(t)$ finden wir somit im Grenzfall $\tau_c \rightarrow 0$

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} Q(t)|_{s=1} = \begin{cases} 2K \ln \left[\frac{\sinh[\pi|\vartheta|]}{\kappa\pi} \right] + i\pi K \operatorname{sign}[\vartheta] & \vartheta \neq 0 \\ 0 & \vartheta = 0 \end{cases}. \quad (2.127)$$

In diesem sogenannten Skalen-Limes ($s = 1, \tau_c \rightarrow 0$) geht die inverse Temperatur β nicht mehr explizit in den Integralkern $Q(t)$ bzw. $W(\tau)$ ein, sondern

nur noch in Form der umskalierten Variablen ϑ und κ . Für $W(\tau)$ finden wir in analytischer Fortsetzung mit der umskalierten Imaginärzeit-Variable $\theta = i\vartheta$

$$\lim_{\substack{s \rightarrow 1 \\ \kappa \rightarrow 0}} W(\tau) = 2K \ln \left[\frac{\kappa + \theta}{\theta} \frac{\sin[\pi\theta]}{\kappa\pi} \right], \quad 0 \leq \theta \leq 1. \quad (2.128)$$

Dieser Ausdruck ist nur für $0 \leq \tau \leq \hbar\beta$ definiert, da der Logarithmus auf der negativen reellen Achse einen Schnitt hat. Durch Ersetzung des Sinus mit $\sin[\pi|\theta|]$ kann der Ausdruck wie schon weiter oben im Text auf den Bereich $-\hbar\beta \leq \tau \leq \hbar\beta$ erweitert werden. In den ursprünglichen Koordinaten t, τ und τ_c ausgedrückt, erhalten wir für $t, \tau \neq 0$

$$\lim_{\tau_c \rightarrow 0} Q(t)|_{s=1} = 2K \ln \left[\frac{\hbar\beta}{\pi\tau_c} \sinh \left(\frac{\pi|t|}{\hbar\beta} \right) \right] + i\pi K \operatorname{sign}(t), \quad (2.129)$$

$$\lim_{\tau_c \rightarrow 0} W(\tau)|_{s=1} = 2K \ln \left[\frac{\hbar\beta}{\pi\tau_c} \sin \left(\frac{\pi|\tau|}{\hbar\beta} \right) \right]. \quad (2.130)$$

In der im Influenzfunktional auftretenden Form

$$\lim_{\tau_c \rightarrow 0} e^{Q(t)}|_{s=1} = \left| \frac{\hbar\beta}{\pi\tau_c} \sinh \left(\frac{\pi|t|}{\hbar\beta} \right) \right|^{2K} \exp \left[i\pi K \operatorname{sign}(t) \right], \quad (2.131)$$

$$\lim_{\tau_c \rightarrow 0} e^{W(\tau)}|_{s=1} = \left[\frac{\hbar\beta}{\pi\tau_c} \sin \left(\frac{\pi|\tau|}{\hbar\beta} \right) \right]^{2K} \quad (2.132)$$

wird uns diese Funktion in Kapitel 3 als Korrelationsfunktion auf dem Zylinder noch oft begegnen. Ein entsprechender Faktor zu Gleichung (2.126) wird auch dort auftreten und etwas Probleme bereiten.

2.2.5 Darstellung des Integralkerns für $s \neq 1$

Für den Spezialfall $s = 1$ konnte die Darstellung des Integralkerns $Q(t)$ im letzten Abschnitt stark vereinfacht werden. Im Folgenden versuchen wir davon ausgehend, eine entsprechende Darstellung für $s \neq 1$ zu finden. Dazu betrachten wir nochmals den Zusammenhang der Polygamma-Funktion $\psi^{(m)}(x)$ mit der Zeta-Funktion $\zeta[s, x]$ für $m \in \mathbb{N}^+$,

$$\psi^{(m)}(x) \equiv \frac{d^m}{dx^m} \psi(x) = \frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}} \ln[\Gamma(x)] = (-1)^{m+1} \Gamma[m+1] \zeta[m+1, x]. \quad (2.133)$$

Diese Relation kann formal für die Berechnung von $Q(t)$ sogar auf die Digamma-Funktion

$$\psi^{(0)}(x) \equiv \psi(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\ln[N] - \sum_{k=0}^N \frac{1}{k+x} \right) \quad (2.134)$$

angewandt werden, da der erste Beitrag in $Q(t)$ entsprechend Gleichung (2.109) entfällt. Für den Fall $s - 1 = m \in \mathbb{N}$ finden wir somit die Form

$$Q(t) \Big|_{s-1=m} = 2K \left(-\frac{1}{\hbar\beta} \right)^m \frac{d^m}{d\kappa^m} \ln \left[\frac{\Gamma[1 + \kappa] \Gamma[\kappa]}{\Gamma[\kappa + i\vartheta] \Gamma[1 + \kappa - i\vartheta]} \right]. \quad (2.135)$$

Dieses Resultat liefert so noch keine weitere Einsicht. Im Grenzfall $\kappa \rightarrow 0$ finden wir jedoch ausgehend von Gleichung (2.118) durch eine Reihenentwicklung in κ die Form

$$Q(t) \Big|_{s-1=m} = 2K \left(-\frac{1}{\hbar\beta} \right)^m \frac{d^m}{d\kappa^m} \times \left\{ W_0 + \kappa W_1 + \kappa^2 W_2 + \cdots + \ln \left[\frac{\kappa + i\vartheta}{\kappa} \right] \right\}. \quad (2.136)$$

Die Distribution $\lim_{\kappa \rightarrow 0} (\kappa + i\vartheta)/\kappa$ muss dabei isoliert behandelt werden, da eine Entwicklung nach κ nicht möglich ist, was jedoch im weiteren kein Problem darstellt. Für die Entwicklungskoeffizienten W_n erhalten wir

$$W_0 = \ln \left[\frac{\sinh[\pi\vartheta]}{\pi\vartheta} \right], \quad (2.137)$$

$$W_1 = -2\gamma - \psi(1 + i\vartheta) - \psi(1 - i\vartheta), \quad (2.138)$$

$$W_2 = \frac{\pi^2}{6} \left[1 - \frac{3}{(\pi\vartheta)^2} + \frac{3}{\sinh^2[\pi\vartheta]} \right], \quad (2.139)$$

$$W_3 = -\frac{1}{6} \left[\psi^{(2)}(-i\vartheta) + \psi^{(2)}(i\vartheta) - 4\zeta[3] \right], \quad (2.140)$$

$$W_4 = -\frac{1}{360} \left[15\psi^{(3)}(1 - i\vartheta) + 15\psi^{(3)}(1 + i\vartheta) - 2\pi^2 \right], \quad (2.141)$$

$$W_5 = \cdots,$$

wobei wir Gleichung (2.133) verwendet haben und die geraden Ableitungen sich z.T. weiter vereinfachen lassen [52]. Mit $\zeta[x] = \zeta[1, x]$ haben wir die normale Riemannsche Zeta-Funktion bezeichnet, während $\gamma = -\psi(1)$ die Euler-Konstante darstellt. Die Ableitungen angewandt auf den verbleibenden Logarithmus liefern den Beitrag

$$\frac{d^m}{d\kappa^m} \ln \left[\frac{\kappa + i\vartheta}{\kappa} \right] = (-1)^m \Gamma[m] \left[\frac{1}{\kappa^m} - \frac{1}{(i\vartheta + \kappa)^m} \right]. \quad (2.142)$$

Für den Integralkern $Q(t)$ finden wir somit für $s \in \mathbb{N}$ im Grenzfall $\kappa \rightarrow 0$ die Darstellungen

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} Q(t) \Big|_{s=2} = \frac{2K}{\hbar\beta} \left\{ 2\gamma + \psi(1 + i\vartheta) + \psi(1 - i\vartheta) + \frac{1}{\kappa} - \frac{1}{i\vartheta + \kappa} \right\},$$

(2.143)

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} Q(t) \Big|_{s=3} = \frac{2K}{(\hbar\beta)^2} \left\{ \frac{\pi^2}{6} \left[1 - \frac{3}{(\pi\vartheta)^2} + \frac{3}{\sinh^2[\pi\vartheta]} \right] + \frac{1}{\kappa^2} - \frac{1}{(i\vartheta + \kappa)^2} \right\}. \quad (2.144)$$

Der Imaginäranteil der obigen Darstellung stimmt dabei mit dem in Gleichung (2.113)-(2.115) angegebenen Wert überein.

Das allgemeingültige Resultat $Q(t=0) = 0$ wird durch diese Darstellung gewährleistet, da der Grenzfall $\lim_{\vartheta \rightarrow 0} W_m = 0$ für alle m liefert und

$$\lim_{\vartheta \rightarrow 0} \frac{d^m}{d\kappa^m} \ln \left[\frac{\kappa + i\vartheta}{\kappa} \right] = \begin{cases} (-1)^m \Gamma[m] \kappa^{-m} & \vartheta \neq 0 \\ 0 & \vartheta = 0 \end{cases} \quad (2.145)$$

ergibt. Im Skalen-Limes für Zeiten ($\vartheta > \kappa$) erhalten wir analog zu Gleichung (2.129) die einfache Darstellung ($m \geq 1$)

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} Q(t) \Big|_{s=m} = \frac{2K}{(\hbar\beta)^m} \left\{ (-1)^m W_m + \frac{1}{\kappa^m} \right\}. \quad (2.146)$$

Die Form von Gleichung (2.136) legt es nun nahe, die Darstellung für ganzzahlige s mittels Verwendung von sogenannten fraktionalem Ableitungen bzw. Differintegralen auf $s \in \mathbb{R}^+$ zu erweitern. Eine gute Einführung in das Gebiet der Differintegration liefert beispielsweise [37, 38, 39, 40].

Wir verwenden hier die analytisch fortgesetzte Version des Cauchy Integrals zur Verallgemeinerung der gewöhnlichen Ableitung, die sogenannte Riemann-Liouville Formulierung der Differintegration bzw. fractalen Ableitung,

$$\hat{D}_x^q f(x) = \frac{1}{\Gamma[-q]} \int_0^x dt \frac{f(t)}{(x-t)^{q+1}}. \quad (2.147)$$

Das Integral selber existiert strenggenommen nur für $q < -1$. Wegen der vorangestellten Gamma-Funktion im Nenner lässt sich das Resultat, wie wir gleich sehen werden, meist analytisch auf den für uns interessanten Bereich $q \geq -1$ erweitern. Als Verallgemeinerung zu Gleichung (2.136) schreiben wir nun

$$Q(t) \Big|_s = 2K \left(-\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \hat{D}_\kappa^{s-1} \times \left\{ W_0 + \kappa W_1 + \kappa^2 W_2 + \dots + \ln \left[\frac{\kappa + i\vartheta}{\kappa} \right] \right\}. \quad (2.148)$$

Dazu benötigen wir die Darstellungen für die folgenden Differintegrationen: Erstens die fraktionale Ableitung nach der Potenz κ^n ,

$$\hat{D}_\kappa^{s-1} \kappa^n = \frac{1}{\Gamma[1-s]} \int_0^\kappa dt \frac{t^n}{(\kappa-t)^s} = \frac{\Gamma[1+n]}{\Gamma[2+n-s]} \kappa^{1+n-s}. \quad (2.149)$$

Im Falle $s-1 = l \in \mathbb{N}$ vereinfacht sich dies sofort zu dem bekannten Ergebnis $\partial_\kappa^l \kappa^n = n!/(n-l)! \kappa^{n-l}$. Desweiteren benötigen wir die Verallgemeinerung von Gleichung (2.142),

$$\begin{aligned} \hat{D}_\kappa^{s-1} \ln \left[\frac{\kappa + i\vartheta}{\kappa} \right] &= \frac{1}{\Gamma[1-s]} \int_0^\kappa dt \frac{\ln \left[\frac{t+i\vartheta}{t} \right]}{(\kappa-t)^s} \\ &= \kappa^{1-s} G \left[\{1, 1\}, \{2-s\}, \{1, 1\}, \{0\}, \frac{i\vartheta}{\kappa} \right]. \end{aligned} \quad (2.150)$$

Die Funktion $G[\dots]$ bezeichnet hier die Meijersche G-Funktion [51, 52]. Für ganzzahlige $s \geq 1$ besitzt diese Funktion mit den obigen Parametern eine vereinfachte Darstellung in Übereinstimmung mit dem Ergebnis aus Gleichung (2.142). Eingesetzt in die Gleichung (2.148) finden wir somit im Allgemeinen eine unendliche Reihendarstellung,

$$\begin{aligned} \lim_{\kappa \rightarrow 0} Q(t) \Big|_s &= 2K \left(-\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \left\{ \sum_{n=0}^{[s-1]} \frac{\Gamma[1+n]}{\Gamma[2+n-s]} \kappa^{1+n-s} W_n \right. \\ &\quad \left. + \kappa^{1-s} G \left[\{1, 1\}, \{2-s\}, \{1, 1\}, \{0\}, \frac{i\vartheta}{\kappa} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.151)$$

welche im Limes $\kappa \rightarrow 0$ für $n > 1-s$ terminiert wird. Eine Integraldarstellung der Meijer-G Funktion findet sich beispielsweise in [51, 53].

2.3 Asymptotisches Verhalten des Kerns $Q(t)$

Das Verhalten des Integralkerns $Q(t)$ entsprechend (2.109) kann im Langzeitlimes mithilfe der Integraldarstellung der Zeta-Funktion aus Gleichung (2.105) ermittelt werden; dazu entwickeln wir den Term $(1 - e^{-t})^{-1}$ mithilfe der Bernoulli-Nummern B_n [52] in die folgende Reihe

$$\frac{1}{1 - e^{-t}} = \frac{1}{t} + \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_{2n}}{(2n)!} t^{2n-1}. \quad (2.152)$$

Damit finden wir für die Integraldarstellung (2.105) die asymptotische Entwicklung für die verallgemeinerte Zeta-Funktion,

$$\begin{aligned} \lim_{|x| \rightarrow \infty} \Gamma[s-1] \zeta[s-1, x] &= \Gamma[s-2] x^{2-s} + \frac{1}{2} \Gamma[s-1] x^{1-s} \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_{2n}}{(2n)!} \frac{\Gamma[s+2(n-1)]}{x^{s+2(n-1)}}. \end{aligned} \quad (2.153)$$

Angewandt auf den Realteil des Kerns $Q(t)$ finden wir mit dem ersten Entwicklungskoeffizienten aus der obigen Gleichung für $0 < s < 2$

$$\begin{aligned} \lim_{\vartheta \rightarrow \infty} Q'(t) &= 2K \left(\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \Gamma[s-2] \\ &\times \left(\kappa^{2-s} + (\kappa+1)^{2-s} - 2|\vartheta|^{2-s} \sin[\pi s/2] \right) \propto |t|^{2-s}. \end{aligned} \quad (2.154)$$

Das Verhalten des Imaginäranteils $Q''(t)$ lässt sich direkt aus der Gleichung (2.111) ablesen und zeigt das asymptotische Verhalten

$$\lim_{t \rightarrow \infty} Q''(t) = -2K \left(\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \Gamma[s-1] \vartheta^{1-s} \cos[\pi s/2] \propto |t|^{1-s}. \quad (2.155)$$

2.4 Klassischer Limes des Kerns $Q(t)$

Wir untersuchen nun den klassischen Limes (Hochtemperaturlimes) des Integralkerns $Q(t)$, wobei wir hier bei der Interpretation vorsichtig sein müssen, da die Annahme des Sprungverhaltens des Systempfads den Parameterbereich (2.1) voraussetzt. Da der Imaginäranteil des Kerns $Q(t)$ temperaturunabhängig ist, beschränken wir uns hier auf die Betrachtung des Realteils. Für den Imaginäranteil wurde die Darstellung (2.111) weiter oben im Text angegeben. Für den Realteil finden wir mithilfe der Reihenentwicklung der hyperbolischen Kotangensfunktion den Ausdruck

$$\begin{aligned} \lim_{\hbar\beta \rightarrow 0} Q'(t) &= 4K \left(\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \Gamma[s-2] \left\{ \kappa^{2-s} - |\vartheta|^{2-s} \left(1 + \frac{\kappa^2}{\vartheta^2} \right)^{\frac{2-s}{2}} \right. \\ &\times \left. \cos \left[(s-2) \arctan[|\vartheta|/\kappa] \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.156)$$

Im Grenzfall $\tau_c \rightarrow 0$ ($\kappa \rightarrow 0$) finden wir damit im Bereich $0 < s < 2$ für $\vartheta > \kappa$ (Skalen-Limes)

$$\lim_{\substack{\hbar\beta \rightarrow 0 \\ \kappa \rightarrow 0}} Q'(t) = 4K \left(\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \Gamma[s-2] |\vartheta|^{2-s} \cos[\pi s/2]. \quad (2.157)$$

Für den wichtigen Fall einer ohmschen spektralen Dichte ($s = 1$) bekommen wir so die einfache Darstellung

$$\lim_{\substack{\hbar\beta \rightarrow 0 \\ \kappa \rightarrow 0}} Q'(t) \Big|_{s=1} = 2K\pi |\vartheta|. \quad (2.158)$$

2.5 Tieftemperatur-Grenzfall des Kerns $Q(t)$

Im Grenzfall verschwindender Temperatur $T = 0$ finden wir

$$\begin{aligned} \lim_{\hbar\beta \rightarrow \infty} Q'(t) &= 2K \left(\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \Gamma[s-1] \left\{ \kappa^{1-s} - |\vartheta|^{1-s} \left(1 + \frac{\kappa^2}{\vartheta^2} \right)^{\frac{1-s}{2}} \right. \\ &\quad \left. \times \cos \left[(s-1) \arctan[|\vartheta|/\kappa] \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.159)$$

Im Grenzfall $\kappa \rightarrow 0$ konvergiert die Integraldarstellung (2.101) nur für $s < 1$,

$$\lim_{\substack{\hbar\beta \rightarrow \infty \\ \kappa \rightarrow 0}} Q'(t) = -2K \left(\frac{1}{\hbar\beta} \right)^{s-1} \Gamma[s-1] |\vartheta|^{1-s} \sin[\pi s/2]. \quad (2.160)$$

während wir für den ohmschen Fall

$$\lim_{\hbar\beta \rightarrow \infty} Q'(t) \Big|_{s=1} = K \ln \left[1 + \frac{\vartheta^2}{\kappa^2} \right] \quad (2.161)$$

finden.

2.6 Tunnelmatrizelement Δ

Für die Systemwirkung mit einem Masseterm ist die Approximation des Pfades durch einen Sprungpfad genaugenommen nicht möglich, da der Massesterm dafür Sorge trägt, dass nur glatte Pfade einen endlichen Beitrag liefern. Ein Sprungpfad würde daher zu einem divergenten Ausdruck führen. Für das System muss daher ein geglätteter Übergang verwendet werden. Diese Betrachtung für das System kann nun durch eine Instanton-Rechnung durchgeführt werden[1, 16]. Dabei findet man in der Tat, dass die tatsächlichen Pfade im Tightbinding-Grenzfall geglätteten Sprungfunktionen entsprechen. Ein Sprung trägt dabei immer zu einem Faktor $\pm i (\Delta/2)$ bei, je nachdem, ob auf dem Pfad entlang q oder q' gesprungen wird.

Betrachtet man nun Pfade, welche von einem Diagonalzustand mit $2m$ Sprüngen in einen weiteren, um n Mulden verschobenen Diagonalzustand übergehen, dann liefert der Beitrag des Systems die Form

$$(-1)^{m-n} (\Delta/2)^{2m}. \quad (2.162)$$

Dies macht man sich leicht klar, indem man einen Pfad mit $2m$ Sprüngen betrachtet, wobei $m = n$ gelte; hier bewegt man sich auf einem direkten Weg in die neue Mulde und die Sprünge auf dem Pfad q entsprechen der Anzahl der Sprünge auf dem Pfad q' . Erhöht man nun die Sprünge auf $m = n + 1$, dann muss entweder zweimal zusätzlich auf dem Pfad q oder zweimal auf dem Pfad q' gesprungen werden und man erhält einen Vorzeichenwechsel.

2.7 Das Schmid-Modell

Das Schmid-Modell beschreibt die Dynamik eines Teilchens in einem gekippten Kosinus-Potenzial, welches an ein harmonisches Bad gekoppelt ist. Die Dynamik dieses Modells ist sehr vielfältig, da das Teilchen klassisch für einen schwachen Bias lokalisiert ist und daher nur durch einen quantenmechanischen Tunnelvorgang die Potenzialmulde wechseln kann. Wird der Bias stark genug, dann tritt ab einer Grenzschwelle auch klassischer Transport auf. Das Bad zwingt nun das System in den klassischen Bereich, andererseits kann es auch klassisch zu thermisch aktiviertem Tunneln beitragen. Bei einer starken Badkopplung und einer Temperatur $T = 0$ erwarten wir daher Transport erst ab einer gewissen Grenzschwelle für den Bias, da Tunneln durch die starke Badkopplung unterdrückt und klassischer Transport nicht möglich ist. Bei einer endlichen Badkopplungsstärke erwarten wir einen konkurrierenden Prozess zwischen Tunneln bei niedrigen Temperaturen und thermisch aktiviertem Transport bei steigender Temperatur [1, 4].

Die Übergangswahrscheinlichkeit vom Ort q_i zum Ort q_f für ein Teilchen innerhalb einer Zeit $t = t_f - t_i$ wurde in Gleichung (1.561) durch den Feynman-Vernon Propagator $J_{\text{FV}}(q_f, q_f, t_f | q_i, q_i, t_i) \equiv P_n(t)$ ausgedrückt. Indem wir nun die Sprungpfade und das entsprechende Realzeit-Influenzfunktional aus den vorangegangenen Abschnitten verwenden, finden wir für die Übergangsamplitude $P_n(t)$ unter Verwendung der Gleichungen (2.91), (2.95) und (2.162) folgenden Ausdruck,

$$P_n(t) = \sum_{m=|n|}^{\infty} (-1)^{m-n} \int_0^t dt_{2m} \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{2m} \quad (2.163)$$

$$\times \sum_{\{\xi_j\}'} B_m G_m \sum_{\{\eta_j\}'} H_m .$$

Dabei haben wir die Notation aus [1] verwendet,

$$B_m = B_m[\{\xi_i, t_k\}] = \exp \left[-i\epsilon \sum_{i=1}^{2m} \xi_i t_i \right], \quad (2.164)$$

$$G_m = G_m[\{\xi_i, t_k\}] = \exp \left[\sum_{i>j}^{2m} \xi_i Q'(t_i - t_j) \xi_j \right], \quad (2.165)$$

$$H_m = H_m[\{\xi_i, \eta_j, t_k\}] = \exp \left[i \sum_{i>j}^{2m} \xi_i Q''(t_i - t_j) \eta_j \right]. \quad (2.166)$$

Die Summation über alle Ladungskonfigurationen ξ_j und η_j unter Berücksichtigung

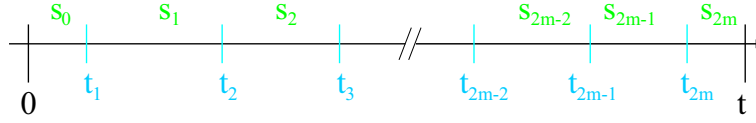


Abbildung 2.7: Diese Abbildung verdeutlicht den Übergang von den $2m$ Sprungzeiten t_i zu den $2m + 1$ Differenzzeiten s_j .

sichtigung der Randbedingungen (2.88),

$$\sum_j \xi_j = 0, \quad \sum_j \eta_j = 2n \quad (2.167)$$

wird durch die gestrichene Summation über $\{\xi_j\}'$ und $\{\eta_j\}'$ symbolisiert.

Die im Folgenden wichtige charakteristische Funktion, also die Fouriertransformierte von $P_n(t)$, durch welche sich alle Momente generieren lassen, erhalten wir durch

$$\tilde{P}(\rho, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\rho n q_0} P_n(t). \quad (2.168)$$

Anstatt der zeitgeordneten Integration über den Zeiten $t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_{2m}$ bietet sich ein Übergang zu Differenzzeiten $s_j = t_{j+1} - t_j$ an, wobei gilt

$$t_i = \sum_{k=0}^{i-1} s_k = t - \sum_{k=i}^{2m} s_k, \quad t_0 = 0, \quad t_{2m+1} = t. \quad (2.169)$$

Die zeitgeordnete Integration geht dabei wie folgt

$$\int_0^t dt_{2m} \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \rightarrow \int_0^\infty ds_0 \cdots ds_{2m} \delta(\sum_{j=0}^{2m} s_j - t) \quad (2.170)$$

in eine freie Integration von Differenzzeiten über, wobei die Delta-Funktion für die notwendige Randbedingung sorgt (s. Abbildung 2.7). Mit der Einführung der sogenannten Nichtdiagonalladung p_j durch

$$p_j = \sum_{k=1}^j \xi_k = - \sum_{k=j+1}^{2m} \xi_k, \quad p_0 = p_{2m} = 0, \quad (2.171)$$

welche die Nichtdiagonalität zwischen den Sprungzeiten t_j und t_{j+1} angibt (s. Abbildung 2.8), können wir die Faktoren B_m , G_m und H_m einfach mithilfe der Differenzzeiten s_j sowie der aufsummierten Differenzzeit

$$s_{jk} = t_j - t_k = \sum_{l=k}^{j-1} s_l = s_{j-1} + s_{j-2} + \dots + s_k \quad (2.172)$$

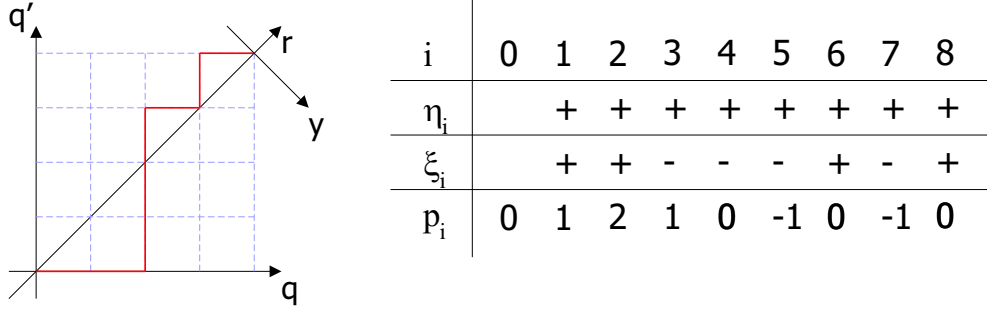


Abbildung 2.8: Diese Abbildung zeigt die aufsummierte Offdiagonalladung p_i , welche im Text eingeführt wird. Die Ladung η_i gehört dabei zur klassischen Koordinate r entsprechend Gleichung (2.82), während die Ladung ξ_i die Fluktuationskoordinate y mittels Gleichung (2.83) beschreibt.

wie folgt ausdrücken: der Bias geht in Gleichung (2.163) durch den Term B_m aus Gleichung (2.164) ein und nimmt folgende Form an

$$B_m = \exp \left[-i\epsilon \sum_{j=1}^{2m} \xi_j t_j \right] = \exp \left[i\epsilon \sum_{j \leq k}^{2m} \xi_j s_k \right] = \exp \left[i\epsilon \sum_{j=1}^{2m-1} p_j s_j \right] \quad (2.173)$$

$$= \exp \left[i\varphi_m \right]. \quad (2.174)$$

Wir haben dabei die im Folgenden noch öfters angewandte Summenregel

$$\sum_{i \leq j}^{2m} \hat{=} \sum_{j=1}^{2m} \sum_{i=1}^j \hat{=} \sum_{i=1}^{2m} \sum_{j=i}^{2m} \quad (2.175)$$

verwendet. Die thermischen Fluktuationen koppeln an den Realteil der Badkorrelationsfunktion $Q(t)$ und werden durch den Faktor G_m repräsentiert. Demgegenüber koppelt der dissipative Teil an den Imaginärteil von $Q(t)$ und geht über den Term H_m in den obigen Ausdruck für die charakteristische Funktion $\tilde{P}(\rho, t)$ ein,

$$H_m = \exp \left[i \sum_{j > k}^{2m} \xi_j Q''(s_{jk}) \eta_k \right] = \exp \left[i \sum_{j=1}^{2m-1} \eta_j \chi_{j,m} \right]. \quad (2.176)$$

wobei wir noch die Größe

$$\chi_{j,m} = \sum_{i > j}^{2m} \xi_i Q''(s_{ij}) \quad (2.177)$$

eingeführt haben, was sich im Folgenden als nützlich herausstellen wird und der Notation in Referenz [1] entspricht.

Wir betrachten nun die charakteristische Funktion $\tilde{P}(\rho, t)$ aus Gleichung (2.168). Durch Umstellen der Summation über m und n können wir die Summation über die erlaubte Ladungskonfiguration $\{\eta_j\}'$ durchführen. Dies geschieht im einzelnen durch die folgenden Schritte, wobei wir zur Vereinfachung der Notation $-i\rho q_0 = k$ setzen

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ikn} \sum_{m=|n|}^{\infty} (-1)^{m-n} \sum_{\{\eta_j\}'} H_m \quad (2.178)$$

$$= 1 + \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \sum_{n=-m}^m e^{i(k+\pi)n} \sum_{\{\eta_j=\pm 1\}} \delta_{2n, \sum_{j=1}^{2m} \eta_j} H_m, \quad (2.179)$$

wobei in der zweiten Zeile über alle Ladungskonfigurationen summiert wird und die nachfolgende Kronecker-Delta Funktion die Beschränkung auf erlaubte Konfigurationen gewährleistet. Nun kann man dies aber als Restriktion für die Summation über die Variable $n = -m, \dots, m$ betrachten, womit n den Wert $1/2 \sum_{j=1}^{2m} \eta_j$ annimmt. Dies führt schließlich auf

$$1 + \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \sum_{\{\eta_j=\pm 1\}} \prod_{j=1}^{2m} \exp\left[i(k+\pi)\frac{1}{2}\eta_j\right] \prod_{j=1}^{2m-1} \exp\left[i\chi_{j,m}\eta_j\right] \quad (2.180)$$

$$= 1 + \sin\left[\frac{k}{2}\right] \sum_{m=1}^{\infty} 2^{2m} (-1)^m \prod_{j=1}^{2m-1} \sin\left[\frac{k}{2} + \chi_{j,m}\right], \quad (2.181)$$

$$= 1 + \sinh\left[\frac{\rho q_0}{2}\right] \sum_{m=1}^{\infty} 2^{2m} \prod_{j=1}^{2m-1} \sinh\left[\frac{\rho q_0}{2} + i\chi_{j,m}\right]. \quad (2.182)$$

Für die charakteristische Funktion $\tilde{P}(\rho, t)$ erhalten wir somit

$$\tilde{P}(\rho, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\rho n q_0} P_n(t) \quad (2.183)$$

$$= 1 + \sinh\left[\frac{\rho q_0}{2}\right] \sum_{m=1}^{\infty} \Delta^{2m} \int_0^{\infty} ds_0 \cdots ds_{2m} \delta\left(\sum_{j=0}^{2m} s_j - t\right) \\ \times \sum_{\{\xi_j\}'} B_m G_m \prod_{j=1}^{2m-1} \sinh\left[\frac{\rho q_0}{2} + i\chi_{j,m}\right]. \quad (2.184)$$

Da der rechte Teil wegen des Terms $\sinh[\rho q_0/2]$ an der Stelle $\rho = 0$ verschwindet, liest man hier sofort die korrekte Normierung $\sum_n P_n(t) = \tilde{P}(\rho, t)|_{\rho=0} = 1$ ab. Bei der Bildung der Momente $\langle q^l(t) \rangle$ muss daher immer eine ungerade

Anzahl von partiellen Ableitungen nach der Variablen ρ auf diesen ersten Term erfolgen, da ansonsten der gesamte Term bei $\rho = 0$ verschwindet.

Durch Ableitung nach der Variablen ρ werden nun die Momente $\langle q^l(t) \rangle$ erzeugt,

$$\langle q^l(t) \rangle = \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \right)^l \tilde{P}(\rho, t) \Big|_{\rho=0}. \quad (2.185)$$

Da die Variable ρ in Gleichung (2.183) nur über den Hyperbelsinus eingeht und dieser bei $\rho = 0$ verschwindet, vereinfachen sich die Ausdrücke für die ersten Momente deutlich. Wir finden beispielsweise

$$\begin{aligned} \langle q(t) \rangle &= -i \frac{q_0}{2} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \Delta^{2m} \int_0^{\infty} ds_0 \cdots ds_{2m} \delta(\sum_{j=0}^{2m} s_j - t) \\ &\times \sum_{\{\xi_j\}'} B_m G_m \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}], \end{aligned} \quad (2.186)$$

$$\begin{aligned} \langle q^2(t) \rangle &= -2 \left(\frac{q_0}{2} \right)^2 \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \Delta^{2m} \int_0^{\infty} ds_0 \cdots ds_{2m} \delta(\sum_{j=0}^{2m} s_j - t) \\ &\times \sum_{\{\xi_j\}'} B_m G_m \sum_{k=1}^{2m-1} \cot[\chi_{k,m}] \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}]. \end{aligned} \quad (2.187)$$

Bei der Summation über alle neutralen Sets von Ladungskonfigurationen $\{\xi_j = \pm 1\}$ gibt es zu jedem Pfad einen konjugierten Pfad mit genau umgekehrtem Vorzeichen der Ladungen ξ_j . Bildlich sind dies genau die an der klassischen Koordinate r gespiegelten Pfade, wie man sich an Abbildung 2.8 leicht klarmacht. Die Bias-Phase φ_m aus Gleichung (2.174) wechselt bei dieser Pfadkonjugation ihr Vorzeichen. Dasselbe gilt für die Größe χ_m aus Gleichung (2.177). Für das erste Moment lässt sich der folgende Anteil schreiben als

$$-i B_m \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}] = \sin[\varphi_m] \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}], \quad (2.188)$$

da bei einer Pfadkonjugation B_m in den konjugiert-komplexen Anteil übergeht und das Produkt über die Sinus-Faktoren $(-1)^{2m-1} = -1$ liefert. Damit ist leicht zu sehen, dass das erste Moment wie gefordert, eine reelle Größe darstellt. Der Influenzfaktor G_m ist invariant, da die Offdiagonalladung ξ dort bilinear eingeht.

Beim zweiten Moment liefert das Produkt der Sinus-Faktoren eine Eins, so dass B_m als $2 \cos[\varphi_m]$ geschrieben werden kann,

$$B_m \cot[\chi_{k,m}] \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}] = \cos[\varphi_m] \cot[\chi_{k,m}] \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}],$$

(2.189)

womit dieses Moment wie auch alle höheren Momente reell ist. Zusammenfassend erhalten wir für die ersten beiden Momente die Darstellung

$$\begin{aligned} \langle q(t) \rangle &= \frac{q_0}{2} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \Delta^{2m} \int_0^{\infty} ds_0 \cdots ds_{2m} \delta(\sum_{j=0}^{2m} s_j - t) \\ &\times \sum_{\{\xi_j\}'} G_m \sin[\varphi_m] \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}] , \end{aligned} \quad (2.190)$$

$$\begin{aligned} \langle q^2(t) \rangle &= -2 \left(\frac{q_0}{2} \right)^2 \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \Delta^{2m} \int_0^{\infty} ds_0 \cdots ds_{2m} \delta(\sum_{j=0}^{2m} s_j - t) \\ &\times \sum_{\{\xi_j\}'} \cos[\varphi_m] G_m \sum_{k=1}^{2m-1} \cot[\chi_{k,m}] \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}] . \end{aligned} \quad (2.191)$$

Der Faktor $\sin[\varphi_m]$ führt nun dazu, dass Pfade, welche die Diagonale kreuzen, also eine Offdiagonalladung $p_j = 0$ für $j \neq \{0, 2m\}$ besitzen, keinen Beitrag liefern. Weiterhin lesen wir ab, dass das erste Moment bei verschwindendem Bias $\epsilon \rightarrow 0$ erwartungsgemäß ebenfalls verschwindet, was beim zweiten Moment, welches die Diffusionskonstante definiert, nicht der Fall ist. Dies werden wir nun im Folgenden Abschnitt noch genauer untersuchen.

2.8 Mobilität und Diffusion

In diesem Abschnitt betrachten wir Mobilität und die Diffusionskonstante des Schmid-Modells. In beiden Fällen benötigen wir das Langzeitverhalten des Systems. Von Vorteil ist es dabei, nicht direkt den Grenzfall $t \rightarrow \infty$ durchzuführen, sondern die folgenden Eigenschaften der Laplace-Transformierten $\hat{F}(\lambda) = \mathcal{L}\{f(t)\}$ anzuwenden,

$$\mathcal{L}\{\dot{f}(t)\} = \lambda \hat{F}(\lambda) - f(0) , \quad (2.192)$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{f(t)}{t}\right\} = \int_{\lambda}^{\infty} du \hat{F}(u) , \quad (2.193)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda \hat{F}(\lambda) . \quad (2.194)$$

Für das Langzeitverhalten der statischen Mobilität $\mu(F = \hbar\epsilon/q_0)$ erhalten wir beispielsweise

$$\mu(F) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle q(t) \rangle}{F t} = \frac{1}{F} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda \int_{\lambda}^{\infty} du \langle \hat{q}(u) \rangle . \quad (2.195)$$

Dazu bilden wir die Laplace-Transformierte der charakteristischen Funktion $\tilde{P}(\rho, t)$. Nach der Ausintegration der Differenzzeiten s_0 und s_{2m} , welche nicht in die Faktoren von $\tilde{P}(\rho, t)$ eingehen und einen Faktor $1/\lambda^2$ produzieren, erhalten wir

$$\hat{P}(\rho, \lambda) = \int_0^\infty dt e^{-\lambda t} \tilde{P}(\rho, t) \quad (2.196)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\lambda} + \sinh\left[\frac{\rho q_0}{2}\right] \frac{1}{\lambda^2} \sum_{m=1}^\infty \Delta^{2m} \int_0^\infty ds_1 \cdots ds_{2m-1} e^{-\lambda(s_1 + \dots + s_{2m-1})} \\ &\times \sum_{\{\xi_j\}'} B_m G_m \prod_{j=1}^{2m-1} \sinh\left[\frac{\rho q_0}{2} + i\chi_{j,m}\right]. \end{aligned} \quad (2.197)$$

Die Laplace-transformierten Momente $\langle \hat{q}^l(\lambda) \rangle$ erhalten wir analog durch partielles Ableiten nach der Variablen ρ ,

$$\langle \hat{q}^l(\lambda) \rangle = \int_0^\infty dt e^{-\lambda t} \langle q^l(t) \rangle = \left(\frac{\partial}{\partial \rho}\right)^l \hat{P}(\rho, \lambda) \Big|_{\rho=0}. \quad (2.198)$$

Für die ersten beiden Momente geben wir wieder das explizite Ergebnis in Übereinstimmung mit Literatur [1] an,

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}(\lambda) \rangle &= \frac{q_0}{2} \frac{1}{\lambda^2} \sum_{m=1}^\infty (-1)^m \Delta^{2m} \int_0^\infty ds_1 \cdots ds_{2m-1} e^{-\lambda(s_1 + \dots + s_{2m-1})} \\ &\times \sum_{\{\xi_j\}'} \sin[\varphi_m] G_m \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}], \end{aligned} \quad (2.199)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}^2(\lambda) \rangle &= -\frac{q_0^2}{2} \frac{1}{\lambda^2} \sum_{m=1}^\infty (-1)^m \Delta^{2m} \int_0^\infty ds_1 \cdots ds_{2m-1} e^{-\lambda(s_1 + \dots + s_{2m-1})} \\ &\times \sum_{\{\xi_j\}'} \cos[\varphi_m] G_m \sum_{k=1}^{2m-1} \cot[\chi_{k,m}] \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}]. \end{aligned} \quad (2.200)$$

wobei wir wieder Gleichung (2.188) und (2.189) verwendet haben. Wir können nun das Integral auf der rechten Seite von Gleichung (2.195) ausführen, um aus dem ersten Moment (2.199) einen Ausdruck für die statische Mobilität $\mu(F)$ zu erhalten. Dabei erhalten wir aus der verbliebenen Abhängigkeit von $\langle \hat{q}(\lambda) \rangle$ nach λ den folgenden Beitrag

$$\frac{1}{F} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda \int_\lambda^\infty du \frac{e^{-u(s_1 + \dots + s_{2m-1})}}{u^2} = 1. \quad (2.201)$$

Die statische Mobilität besitzt somit die Darstellung

$$\begin{aligned} \mu(F) &= \frac{1}{F} \frac{q_0}{2} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \Delta^{2m} \int_0^{\infty} ds_1 \cdots ds_{2m-1} \\ &\quad \times \sum_{\{\xi_j\}'} \sin[\varphi_m] G_m \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}], \end{aligned} \quad (2.202)$$

Dasselbe Ergebnis erhalten wir auch aus der Definition der Mobilität mithilfe der Systemgeschwindigkeit im Langzeitlimit für das hier betrachtete Modell,

$$\mu_d(F) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \dot{q}(t) \rangle}{F} = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{F} \lambda^2 \langle \hat{q}(\lambda) \rangle. \quad (2.203)$$

Aus dem zweiten Moment können wir die Diffusionskonstante D bilden,

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \frac{\langle q^2(t) \rangle}{t} = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda \int_{\lambda}^{\infty} \langle \hat{q}^2(u) \rangle \quad (2.204)$$

$$\begin{aligned} &= -\left(\frac{q_0}{2}\right)^2 \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \Delta^{2m} \int_0^{\infty} ds_1 \cdots ds_{2m-1} \\ &\quad \times \sum_{\{\xi_j\}'} \cos[\varphi_{2m}] G_m \sum_{k=1}^{2m-1} \cot[\chi_{k,m}] \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}]. \end{aligned} \quad (2.205)$$

2.8.1 Mastergleichung und Poisson-Statistik

Bevor wir uns nun mit der Mobilität genauer beschäftigen, lohnt sich eine Betrachtung der sogenannten Mastergleichung, welche mittels Übergangsraten die Dynamik einer Wahrscheinlichkeitsverteilung beschreibt. Die Mastergleichung

$$\dot{P}_n(t) = \sum_{l=1}^{\infty} \gamma_l^+ P_{n-l}(t) + \gamma_l^- P_{n+l}(t) - P_n(t) \sum_{l=1}^{\infty} (\gamma_l^+ + \gamma_l^-) \quad (2.206)$$

beschreibt das Zeitverhalten von Wahrscheinlichkeiten an den Orten n , wobei die zeitliche Änderung durch Raten γ_l^{\pm} entsprechend Abbildung 2.9 beschrieben wird. Dieses Modell impliziert automatisch die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit durch die Relation $\sum_n \dot{P}_n(t) = 0$, welche sich direkt aus der Mastergleichung (2.206) ergibt. Mit der folgenden Definition

$$\gamma_l = \begin{cases} \gamma_l^+ & l > 0 \\ -\sum_{l=1}^{\infty} (\gamma_l^+ + \gamma_l^-) & l = 0 \\ \gamma_{-l}^- & l < 0 \end{cases}, \quad (2.207)$$

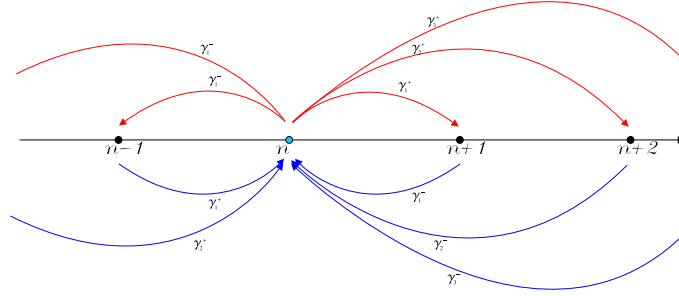


Abbildung 2.9: Diese Abbildung zeigt exemplarisch den Zu- und Abfluss der Wahrscheinlichkeit $P_n(t)$ an der Stelle n von und zu den benachbarten Stellen $n \pm 1$, $n \pm 2$, etc. mittels der Übergangsraten γ_l^\pm .

welche $\sum_l \gamma_l = 0$ impliziert, vereinfacht sich die Mastergleichung (2.206) zu

$$\dot{P}_n(t) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \gamma_l P_{n-l}(t). \quad (2.208)$$

Wegen der Translationsinvarianz bietet sich eine Fourierdarstellung für $P_n(t)$ an. Man erhält unter der Annahme, dass die Startbedingung $P_n(t=0) = \delta_{n,0}$ gilt, durch Einsetzen der Fourier-Entwicklung

$$P_n(t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk e^{-ikn} \tilde{P}(k, t), \quad (2.209)$$

in die Mastergleichung [49]

$$\tilde{P}(k, t) = \exp \left[t \sum_{l=1}^{\infty} \gamma_l^+ (e^{ikl} - 1) + \gamma_l^- (e^{-ikl} - 1) \right], \quad (2.210)$$

$$= \exp[t \tilde{\gamma}(k)], \quad \text{mit} \quad \tilde{\gamma}(k) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{ikl} \gamma_l, \quad (2.211)$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ikn} P_n(t) = \langle e^{ikn} \rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(ik)^l}{l!} \langle n^l(t) \rangle, \quad (2.212)$$

wodurch die Differenzialgleichung (2.206) gelöst wird. $\tilde{P}(k, t)$ ist dabei gleich der charakteristischen Funktion von $P_n(t)$ und besitzt die obige Reihendarstellung nach den Momenten $\langle n^l(t) \rangle$. Die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit impliziert $\tilde{P}(k=0, t) = \sum_n P_n(t) = 1$. Dies ist durch die Form der obigen Gleichung (2.210) unabhängig von der Wahl der Raten $\{\gamma_l^\pm\}$ gewährleistet und stellt daher keine Einschränkung für dieses Set dar. Bilden wir die

Laplace-Transformierte aus $\tilde{P}(k, t)$ zur Zeitvariable t , so finden wir den formal einfachen Ausdruck

$$\hat{P}(k, \lambda) = \int_0^\infty dt e^{-\lambda t} \tilde{P}(k, t) = \frac{1}{\lambda - \tilde{\gamma}(k)} = \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda^2} \frac{\tilde{\gamma}(k)}{1 - \tilde{\gamma}(k)/\lambda}, \quad (2.213)$$

welcher im Schmid-Modell mit $k = -i\rho q_0$ der Gleichung (2.197) entspricht.

Als Konsequenz aus der obigen Darstellung (2.212) erhält man das m -te Moment durch Differenziation aus $\tilde{P}(k, t)$ über³

$$\langle n^m(t) \rangle = (-i\partial_k)^m \tilde{P}(k, t) \Big|_{k=0}. \quad (2.214)$$

Durch die Reihendarstellung des Logarithmus von $\tilde{P}(k, t)$ definiert man die sogenannten Kumulanten bzw. irreduziblen Gewichte $\langle\langle n^m(t) \rangle\rangle$, deren spezielle Bedeutung durch die Exponentialform von $\tilde{P}(k, t)$ deutlich wird. Man definiert daher

$$\ln \tilde{P}(k, t) = t \tilde{\gamma}(k) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(ik)^l}{l!} \langle\langle n^l(t) \rangle\rangle, \quad (2.215)$$

wodurch sich die Kumulanten wieder durch Differenziation analog zu Gleichung (2.214) ergeben,

$$\langle\langle n^m(t) \rangle\rangle = (-i\partial_k)^m \ln \tilde{P}(k, t) \Big|_{k=0}, \quad (2.216)$$

$$= t \sum_{l=1}^{\infty} l^m [\gamma_l^+ + (-1)^m \gamma_l^-] = t \sum_{l=-\infty}^{\infty} l^m \gamma_l. \quad (2.217)$$

Explizit erhält man für die ersten Momente den Zusammenhang

$$\langle n(t) \rangle = t \sum_{l=1}^{\infty} l(\gamma_l^+ - \gamma_l^-) = \langle\langle n(t) \rangle\rangle, \quad (2.218)$$

$$\langle n^2(t) \rangle = \langle\langle n(t) \rangle\rangle^2 + t \sum_{l=1}^{\infty} l^2(\gamma_l^+ + \gamma_l^-), \quad (2.219)$$

$$= \langle\langle n(t) \rangle\rangle^2 + \langle\langle n^2(t) \rangle\rangle, \quad (2.220)$$

$$\langle n^3(t) \rangle = \langle\langle n(t) \rangle\rangle^3 + 3\langle\langle n^2(t) \rangle\rangle \langle\langle n(t) \rangle\rangle + \langle\langle n^3(t) \rangle\rangle. \quad (2.221)$$

Während bei den Momenten $\langle n^m(t) \rangle$ alle Potenzen t^n mit $n \leq m$ auftreten, wie man direkt aus Gleichung (2.214) und (2.210) ersieht, sind alle irreduziblen Momente $\langle\langle n^m(t) \rangle\rangle$ entsprechend Gleichung (2.217) linear in t . Dies ist

³ $\tilde{P}(k, t)$ entspricht dem generierenden Funktional $Z[b]$ aus Abschnitt 1.4.6.

wichtig beispielsweise für die Darstellung der Mobilität μ im Langzeitlimit $t \rightarrow \infty$ und ergibt sich direkt aus dem Ansatz für $\tilde{P}(k, t)$ in (2.210) als

$$\mu = \frac{\langle n(t) \rangle}{Ft} = \sum_{l=1} l \frac{\gamma_l^+ - \gamma_l^-}{F} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} l \frac{\gamma_l}{F}, \quad (2.222)$$

wobei F eine lineare Kraft darstellt. Analog erhalten wir für die Diffusionskonstante D den Ausdruck

$$D = \frac{\langle n(t)^2 \rangle - \langle n(t) \rangle^2}{t} = \frac{\langle\langle n(t)^2 \rangle\rangle}{t} = \sum_{l=1} l^2 (\gamma_l^+ + \gamma_l^-). \quad (2.223)$$

Sofern detaillierte Bilanz für die Raten γ_l^\pm gilt, also das Verhältnis

$$\frac{\gamma_l^-}{\gamma_l^+} = e^{-\beta l \Delta E} = e^{-l \hbar \beta \epsilon} \quad (2.224)$$

gerade dem Boltzmann-Gewicht entspricht, genügt die Kenntnis der γ_l^+ bzw. γ_l^- . Die Energie ΔE entspricht der Potenzialdifferenz zweier benachbarter Plätze, bspw. durch Anlegen einer linearen Kraft $F = \hbar \epsilon / q_0$ an das System. Bei Temperatur $T = 0$ verschwinden die Rückwärtsraten γ_l^- aufgrund der obigen Gleichung für $\Delta E \neq 0$.

Betrachtet man Gleichung (2.212) als Zustandssumme, so ergibt sich, dass diese als Summe aller Momente gebildet wird, während die Freie Energie als Summe aller Kumulanten darstellen lässt und dadurch über die Raten γ_l^\pm definiert werden kann.

Durch eine ähnliche Umformung sieht man, dass die Raten γ_l^\pm dem Erwartungswert einer Poisson-Statistik folgen [6],

$$\tilde{P}(k, t) = \langle e^{ikn} \rangle = \prod_{l=1} e^{-t\gamma_l^+} e^{t\gamma_l^+ e^{ikl}} e^{-t\gamma_l^-} e^{t\gamma_l^- e^{-ikl}}, \quad (2.225)$$

$$= \prod_{l=1} \left[\sum_{s=0} e^{ikls} \frac{(t\gamma_l^+)^s}{s!} e^{-t\gamma_l^+} \right] \left[\sum_{s=0} e^{-ikls} \frac{(t\gamma_l^-)^s}{s!} e^{-t\gamma_l^-} \right], \quad (2.226)$$

$$= \prod_{l=1} \left[\sum_{s=0} e^{ikls} G_s^{l+}(t) \right] \left[\sum_{s=0} e^{-ikls} G_s^{l-}(t) \right], \quad (2.227)$$

$$= \prod_{l=1} \langle e^{ikls} \rangle^+ \langle e^{-ikls} \rangle^-, \quad (2.228)$$

wobei G_s^\pm einem Poisson-Gewicht P_P entspricht, welches per Definition ganz allgemein folgende Form besitzt

$$P_P(s) = \frac{m^s}{s!} e^{-m} \quad \text{mit} \quad m = \langle s \rangle = \sum_{s=1}^{\infty} s P_P(s). \quad (2.229)$$

Die Poisson-Statistik beschreibt die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von diskreten Ereignissen, wenn der Erwartungswert der Variable $s \in \mathbb{N}$ dafür gleich $m \in \mathbb{R}$ ist. Unter anderem ergibt sich aus der Definition, dass alle Kumulanten identisch und damit gleich m sind. Dies liest man sofort aus der Definition ab, wenn man die charakteristische Funktion bildet, also

$$\tilde{P}_P(k) = \sum_s P_P(s) e^{iks} = \exp[m(e^{ik} - 1)], \quad (2.230)$$

$$\langle\langle n^m \rangle\rangle = (-i\partial_k)^m \ln \tilde{P}_P(k) \Big|_{k=0} = m. \quad (2.231)$$

Die durch den Übergang $n \rightarrow n \pm l$ erzeugten Kumulanten ergeben sich aus γ_l^\pm mit der einfachen Poisson-Form als

$$\langle\langle n^m(t) \rangle\rangle_{\pm l} = (-i\partial_k)^m \ln Z(k, t)^{l\pm} \Big|_{k=0} = t(\pm l)^m \gamma_l^\pm, \quad (2.232)$$

$$Z(k, t)^{l\pm} = \langle e^{ikls} \rangle^\pm = e^{t\gamma_l^\pm (e^{\pm ikl} - 1)}. \quad (2.233)$$

Dies entspricht erwartungsgemäß der Definition (2.217) für den Fall, dass außer der betrachteten Rate γ_l^\pm alle weiteren Raten zu Null gesetzt werden.

Die Dynamik der Mastergleichung wird also durch unabhängige Poisson-Prozesse beschrieben, wobei die Raten γ_l^\pm das gesamte System vollständig beschreiben. Im klassischen Fall sind die Raten γ_l^\pm positiv, was eine positive Wahrscheinlichkeitsverteilung garantiert; bei der Beschreibung eines quantenmechanischen Prozesses durch eine Mastergleichung ist dies nicht mehr zwingenderweise gegeben, was die Interpretation erschwert. Diesen Fall werden wir weiter unten vorfinden.

2.8.2 Ohmscher Skalen-Limes bei Temperatur $T = 0$

Wir betrachten nun den sogenannten Skalen-Limes. Dieser Grenzfall entspricht einer spektralen Dichte $J(\omega) = \lim_{\tau_c \rightarrow 0} M\gamma\omega \exp[-\omega\tau_c]$. Für den Kern $Q(t)$ findet man dadurch die Darstellung aus Gleichung (2.127). Insbesondere der Imaginärteil $Q''(t)$ verliert in diesem Limes seine Zeitabhängigkeit und geht in das Influenzfunktional als rein topologischer Faktor entsprechend Gleichung (2.202) mittels $\chi_{j,m} = \sum_{i>j}^{2m} \xi_j Q''(s_{ij})$ ein. Im ohmschen Skalen-Limes erhalten wir dadurch für den dissipativen Term $\chi_{j,m}$ aus Gleichung (2.177)

$$\chi_{j,m} = \pi K \sum_{i=j+1}^{2m} \text{sign}[s_{ij}] \xi_j, \quad (2.234)$$

$$= -\pi K p_j, \quad \text{sofern } s_{ij} > 0, \quad (2.235)$$

mit der Offdiagonalladung p_j entsprechend Gleichung (2.171). Die Vorzeichenfunktion $\text{sign}[s_{ij}]$ sichert hier lediglich die Eigenschaft $\chi_{j,m}(s_{ij} = 0) = 0$ entsprechend Gleichung (2.113). Dadurch hängt der Term $\chi_{j,m}$ nur noch von dem Ladungsset $\{\xi_j\}$ ab, nicht jedoch von den expliziten Sprungzeiten. Für die Bias-Phase φ_m finden wir entsprechend Gleichung (2.174) den Ausdruck

$$\varphi_m = \epsilon \sum_{j=1}^{2m-1} p_j s_j, \quad \sin[\varphi_m] = \text{Im} \left[i \prod_{j=1}^{2m-1} \exp[\epsilon p_j s_j] \right]. \quad (2.236)$$

Der Realteil des Integralkerns Q beschreibt den Einfluß der thermischen Fluktuationen und ist im Gegensatz zu den beiden letzten Termen noch temperaturabhängig und geht in den Ausdruck G_m mittels Gleichung (2.165) und der Differenzzeit s_{ij} in der Form

$$G_m = \prod_{i>j}^{2m} \left| \frac{\hbar\beta}{\pi\tau_c} \sinh \left(\frac{\pi s_{ij}}{\hbar\beta} \right) \right|^{2K\xi_j\xi_i} \quad (2.237)$$

für $s_{ij} \neq 0$ ein. Im Grenzfall tiefer Temperatur $T \rightarrow 0$ bekommen wir dafür die sehr einfache Darstellung

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} G_m = \prod_{i>j}^{2m} \left| \frac{s_{ij}}{\tau_c} \right|^{2K\xi_j\xi_i}. \quad (2.238)$$

Entsprechend Gleichung (2.127) gilt $G_m = 1$ an der Stelle $s_{ij} = 0$. Somit finden wir für die Mobilität (2.202) bei ohmscher spektraler Dichte und Temperatur $T = 0$ die normierte (dimensionslose) Form [1],

$$\mathcal{M} = \frac{\mu}{\mu_0} = \sum_m k_m, \quad (2.239)$$

wobei hier die klassische Mobilität μ_0 eines Brownschen Teilchens (1.94) mit der Kopplungskonstante K aus Gleichung (2.98) zur Normierung verwendet wird,

$$\mu_0 = \frac{1}{M\gamma} = \frac{q_0^2}{2\pi\hbar K}. \quad (2.240)$$

Ein Vergleich mit der aus der Mastergleichung (2.206) abgeleiteten Mobilität (2.222) liefert den Zusammenhang zwischen den Raten k_m und den Raten γ_m^\pm der Mastergleichung,

$$k_m = \frac{\gamma_m^+ - \gamma_m^-}{\mu_0 F}. \quad (2.241)$$

Die Raten γ_l^\pm der Mastergleichung sind per Definition nichtkorreliert. Dies bedeutet, dass beispielsweise zu der Rate γ_2^+ kein Beitrag $\propto (\gamma_1^+)^2$ beiträgt. Im Falle der Raten k_m des Schmid Modells wird dies durch den Bias-Faktor $\sin[\varphi_{2m}]$ sichergestellt. Dieser sorgt, wie im vorletzten Abschnitt besprochen, dafür, dass zu den Raten k_m nur Pfade beitragen, welche die Diagonale zwischenzeitlich nicht berühren. Dadurch handelt es sich hierbei ebenfalls um irreduzible Beiträge. Pfade, welche die Diagonale zwischenzeitlich berühren, könnten als sukzessive Abfolge zweier hintereinandergeschalteter Pfade generiert werden und wären nicht irreduzibel. Die Faktoren k_m entsprechen somit Übergangsraten um m Plätze in Richtung der linearen Kraft $F = \hbar\epsilon/q_0$ entsprechend den Raten der Mastergleichung aus den vorangegangenen Abschnitt. Allgemein finden wir somit für die Raten k_m aus Gleichung (2.202) für die Mobilität im Schmid Modell den Ausdruck

$$k_m = \frac{\pi K}{\epsilon} (-1)^m \Delta^{2m} \int_0^\infty ds_0 \dots ds_{2m-1} \sum_{\{s_j\}'} \sin[\varphi_m] G_m \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\chi_{j,m}] \quad (2.242)$$

Allerdings ist hier Vorsicht geboten, da es bei der Zuordnung keinen echten Entwicklungsparameter gibt, welcher die Zuordnung aufgrund einer orthogonalen Basis eindeutig festlegen würde. Erst durch Vergleich der Ausdrücke für höhere Momente entsprechend Gleichung (2.217) zeigt sich, ob die Zuordnung der Raten k_m richtig gewählt wurde. Bei Temperatur $T = 0$ im Grenzfall $\kappa \rightarrow 0$ erhalten wir für die Raten k_m entsprechend Gleichung (2.239) durch direkten Vergleich

$$k_m = \frac{2\pi K}{\epsilon} \frac{(-1)^{m+1} \Delta^{2m}}{m} \sum_{\{\xi_j\}'_+} \prod_{j=1}^{2m-1} \sin[\pi K p_j] \quad (2.243)$$

$$\times \int_{0^+}^\infty ds_1 \dots ds_{2m-1} \sin \left[\epsilon \sum_{j=1}^{2m-1} p_j s_j \right] \prod_{i<j}^{2m} \left(\frac{s_{ij}}{\tau_c} \right)^{2K \xi_i \xi_j},$$

wobei wir o.B.d.A. die erste Offdiagonalladung $\xi_1 = +1$ gesetzt haben, was wir mit der Notation $\sum_{\{\xi_j\}'_+}$ symbolisieren. Explizit erhalten wir für die ersten beiden Raten k_1 und k_2 die Ausdrücke

$$k_1 = \frac{2\pi K}{\epsilon} \Delta^2 \sin[\pi K] \int_{0^+}^\infty ds_1 \sin[\epsilon s_1] (\omega_c s_1)^{-2K}, \quad (2.244)$$

$$= \pi K x_0^2 \sin[2\pi K] \Gamma[1 - 2K], \quad K < 1. \quad (2.245)$$

mit den umskalierten Variablen

$$x_1 = \epsilon s_1, \quad x_0 = \left[\frac{\Delta}{\epsilon} \left(\frac{\epsilon}{\omega_c} \right)^K \right]. \quad (2.246)$$

Die Rate k_2 liefert den Ausdruck

$$k_2 = -\pi K x_0^4 \sin^2[\pi K] \sin[2\pi K] \int_0^\infty dx_1 dx_2 dx_3 \sin[x_1 + 2x_2 + x_3] \\ \times \left[\frac{x_1 x_3}{(x_1 + x_2)(x_1 + x_2 + x_3)x_2(x_2 + x_3)} \right]^{2K}. \quad (2.247)$$

Erst kürzlich gelang es, dieses Integral analytisch zu berechnen, wobei das Resultat mit den Vorhersagen aus der Bethe-Ansatz Rechnung im nächsten Abschnitt mittels Gleichung (2.251) übereinstimmt [7].

2.9 Bethe-Ansatz Rechnung

In einer richtungsweisenden Arbeit [47] wurde gezeigt, dass für das Boundary Sine-Gordon Modell eine selbstduale Lösung für den Transport existiert. Dabei besitzt die normierte Mobilität \mathcal{M} bei der Temperatur $T = 0$ die selbstduale Form [1, 6]

$$\mathcal{M}(K, \frac{\epsilon}{\epsilon_0}) = 1 - \mathcal{M}(\frac{1}{K}, \frac{\epsilon}{\epsilon_0}). \quad (2.248)$$

Eine Störungsreihe für die Mobilität \mathcal{M} liefert dort die Entwicklung

$$\mathcal{M} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1} \Gamma[\frac{3}{2}] \Gamma[Kn + 1]}{n! \Gamma[Kn + \frac{3}{2} - n]} \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_0}\right)^{2(Kn-n)}, \quad (2.249)$$

Der Parameter ϵ_0 entspricht dabei in der vorangegangenen Notation dem Wert

$$\epsilon_0^{2-2K} = \frac{2^{2-2K} \pi^2 \Delta^2}{\Gamma^2[K] \omega_c^{2K}}, \quad \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_0}\right)^{2K-2} = x_0^2 \frac{\pi^2 2^{2-2K}}{\Gamma^2[K]}. \quad (2.250)$$

Entsprechend Gleichung (2.239) erhalten wir für die Raten k_n den Ausdruck

$$k_n = \frac{(-1)^{n-1} \Gamma[\frac{3}{2}] \Gamma[Kn + 1]}{(n-1)! \Gamma[Kn + \frac{3}{2} - n]} \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_0}\right)^{2(Kn-n)}. \quad (2.251)$$

Für fraktionales K lassen sich diese Raten durch hypergeometrische Funktionen aufgrund der Produktformel der Gamma-Funktion ausdrücken. Mittels der fraktionalen Ableitung

$$\hat{D}_q^{-y} q^{x-1} = \frac{1}{\Gamma[y]} \int_0^q dt t^{x-1} (q-t)^{y-1} = \frac{\Gamma[x]}{\Gamma[x+y]} q^{x+y-1} \quad (2.252)$$

entsprechend Gleichung (2.149) können wir dies in der einfachen Form

$$k_n = \frac{(-1)^{n-1}}{(n-1)!} \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \Gamma\left[\frac{3}{2}\right] \hat{D}_q^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{d}{dq}\right)^n q^{Kn} \Big|_{q=(\epsilon/\epsilon_0)^2} \quad (2.253)$$

darstellen. Dies liefert für die Mobilität nun den Ausdruck

$$\mathcal{M} = q^{-\frac{1}{2}} \Gamma\left[\frac{3}{2}\right] \hat{D}_q^{-\frac{1}{2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{(n-1)!} \left(\frac{d}{dq}\right)^n q^{Kn} \Big|_{q=(\epsilon/\epsilon_0)^2}. \quad (2.254)$$

Das Verhältnis der beiden Gamma-Funktionen auf der rechten Seite von Gleichung (2.252) lässt sich auch durch ein Konturintegral in der folgenden Form darstellen [1, 52]

$$\hat{D}_q^{-y} q^{x-1} = \frac{\Gamma[1-y]}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} dz z^{x-1} (z-1)^{y-1} q^{x+y-1}, \quad (2.255)$$

und führt nach der Summation über n zu der Darstellung

$$\mathcal{M} = q^{-\frac{1}{2}} \Gamma\left[\frac{3}{2}\right] \hat{D}_q^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} dz \left(\frac{1}{z-1} - \frac{q}{(qz)^K + q(z-1)} \right) \Big|_{q=(\epsilon/\epsilon_0)^2}, \quad (2.256)$$

wobei die Kontur \mathcal{C} bei $z = 0$ beginnt, den Schnitt bei $z < 1$ gegen den Uhrzeigersinn umfährt und bei $z = 0$ endet.

In analoger Weise kann die Mobilität direkt durch ein Konturintegral ausgehend von Gleichung (2.249) dargestellt werden. Aus dieser Darstellung kann nun eine konvergente Reihe für $K > 1$ und $K < 1$ abgeleitet werden, wobei die Dualität entsprechend (2.248) automatisch erhalten bleibt [1, 6].

2.10 Zustandssumme

Die Summe über alle Pfade (also das Pfadintegral $\oint \mathcal{D}q$) geht nach der Vorarbeit in vorigen Abschnitt in eine Integration über alle erlaubten Sets von Ladungen u_i und einer Integration über alle dazugehörigen möglichen Sprungzeiten τ_i über. Formal schreiben wir dies also folgendermaßen,

$$\oint \mathcal{D}q \rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{u_i\}'} \prod_{l=0}^{2n} \left[\int_0^{\hbar\beta} d\tau_l \right] \delta\left(\sum_i \tau_i - \hbar\beta\right). \quad (2.257)$$

Die Summe über alle möglichen Ladungskonfigurationen $\sum_{\{u_i\}'}$ wird dabei eingeschränkt durch die Randbedingung (2.68); im Ladungsbild entspricht dies der Forderung nach Ladungsneutralität. Die Delta-Funktion erfüllt dabei

die Forderung $\sum_i \tau_i = \hbar\beta$. Für das generierende Funktional $Z[\lambda]$ erhalten wir mit Gleichung (2.67), (2.96) und (2.162) für das Schmid-Modell im Tight-Binding Limes die Form⁴

$$\begin{aligned} Z_{\text{STB}} &= \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{2m} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{2m} \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \sum_{\{\xi_i\}} \exp \left[-\lambda \sum_{j=1}^{2m} \xi_j \tau_j \right] \\ &\quad \times \exp \left[\sum_{j>i}^{2m} \xi_i W(\tau_i - \tau_j) \xi_j \right]. \end{aligned} \quad (2.258)$$

Im ohmschen Grenzfall erhalten wir daraus entsprechend Gleichung (2.130)

$$\begin{aligned} Z_{\text{STB}} &= \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{2m} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{2m} \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \sum_{\{\xi_i\}} \exp \left[-\lambda \sum_{j=1}^{2m} \xi_j \tau_j \right] \\ &\quad \times \exp \left[\sum_{j>i}^{2m} \xi_i \xi_j 2K \ln \left\{ \frac{\hbar\beta\omega_c}{2} \sin \left[\frac{\pi}{\hbar\beta} (\tau_i - \tau_j) \right] \right\} \right]. \end{aligned} \quad (2.259)$$

Diese Gleichung wird uns im nächsten Abschnitt nochmals begegnen.

⁴ Der Parameter λ kann auch einer linearen Kraft entsprechen, wie schon im ersten Abschnitt verdeutlicht wurde. In diesem Fall werden Erwartungswerte von Momenten der Systemkoordinate ebenfalls durch Ableitung nach dem Parameter λ erzeugt.

Kapitel 3

Identifikation dissipativer Modelle mit bekannten Feldmodellen

In diesem Kapitel werden wir verschiedene Zusammenhänge und Abbildungen von dissipativen Modellen auf andere Modelle behandeln. Eine Identifikation äquivalenter Modelle kann dabei auf verschiedenen Ebenen erfolgen. Lässt sich die Hamiltonfunktion des einen Modells auf ein anderes Modell transformieren, so hat man eine direkte Abbildung und die beiden Modelle sind identisch. Man kann jedoch auch die Zustandssumme oder Korrelationsfunktionen verschiedener Modelle betrachten und vergleichen. Da alle relevanten physikalischen Größen aus der Zustandssumme oder den Korrelationsfunktionen abgeleitet werden können, besitzen Modelle mit identischer Zustandssumme dieselben observablen Größen. Ein bekanntes Beispiel dafür ist die Bosonisierung in 2 Dimensionen. Betrachtet man die Wirkung der folgenden freien und masselosen Modelle für Fermionen S_F bzw. Bosonen S_B in 2 Dimensionen,

$$S_F(\bar{\psi}, \psi) = \int d^2x \bar{\psi}(x) \gamma^\mu \partial_\mu \psi(x), \quad \psi = \begin{pmatrix} L(x) \\ R(x) \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

$$S_B(\phi) = \int d^2x (\partial_\mu \phi)^2, \quad (3.2)$$

so findet man, dass folgende Erwartungswerte des bosonischen bzw. fermionischen Modells identisch sind

$$\left\langle \prod_j^n \mu^2 \exp [i\sqrt{4\pi}\{\phi(x_j) - \phi(x'_j)\}] \right\rangle_{\phi \text{ ren.}}$$

$$= (2\pi)^{2n} \left\langle \prod_j^n \bar{L}(x_j) R(x_j) \bar{R}(x'_j) L(x'_j) \right\rangle_\psi . \quad (3.3)$$

Dies ist ein sehr erstaunlicher Zusammenhang, welcher auf 2 dimensionale Systeme beschränkt ist und es erlaubt, fermionische auf bosonische Modelle und umgekehrt abzubilden. Dabei kann entsprechend der obigen Gleichung die folgende Zuordnung vorgenommen werden,

$$\exp [i\sqrt{4\pi}\phi(x)] \iff \bar{L}(x)R(x) , \quad (3.4)$$

$$\exp [-i\sqrt{4\pi}\phi(x)] \iff \bar{R}(x)L(x) , \quad (3.5)$$

sofern man darunter eine Identität von Erwartungswerten des bosonischen (3.2) bzw. fermionischen (3.1) Modells versteht [28, 30, 31]. Diese Zuordnung kann auch auf der Ebene des Hamiltonian erfolgen. Nimmt man beispielsweise das Luttinger-Liquid Modell, welches ein eindimensionales Elektronengas mit linearisierter Dispersionsrelation an der Fermi-Kante modelliert, so findet man, dass es für das fermionische Modell elementare Anregungen und damit Pseudoteilchen gibt, welche sich bosonisch verhalten und aus einer Kombination aller Fermionen besteht. Der fundamentale Unterschied von Modellen in einer Raumdimension zu Modellen in höherdimensionalen Räumen besteht darin, dass im ersten Fall die Fermikante aus zwei isolierten Punkten besteht, während im zweiten Fall es sich um topologisch zusammenhängende Hyperflächen handelt. Für niederenergetische Elektronenanregung an der Fermi-Kante gibt es daher im eindimensionalen Fall keine Freiheitsgrade. Aus diesem Grund müssen solche Anregungen notwendigerweise Vielelektronenprozesse entsprechen [31, 32].

3.1 Das harmonische Bad als Gauß-Modell

In diesem Abschnitt werden wir untersuchen, wie das harmonische Bad aus Gleichung (1.6) mit dem Gauß-Modell

$$H = \frac{1}{2} \int_0^L ds \Pi^2(s, t) + \kappa^2 (\partial_s \phi(s, t))^2 + \Omega^2 \phi(s, t)^2 \quad (3.6)$$

in Zusammenhang gebracht werden kann, wobei hier noch ein Masseterm mit der Masse Ω hinzugefügt wurde¹. Durch eine Fourier-Transformation mit der entsprechenden Matusbara-Frequenz $\nu_\alpha = \frac{2\pi}{L}\alpha$ und einem reellen

¹Das Gauß-Modell wird im Allgemeinen ohne einen solchen Masseterm definiert.

Skalierungsterm $m_\alpha > 0$ in der Form

$$\Pi(s, t) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\nu_\alpha s}}{\sqrt{m_\alpha}} P_\alpha(t), \quad (3.7)$$

$$\phi(s, t) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \sqrt{m_\alpha} e^{-i\nu_\alpha s} Q_\alpha(t), \quad (3.8)$$

finden wir für das Gauß-Modell die Darstellung

$$H = \frac{1}{4} \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{P_\alpha(t)P_{-\alpha}(t)}{m_\alpha} + m_\alpha [\kappa^2 \nu_\alpha^2 + \Omega^2] Q_\alpha(t)Q_{-\alpha}(t) \right\}. \quad (3.9)$$

Als Badoszillatorfrequenzen ω_α finden wir die Beiträge

$$\omega_\alpha^2 = \kappa^2 \nu_\alpha^2 + \Omega^2. \quad (3.10)$$

Da der Term Ω eine untere Schranke für die Badfrequenzen darstellt, müssen wir diesen Term Null setzen. Dies wiederum zwingt uns, den Gleichstromanteil

$$\frac{P_0}{\sqrt{m_0}} = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_0^L ds \Pi(s) = 0, \quad (3.11)$$

des Feldes $\Pi(s, t)$ ebenfalls Null zu setzen, da entsprechend Gleichung (3.9) mit $\Omega = 0$ zu dieser Mode eine verschwindende Badfrequenz mit $\omega_0 = 0$ gehört. Der Gleichstromanteil des Feldes $\phi(s, t)$ entkoppelt vollkommen und es kann daher eine Eichung, z.B. $Q_0 = 0$ vorgenommen werden. Dieser Punkt findet weiter unten in diesem Kapitel noch genauere Beachtung.

Gleichung (3.9) entspricht nun formal schon fast der gesuchten Form des Badhamiltonian (1.6). Allerdings müssen wir noch fordern, dass die Badenergie reell und positiv definit ist. Dies führt auf die Bedingung

$$Q_\alpha(t)^* = Q_{-\alpha}(t), \quad P_\alpha(t)^* = P_{-\alpha}(t), \quad (3.12)$$

wodurch die Felder $\Pi(s, t)$ und $\phi(s, t)$ reellwertig definiert werden und das Gauss-Modell nun eine positiv definite Energie besitzt,

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha>0}^{\infty} \left\{ \frac{|P_\alpha(t)|^2}{m_\alpha} + m_\alpha \kappa^2 \nu_\alpha^2 |Q_\alpha(t)|^2 \right\}. \quad (3.13)$$

Für die reellen Felder $\Pi(s, t)$ und $\phi(s, t)$ erhalten wir daher die Zerlegung

$$\Pi(s, t) = \sum_{\alpha>0} \left\{ \frac{P'_\alpha(t)}{\sqrt{m_\alpha L}} \cos[\nu_\alpha s] + \frac{P''_\alpha(t)}{\sqrt{m_\alpha L}} \sin[\nu_\alpha s] \right\}, \quad (3.14)$$

$$= \operatorname{Re} \left[\sum_{\alpha>0} \frac{P_\alpha(t)}{\sqrt{m_\alpha L}} e^{-i\nu_\alpha s} \right], \quad (3.15)$$

$$\phi(s, t) = \sum_{\alpha>0} \left\{ \sqrt{\frac{m_\alpha}{L}} Q'_\alpha(t) \cos[\nu_\alpha s] + \sqrt{\frac{m_\alpha}{L}} Q''_\alpha(t) \sin[\nu_\alpha s] \right\}, \quad (3.16)$$

$$= \operatorname{Re} \left[\sum_{\alpha>0} Q_\alpha(t) \sqrt{\frac{m_\alpha}{L}} e^{-i\nu_\alpha s} \right]. \quad (3.17)$$

Weiterhin lesen wir aus Gleichung (3.13) direkt ab, dass der Real- und Imaginärteil der Koeffizienten Q_α und P_α voneinander entkoppelt vorliegt. Für die Felder $\Pi(s, t)$ und $\phi(s, t)$ bedeutet dies eine Zerlegung nach gerader bzw. ungerader Parität,

$$\Pi^e(s, t) = \frac{\Pi(s, t) + \Pi(-s, t)}{2} = \sum_{\alpha>0} \frac{P'_\alpha(t)}{\sqrt{m_\alpha L}} \cos[\nu_\alpha s], \quad (3.18)$$

$$\Pi^o(s, t) = \frac{\Pi(s, t) - \Pi(-s, t)}{2} = \sum_{\alpha>0} \frac{P''_\alpha(t)}{\sqrt{m_\alpha L}} \sin[\nu_\alpha s], \quad (3.19)$$

und die entsprechende Zerlegung für das Feld $\phi(s, t)$.

Für die Lagrange-Funktion L des Bades erhalten wir somit

$$L = \frac{1}{2} \int_0^L ds (\partial_t \phi(s, t))^2 - \kappa^2 (\partial_s \phi(s, t))^2. \quad (3.20)$$

Dadurch ergibt sich die Wirkung S des Bad-Modells zu

$$S = \frac{1}{2} \int_0^L ds \int_0^T dt \phi(s, t) (\partial_t^2 - \kappa^2 \partial_s^2) \phi(s, t), \quad (3.21)$$

wobei wir die Randbedingung $\phi(s = L) \equiv \phi(s = 0)$ entsprechend Gleichung (3.16) genutzt haben.

Im weiteren betrachten wir dieses Badmodell in Imaginärzeit. Dadurch nimmt die Wirkung die Form

$$S^{(E)} = \frac{1}{2} \int_0^L ds \int_0^{\hbar\beta} d\tau \phi(s, \tau) (\partial_\tau^2 + \kappa^2 \partial_s^2) \phi(s, \tau), \quad (3.22)$$

$$= -\frac{1}{2} \phi(s, \tau) \cdot B(s, \tau | s', \tau') \cdot \phi(s', \tau'), \quad (3.23)$$

mit einem Integralkern $B(s, \tau | s', \tau')$ der Gestalt

$$B(s, \tau | s', \tau') = -\delta(s - s') \delta(\tau - \tau') (\partial_{\tau'}^2 + \kappa^2 \partial_{s'}^2) \quad (3.24)$$

an.

Der Inverse Operator von $B(s, \tau|s', \tau')$ besitzt nach Gleichung (A.25), (A.26) in der Spektraldarstellung des relevanten Funktionsraumes² mit dem Matsubara-Frequenzen $k_n = 2\pi n/(\hbar\beta)$ und $\nu_\alpha = 2\pi\alpha/L$ die Form

$$B^{-1}(s, \tau|s', \tau') = \frac{1}{\hbar\beta L} \sum_{\{\alpha, n\}'} \frac{\exp[ik_n(\tau - \tau')] \exp[i\nu_\alpha(s - s')]}{k_n^2 + \kappa^2\nu_\alpha^2}, \quad (3.25)$$

und entspricht damit dem Propagator des Gauß-Modells auf der euklidischen Fläche $\tau \in [0, \hbar\beta]$, $s \in [0, L]$. Der Prime in der obigen Gleichung an den Summanden soll daran erinnern, dass wir nicht über den Term mit $\alpha = 0$ und $n = 0$ summieren, da die dazugehörige Eigenfunktion dem Eigenwert Null entspricht. Die physikalische Bedeutung wurde nach Gleichung (3.9) diskutiert. Man beachte, dass der inverse Integralkern (3.25) automatisch reellwertig vorliegt, da die Eigenwerte nur quadratisch in α und n eingehen. Der Nullraum des Operators B wird durch alle harmonischen Funktionen beschrieben. Dadurch ist der inverse Operator nicht eindeutig, sondern es kann eine beliebige harmonische Funktion dazuaddiert werden. Dadurch lassen sich wie schon zuvor Randbedingungen erfüllen. Als Fundamentallösung bezeichnet man oft die Greenfunktion (B^{-1}), welche für den Quellpunkt s, τ bzw. den Aufpunkt s', τ' auf dem Rand des zu betrachtenden Gebiets verschwindet. Kennt man diese Fundamentallösung, so lässt sich mit Hilfe des Greenschen Integralsatzes eine Vorgabe an die Greenfunktion auf dem Rand explizit konstruieren. Mehr dazu folgt im Text weiter unten. Im Falle von Gleichung (3.25) finden wir dafür sofort die Darstellung

$$B^{-1}(s, \tau|s', \tau') = \frac{1}{\hbar\beta L} \sum_{\{\alpha, n\}'} \frac{\sin[ik_n\tau] \sin[ik_n\tau'] \sin[i\nu_\alpha s] \sin[i\nu_\alpha s']}{k_n^2 + \kappa^2\nu_\alpha^2}, \quad (3.26)$$

Eine explizite Darstellung in Form von elliptischen Funktionen und eine Behandlung der Gleichung (3.26) findet man in [36]. Bevor wir diesen Propagator $B^{-1}(s, \tau|s', \tau')$ in Abschnitt 3.5 im Zusammenhang mit dem Boundary Sine-Gordon Modell auswerten, werden wir im folgenden Abschnitt zunächst einige interessante Details des Gauß-Modells besprechen.

² Eigenfunktionen $u(s, \tau)$ zum Integralkern $B(s, \tau|s', \tau')$ mit $B(s, \tau|s', \tau') \cdot u(s', \tau') = \lambda u(s, \tau)$ kann man über einen Produktansatz der Form $u = S(s)T(\tau)$ ermitteln. Das vollständige System, aufgebaut durch die Funktionen $c_1 \exp[ikx] \otimes c_2 \exp[i\omega\tau]$ mit $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ liefert Eigenfunktionen mit Eigenwert $\lambda = c_1^2(\kappa k)^2 + c_2^2\omega^2$. Eigenfunktionen mit negativem Eigenwert, beispielsweise $\exp[px]$, lassen sich dadurch auf einem endlichen Intervall ebenfalls durch eine Fourierreihe darstellen.

3.2 Das Gauß-Modell

Das Gaußsche Modell spielt eine entscheidende Rolle bei der Abbildung des harmonischen Bades auf ein Feldmodell. Trotz seiner Einfachheit besitzt dieses Modell viele nichttriviale Eigenschaften, welche im Folgenden kurz vorgestellt werden [26, 27, 28, 29, 30].

Im weiteren Verlauf betrachten wir zuerst das Gauß-Modell auf der nicht-beschränkten Fläche $x \in \mathbb{R}^2$ mit der dazugehörigen Wirkung

$$S[\phi] = \frac{1}{2} \int d^2x (\partial_\mu \phi(x))^2 + m^2 \phi(x)^2 = \frac{1}{2} \phi(x) \cdot L(x, y) \cdot \phi(y), \quad (3.27)$$

$$L(x, y) = \delta^2(x - y) (\partial^2 + m^2), \quad (3.28)$$

wobei ein möglicher Randterm im Unendlichen vernachlässigt wurde. Den Faktor κ aus dem letzten Abschnitt erhält man einfach durch Umskalierung der Koordinate x_2 . Die 2-Punkt Korrelationsfunktion, also der Propagator des Modells, besitzt die aus Abschnitt 1.4.6 bekannte Form

$$\Delta(x) = \langle \phi(x) \phi(0) \rangle = L^{-1}(x, 0) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2p \frac{e^{ip \cdot x}}{p^2 + m^2}, \quad (3.29)$$

$$= \frac{1}{2\pi} K_0(m|x|), \quad (3.30)$$

mit der Besselfunktion K_0 , welche im Grenzfall $m \rightarrow 0$ das folgende Verhalten aufweist [51, 53],

$$\lim_{m \rightarrow 0} \Delta(x) \approx -\frac{1}{2\pi} \ln \left[\frac{me^\gamma |x|}{2} \right] = -\frac{1}{2\pi} \ln [\tilde{m}|x|]. \quad (3.31)$$

Mit $\gamma = -\psi(1) \approx 0,577$ wird die sogenannte Euler-Konstante bezeichnet, wobei $\psi(x)$ die Digamma-Funktion $\Gamma'(x)/\Gamma(x)$ darstellt. Abbildung 3.1 zeigt das Verhalten des Propagators für kleine Abstände. Die gestrichelte Linie repräsentiert dabei die Näherung (3.31). Die 2-Punkt Korrelationsfunktion (3.29) weist sowohl eine IR-Singularität ($|p| \rightarrow 0$) bei verschwindender Masse $m = 0$ als auch eine UV-Singularität ($|p| \rightarrow \infty$) an der Stelle $x = 0$ auf. Ein Cutoff für Impulse $|p| > \Lambda$ behebt die UV-Singularität und entspricht einer Diskretisierung, also einem Gitter im Ortsraum. Die Gitterkonstante a lässt sich durch den Cutoff Parameter Λ ausdrücken. Mit der Forderung nach periodischer Fortsetzung im Impulsraum erhalten wir $a = 2\pi/\Lambda$. Ebenso lässt sich die IR-Singularität durch einen Cutoff im Ortsraum für $|x| > R$ beheben, was umgekehrt im Impulsraum nun zu einer Diskretisierung mit der Konstanten $b = 2\pi/R \approx m$ führt. Der Grund für die IR-Singularität liegt darin, dass die Verschiebung der Amplitude um einen konstanten Faktor $\phi(x) \rightarrow \phi(x) + C$ die Wirkung nicht ändert. Durch den Cutoff $\Lambda \gg 1$ im

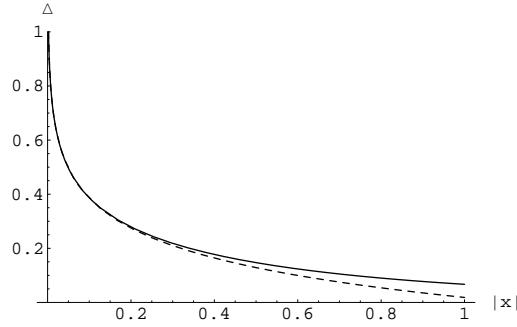


Abbildung 3.1: Der Propagator des 1+1 dimensionalen Gauß-Modells ist durch die Besselfunktion $K_0(m|x|)$ gegeben. Im Grenzfall $m \rightarrow 0$ findet man für die Besselfunktion das asymptotische Verhalten entsprechend Gleichung (3.31), welche hier durch die gestrichelte Linie repräsentiert wird.

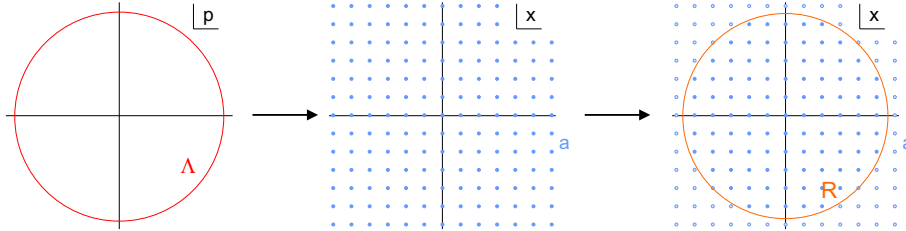


Abbildung 3.2: Ein Impuls-Cutoff an der Stelle $|p| = \Lambda$ führt zu einer Diskretisierung im Ortsraum x mit der Gitterkonstante $a = 2\pi/\Lambda$ und behebt die UV-Singularität. Ein Cutoff im Ortsraum an der Stelle $|x| = R$ behebt die IR-Singularität und führt wiederum im Impulsraum zu einer Diskretisierung mit der Gitterkonstante $b = 2\pi/R$.

Impulsraum bekommen wir einen renormierten Ausdruck für den ansonsten UV-divergenten Propagator an der Stelle $x = 0$ der Form,

$$\Delta(0) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{|p| < \Lambda} d^2p \frac{1}{p^2 + m^2} \approx -\frac{1}{2\pi} \ln \left[\frac{m}{\Lambda} \right]. \quad (3.32)$$

Damit lässt sich nun ein Propagator schreiben, welcher im Limes $|x| \rightarrow 0$ die obige Form besitzt und die allgemeine Form (3.29) erhält,

$$\Delta(x) \approx -\frac{1}{4\pi} \ln [\tilde{m}^2 + (\Lambda^{-2} + |x|^2)] = \frac{1}{4\pi} \ln \left[\frac{R^2}{a^2 + |x|^2} \right], \quad (3.33)$$

wobei in der zweiten Gleichung die Gitterkonstante $a \ll 1$ und die Länge $R \gg 1$ im Ortsraum verwendet wurde. Diese zweite Form wird häufig in der entsprechenden Literatur verwendet.

Mathematisch kann man dazu anmerken, dass man für alle einfach zusammenhängenden und beschränkten Gebiete G auf \mathbb{R}^2 den dazugehörigen Propagator $\Delta_G(x_1, x_2|x'_1, x'_2)$ sofort angeben kann, welcher auf dem Rand ∂G verschwindet. Dazu bildet man den Raum \mathbb{R}^2 auf \mathbb{C} mittels $z = x_1 + ix_2$ ab und sucht eine konforme Abbildung $f(z)$, welche das Gebiet G auf den Einheitskreis abbildet, wobei der Aufpunkt x'_1, x'_2 in den Ursprung abgebildet wird. Dass dies immer gelingt, ist die Aussage des berühmten Riemannschen Abbildungssatzes. Hat man eine solche konforme Abbildung $f(z)$ gefunden, so lautet der dazugehörige Propagator einfach [54]

$$\Delta_G(x_1, x_2|x'_1, x'_2) = -\frac{1}{2\pi} \ln |f(z)| . \quad (3.34)$$

Für das obige Beispiel eines Propagators auf dem Kreis mit Radius R finden wir die konforme Abbildung $f(z) = (z - z')/R$, womit wir sofort Gleichung (3.33) im Grenzfall $a \rightarrow 0$ reproduzieren, wo wir den Aufpunkt z' entsprechend Gleichung (3.29) Null gesetzt haben. Dies werden wir im nächsten Abschnitt genauer untersuchen.

Interessanterweise besitzt nun das Modell (3.27) trotzdem wohl definierte Erwartungswerte. So findet man sofort den trivialen Propagator für die Gradienten des Feldes,

$$\langle \partial_\mu \phi(x) \partial_\nu \phi(0) \rangle = \delta_{\mu\nu} \delta^2(x) . \quad (3.35)$$

Von besonderem Interesse ist nun der Erwartungswert der Vertex-Funktionen $\exp[i\beta\phi(x)]$. Aufgrund der gaußschen Form finden wir Erwartungswerte im Exponenten einfach in Analogie zu Gleichung (1.284) und (1.285) durch das Funktionalintegral mit dem Quellterm $\eta(x) = i \sum_j \beta_j \delta^2(x_j - x)$,

$$\begin{aligned} \frac{Z[\eta]}{Z[0]} &= \frac{1}{Z[0]} \int \mathcal{D}\phi \exp \left[-\frac{1}{2} \int d^2x \left\{ (\partial_\mu \phi(x))^2 + i \sum_j \beta_j \delta^2(x_j - x) \phi(x) \right\} \right] \\ &= \left\langle \prod_j \exp [i\beta_j \phi(x_j)] \right\rangle = \prod_{i,j} \exp \left[-\frac{1}{2} \beta_i \beta_j \Delta(x_i - x_j) \right] . \end{aligned} \quad (3.36)$$

Unter Verwendung der Darstellung (3.33) erhalten wir

$$\left\langle \prod_j \exp [i\beta_j \phi(x_j)] \right\rangle = \prod_i \left| \frac{R^2}{a^2} \right|^{-\frac{\beta_i^2}{8\pi}} \prod_{i \neq j} \left| \frac{R^2}{a^2 + (x_i - x_j)^2} \right|^{-\frac{\beta_i \beta_j}{8\pi}} . \quad (3.37)$$

Im ersten Term steht im Exponenten die Summe

$$\sum_i \beta_i^2 = \left(\sum_i \beta_i \right)^2 - \sum_{i \neq j} \beta_i \beta_j . \quad (3.38)$$

Durch diese Aufspaltung erhalten wir

$$\left\langle \prod_j \exp [i\beta_j \phi(x_j)] \right\rangle = \left| \frac{R^2}{a^2} \right|^{-\frac{(\sum_i \beta_i)^2}{8\pi}} \prod_{i \neq j} \left| \frac{a^2}{a^2 + (x_i - x_j)^2} \right|^{-\frac{\beta_i \beta_j}{8\pi}}. \quad (3.39)$$

Im masselosen Grenzfall $m = 0$, d.h. $R \rightarrow \infty$ geht der erste Term auf der rechten Seite gegen Null und der gesamte Erwartungswert verschwindet nur dann nicht, wenn die Bedingung

$$\sum_i \beta_i = 0 \quad (3.40)$$

erfüllt wird. Dies ist eine starke Einschränkung der Erwartungswerte und stellt eine sogenannte Superauswahlregel dar, die wir im Folgenden ausnützen werden. Selbst bei einem endlichen R wird ein Erwartungswert mit einer Gesamtladung $Q = \sum_i \beta_i$ um einen Faktor $(R/a)^{-Q^2/(4\pi)}$ gegenüber einem neutralen Erwartungswert mit $Q = 0$ unterdrückt.

Im Limes $a \rightarrow 0$ erhalten wir daraus mit Gleichung (3.38) und der Bedingung für Ladungsneutralität (3.40)

$$\lim_{a \rightarrow 0} \left\langle \prod_j \exp [i\beta_j \phi(x_j)] \right\rangle = \delta_{\sum \beta_i, 0} \prod_i |a|^{\frac{\beta_i^2}{4\pi}} \prod_{\substack{i \neq j \\ x_i \neq x_j}} |x_i - x_j|^{-\frac{\beta_i \beta_j}{4\pi}}. \quad (3.41)$$

Betrachtet man die Koeffizienten β_i als Ladungen, so tragen nur neutrale Ladungskonfigurationen zu von Null verschiedenen Erwartungswerten bei. Die obige Ladungsneutralität garantiert auch die Erhaltung der oben angesprochenen Symmetrie $\phi(x) \rightarrow \phi(x) + C$ in den Erwartungswerten, da ansonsten aus Gleichung (3.39) ein zusätzlicher Faktor

$$\left\langle \prod_j \exp [i\beta_j \phi(x_j)] \right\rangle \xrightarrow{\phi \rightarrow \phi + C} \left\langle \prod_j \exp [i\beta_j \phi(x_j)] \right\rangle \left\langle \exp [iC \sum_j \beta_j] \right\rangle \quad (3.42)$$

$$\xrightarrow{\sum \beta_i = 0} \left\langle \prod_j \exp [i\beta_j \phi(x_j)] \right\rangle \quad (3.43)$$

aufzutreten würde, welcher bei Ladungsneutralität jedoch verschwindet. Die Forderung der Ladungsneutralität ist also zwingend notwendig, um die Invarianz unter der Transformation $\phi(x) \rightarrow \phi(x) + C$ zu garantieren. Da ein endlicher Cutoff diese Invarianz zerstört, gilt die Forderung nach Ladungsneutralität streng nur im Grenzfall $R \rightarrow \infty$, was durch Gleichung (3.39) deutlich wurde. Da der Propagator aus Gleichung (3.35) für den Gradienten des Feldes Φ invariant unter der obigen Verschiebung ist, ist dieser gerade wohl definiert und frei von Divergenzen.

Mit der Renormierungskonstante Z_i definieren wir nun die (renormierten) Vertex-Operatoren $\mathcal{V}_{\beta_i}(x_i)$ mit dem Impulscutoff $\Lambda = 2\pi/a$,

$$\mathcal{V}_{\beta_i}(x_i) = Z_i^{-1/2} e^{i\beta_i\phi(x_i)}, \quad Z_i = \left(\frac{\Lambda}{2\pi}\right)^{-\beta_i^2/(8\pi)} \quad (3.44)$$

und damit deren Erwartungswerte

$$\left\langle \prod_i \mathcal{V}_{\beta_i}(x_i) \right\rangle = \delta_{\sum \beta_i, 0} \prod_{\substack{i \neq j \\ x_i \neq x_j}} |x_i - x_j|^{\frac{\beta_i \beta_j}{4\pi}}. \quad (3.45)$$

Ein n -facher Erwartungswert faktorisiert also in 2-Punkt Korrelationsfunktionen der Vertexfunktionen, wobei nur global die Ladungsneutralität gewahrt werden muss.

Die obigen Betrachtungen und im speziellen die Ladungsneutralität (3.40) folgte durch den Limes $R \rightarrow \infty$, also durch die Betrachtung einer unendlichen Fläche. Wie wir von der Abbildung des Bades auf das Gauß-Modell wissen, tritt dort jedoch eine endliche Fläche mit $\tau \in [0, \hbar\beta]$ und $x \in [0, \omega_c]$ auf. Wir wollen nun also diesen Fall betrachten. Dabei werden wir eine spezielle Symmetrie des Gauß-Modells kennenlernen; die Symmetrie unter konformen Abbildungen.

Mithilfe der Vertex-Operatoren kann im Prinzip nun ein beliebiger Erwartungswert einer Funktion $M(\phi)$ berechnet werden, da die Vertexfunktionen die Vollständigkeitsrelation erfüllen. Wir können also analog zur Fouriertransformation $M(\phi)$ durch

$$M(\phi) = \int d\beta e^{i\beta\phi} \tilde{M}(\beta) \quad (3.46)$$

ausdrücken. Der Erwartungswert $\langle M(\phi) \rangle$ ergibt sich dann durch Erwartungswerte der Vertex-Operatoren. Ein solches Beispiel werden wir weiter unten in diesem Kapitel noch kennenlernen.

3.2.1 Transformation der Korrelationsfunktion unter konformen Abbildungen

Wir betrachten nun das Gauß-Modell auf einem Gebiet $\tau, x \in \mathcal{A}$. Da eine Umskalierung von x und τ nun auch die Integrationsgrenzen transformieren würde, macht es die Einführung der reellen Konstanten ρ und σ notwendig. Die Wirkung besitzt somit die allgemeine Form

$$S[\phi] = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{A}} d\tau dx \rho (\partial_\tau \phi)^2 + \sigma (\partial_x \phi)^2, \quad (3.47)$$

$$= \frac{\alpha}{2} \int_{\mathcal{A}} d\tau dx \frac{1}{v} (\partial_\tau \phi)^2 + v (\partial_x \phi)^2, \quad \alpha = \sqrt{\rho\sigma}, \quad v = \sqrt{\sigma/\rho}. \quad (3.48)$$

Bei einem Übergang zu den umskalierten Variablen $\tau \rightarrow \tau/\sqrt{v}$, $x \rightarrow \sqrt{v}x$ verschwindet der Faktor v gänzlich. Wir nutzen nun die Möglichkeit der komplexen Darstellung der 2-Dimensionen x und τ durch die Koordinaten z und \bar{z} , welche in der Literatur auch als Lichtkegelkoordinaten bezeichnet werden,

$$z = \tau + ix/v, \quad (3.49)$$

$$\bar{z} = \tau - ix/v. \quad (3.50)$$

Für die partiellen Ableitungen finden wir entsprechend³

$$\partial \equiv \partial_z = \frac{1}{2}(\partial_\tau - iv\partial_x), \quad (3.51)$$

$$\bar{\partial} \equiv \partial_{\bar{z}} = \frac{1}{2}(\partial_\tau + iv\partial_x), \quad (3.52)$$

womit sich aus der Kombination

$$4v^{-1}\partial\bar{\partial} = 4v^{-1}\bar{\partial}\partial = v^{-1}\partial_\tau^2 + v\partial_x^2 \quad (3.53)$$

gerade der entsprechende Integralkern zur Wirkung (3.48) und somit der dem Modell entsprechende deformierte Laplace-Operator ergibt. Das Integralmaß transformiert sich unter der Transformation (3.49) folgendermaßen,

$$dz \wedge d\bar{z} = (d\tau + idx/v) \wedge (d\tau - idx/v) = -\frac{2i}{v} (d\tau \wedge dx). \quad (3.54)$$

Für das invariante Flächenelement $d\Omega$ erhalten wir somit

$$d\Omega = d\tau \wedge dx = \frac{iv}{2} (dz \wedge d\bar{z}) = \sqrt{g} (dz \wedge d\bar{z}), \quad (3.55)$$

wobei g die Determinante des metrischen Tensors \mathbf{g} bezeichnet, welche in Kürze näher behandelt wird. Damit bekommen wir für das Gauß-Modell (3.47) die einfache Darstellung

$$S[\phi] = i\alpha \int_{\mathcal{A}} (dz \wedge d\bar{z}) (\partial\phi) (\bar{\partial}\phi) = -i\alpha \int_{\mathcal{A}} (dz \wedge d\bar{z}) \phi \bar{\partial}\partial\phi. \quad (3.56)$$

Für die klassische Bewegungsgleichung für das Feld $\phi(z, \bar{z})$ finden wir sofort die Bedingung (Integrabilitätsbedingung) $\partial\bar{\partial}\phi = 0$, sofern das Feld bzw. dessen Gradient am Rand verschwindet oder periodische Randbedingungen vorliegen, wie auch für die rechte Seite von Gleichung (3.56) vorausgesetzt wurde. Die Bedingung $\bar{\partial}\phi = 0$ ($\partial\phi = 0$) entspricht der Bedingung für holomorphe

³Der Fall $v = 1$ liefert die sogenannten Poincaré-Operatoren. Für eine holomorphe Funktion gilt $\bar{\partial}f(z) = 0$, während eine antiholomorphe Funktion $\partial f(\bar{z}) = 0$ erfüllt. Diese Bedingung rechtfertigt die Schreibweise einer holomorphen Funktion $f(z, \bar{z})$ in der Kurzform $f(z)$ und entsprechend $f(\bar{z})$ für eine antiholomorphe Funktion.

(antiholomorphe) Funktionen. Die allgemeine klassische Lösung setzt sich daher aus einem holomorphen Anteil $\phi(z)$ und einem antiholomorphen Anteil $\bar{\phi}(\bar{z})$ additiv zusammen.

Um die Abbildung (3.49) auf Lichtkegelkoordinaten besser zu verstehen, betrachten wir die Metrik g ,

$$g = d\tau \otimes d\tau + dx \otimes dx . \quad (3.57)$$

Indem wir Gleichung (3.49) benutzen, finden wir

$$d\tau = \frac{1}{2}(dz + d\bar{z}) , \quad dx = \frac{v}{2i}(dz - d\bar{z}) . \quad (3.58)$$

Dies liefert für die Metrik g den Ausdruck

$$g = \frac{1-v^2}{4}(dz \otimes dz + d\bar{z} \otimes d\bar{z}) + \frac{1+v^2}{4}(dz \otimes d\bar{z} + d\bar{z} \otimes dz) , \quad (3.59)$$

welche in Matrixnotation die folgende Form besitzt,

$$\{g_{ij}\} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-v^2 & 1+v^2 \\ 1+v^2 & 1-v^2 \end{pmatrix} = \mathbf{g} , \quad (3.60)$$

$$\{g^{ij}\} = \frac{1}{v^2} \begin{pmatrix} v^2-1 & v^2+1 \\ v^2+1 & v^2-1 \end{pmatrix} = \mathbf{g}^{-1} . \quad (3.61)$$

Für das Skalarprodukt $\langle z^1 | z^2 \rangle$ finden wir mit dieser Metrik den korrekten Ausdruck

$$\langle z^1 | z^2 \rangle = \frac{1-v^2}{4}(z^1 z^2 + \bar{z}^1 \bar{z}^2) + \frac{1+v^2}{4}(z^1 \bar{z}^2 + \bar{z}^1 z^2) , \quad (3.62)$$

$$= \tau_1 \tau_2 + x_1 x_2 . \quad (3.63)$$

Indem wir die Variable $z = |z|e^{i\varphi_z}$ durch die Amplitude $|z|$ und die Phase φ_z darstellen, erhalten wir für das obige Skalarprodukt

$$\langle z^1 | z^2 \rangle = |z^1| |z^2| \left[\frac{1+v^2}{2} \cos[\varphi_{z^1} - \varphi_{z^2}] + \frac{1-v^2}{2} \cos[\varphi_{z^1} + \varphi_{z^2}] \right] . \quad (3.64)$$

Für $v = 1$ erhalten wir sofort das gewohnte Skalarprodukt. Eine geometrische Interpretation der Lichtkegelkoordinatentransformation (3.49) findet man teilweise in [28, 29, 50, 54, 55].

Die Determinante von \mathbf{g} liefert einen konstanten Term

$$g \equiv \det[\mathbf{g}] = -v^2/4 , \quad \sqrt{g} = i \frac{v}{2} . \quad (3.65)$$

Somit erhält man für den Laplace-Operator in Lichtkegelkoordinaten aus der allgemeingültigen Form [55]

$$\Delta f = |g|^{-1/2} \partial_i (|g|^{1/2} g^{ij} \partial_j f) , \quad (3.66)$$

den folgenden Ausdruck

$$\Delta = \frac{v^2 - 1}{v^2} (\partial \partial + \bar{\partial} \bar{\partial}) + \frac{v^2 + 1}{v^2} (\partial \bar{\partial} + \bar{\partial} \partial) = \partial_\tau^2 + \partial_x^2 . \quad (3.67)$$

Das invariante Flächenelement $d\Omega$ schreibt sich somit in der aus Gleichung (3.55) bekannten Form

$$d\Omega = \sqrt{g} (dz \wedge d\bar{z}) . \quad (3.68)$$

Im weiteren benötigen wir die folgende zweidimensionale Darstellung einer Delta-Funktion,

$$\delta^2(x, y) \equiv \delta(x) \delta(y) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} -\frac{1}{\pi} \frac{\epsilon^2}{[x^2 + y^2 + \epsilon^2]^2} . \quad (3.69)$$

Die Richtigkeit dieser Darstellung sieht man sofort, indem man zu Polarkoordinaten übergeht,

$$\int dx dy \delta^2(x, y) f(x, y) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty dR \int_0^{2\pi} d\phi f(R, \phi) \frac{1}{2\pi} \partial_R \frac{\epsilon^2}{R^2 + \epsilon^2} . \quad (3.70)$$

Die dabei auftretende Distribution liefert

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\epsilon^2}{R^2 + \epsilon^2} = \begin{cases} 0 & R \neq 0 \\ 1 & R = 0 \end{cases} . \quad (3.71)$$

Somit erhalten wir für Gleichung (3.70) nach partieller Integration

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi f(R=0, \phi) = f(R=0) , \quad (3.72)$$

da $f(R=0, \phi)$ von ϕ nicht abhängt, erhalten wir für Gleichung (3.70) sofort das gewünschte Ergebnis $f(R=0) = f(x=0, y=0)$.

Mit diesem Resultat erhalten wir direkt die entsprechende Deltafunktion in der komplexen Ebene durch Anwendung der Relation $(z - w)(\bar{z} - \bar{w}) = \text{Re}[z - w]^2 + \text{Im}[z - w]^2$,

$$\delta^2(\text{Re}[z - w], \text{Im}[z - w]) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} -\frac{1}{\pi} \frac{\epsilon^2}{[(z - w)(\bar{z} - \bar{w}) + \epsilon^2]^2} . \quad (3.73)$$

Aus der Gleichung (3.55) erhalten wir für die Transformation (3.49)

$$\delta(z - w)\delta(\bar{z} - \bar{w}) = g^{-1/2} \delta^2(\operatorname{Re}[z - w], \operatorname{Im}[z - w]) , \quad (3.74)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{v}{2\pi i} \frac{\epsilon^2}{[(z - w)(\bar{z} - \bar{w}) + \epsilon^2]^2} . \quad (3.75)$$

Dies garantiert die notwendige Transformationseigenschaft

$$\int (dz \wedge d\bar{z}) f(z, \bar{z}) \delta(z)\delta(\bar{z}) = \int (d\tau \wedge dx) f(\tau, x) \delta(\tau)\delta(x) . \quad (3.76)$$

Die bekannte Cauchy-Integralformel für holomorphe Funktionen $f(z)$ auf dem Gebiet $z \in \Omega$ lautet [54]

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial\Omega} d\xi \frac{f(\xi)}{\xi - z} . \quad (3.77)$$

Unter Verwendung der Stokes-Green Beziehung

$$\int_{\partial\Omega} \omega = \int_{\Omega} d\omega \quad (3.78)$$

in der Notation der Differentialgeometrie liefert dies mit der 1-Form

$$\omega = \frac{1}{2\pi i} \frac{f(\xi)}{\xi - z} d\xi , \quad (3.79)$$

und der dazugehörigen Differentialform 2. Grades (totales Differenzial)

$$d\omega = \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} \left[\frac{f(\xi)}{\xi - z} \right] (d\xi \wedge d\bar{\xi}) . \quad (3.80)$$

für eine holomorphe Funktion⁴ $f(\xi)$ die Darstellung

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial\Omega} d\xi \frac{f(\xi)}{\xi - z} = \int_{\Omega} (d\xi \wedge d\bar{\xi}) f(\xi) \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} \frac{1}{\xi - z} , \quad (3.81)$$

und damit eine weitere Darstellung einer zweidimensionalen Delta-Funktion in der Form

$$\delta^2(z - w) = \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \frac{1}{z - w} = \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{\bar{z} - \bar{w}} . \quad (3.82)$$

Man sieht sofort ein, dass für $z \neq w$ Gleichung (3.82) verschwindet, da $1/(z - w)$ für $z \neq w$ eine holomorphe Funktion darstellt. Betrachtet man Gleichung (3.82) als den Grenzfall

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z} \frac{(z - w)}{(z - w)(\bar{z} - \bar{w}) + \epsilon^2} , \quad (3.83)$$

⁴ $\partial_{\bar{\xi}} f(\xi) = 0$.

so erhält man wieder die aus Gleichung (3.75) bekannte Darstellung mit der Parameterwahl $v = 1$.

Gleichung (3.77) können wir nun auf nichtholomorphe Funktionen $h(z)$ verallgemeinern. Eingesetzt in Gleichung (3.78) erhalten wir unter Anwendung von Gleichung (3.82) den Ausdruck

$$h(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial\Omega} d\xi \frac{h(\xi)}{\xi - z} - \frac{1}{2\pi i} \int_{\Omega} (d\xi \wedge d\bar{\xi}) \frac{1}{\xi - z} \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} h(\xi), \quad (3.84)$$

welcher eine Verallgemeinerung der Cauchy-Integralformel (3.77) darstellt und für eine holomorphe Funktion ($\bar{\partial}f(\xi) = 0$) auf dem Gebiet Ω diese sofort reproduziert, da in diesem Fall der Term $\bar{\partial}h(\xi)$ verschwindet.

Wir berechnen nun noch einmal die Greenfunktion (3.33) in den Lichtkegelkoordinaten. Die Definitionsgleichung für die gesuchte Greenfunktion G lautet in den ursprünglichen Koordinaten x und τ folgendermaßen,

$$(v^{-1}\partial_{\tau}^2 + v\partial_x^2) G(x, \tau|x', \tau') = \delta(x - x')\delta(\tau - \tau'). \quad (3.85)$$

Integriert man über das Gebiet \mathcal{A} , wobei der Punkt (x', τ') in \mathcal{A} liegen soll, so erhält man auf der rechten Seite sofort eine Eins. Diese Eigenschaft muss nun auch beim Übergang zu neuen Koordinaten erhalten bleiben. Für die Lichtkegelkoordinaten z und \bar{z} erhalten wir daher die zu Gleichung (3.85) äquivalente Bestimmungsgleichung unter Anwendung der Transformation (3.53) und (3.55),

$$\int_{\mathcal{A}} d\Omega \, 4v^{-1} \partial_z \partial_{\bar{z}} G(z, \bar{z}|w, \bar{w}) = 1, \quad (3.86)$$

beziehungsweise lokal in der Form

$$\sqrt{g} 4v^{-1} \partial_z \partial_{\bar{z}} G(z, \bar{z}|w, \bar{w}) = \delta(z - w)\delta(\bar{z} - \bar{w}). \quad (3.87)$$

Die Greenfunktion ist also mit Ausnahme der Stelle $z = w, \bar{z} = \bar{w}$ eine harmonische Funktion u mit $\partial_z \partial_{\bar{z}} u = 0$. Diese Bedingung wird von allen harmonischen/antiharmonischen Funktionen erfüllt. Mit der Darstellung (3.74) finden wir nach der ersten Integration über \bar{z} ,

$$\partial_z G(z, \bar{z}|w, \bar{w}) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{v}{4\pi} \frac{1}{(\bar{z} - \bar{w})} \frac{\epsilon^2}{(z - w)(\bar{z} - \bar{w}) + \epsilon^2}, \quad (3.88)$$

wobei wir eine beliebige holomorphe Funktion $f(z)$ hinzuaddieren können. Die Integration über z liefert dann das aus Gleichung (3.33) bekannte Resultat

$$G(z, \bar{z}|w, \bar{w}) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{v}{4\pi} \ln \left[\frac{R^2}{(z - w)(\bar{z} - \bar{w}) + \epsilon^2} \right] = \frac{v}{2\pi} \ln \left| \frac{R}{z - w} \right|, \quad (3.89)$$

wobei die Integrationskonstanten wieder so gewählt wurden, dass die Greenfunktion auf $|z - w| = |R|$ verschwindet. Da es aufgrund der Mittelwert-eigenschaft harmonischer Funktionen keine holomorphe bzw. antiholomorphe Funktion bzw. harmonische Funktion⁵ ausser $f \equiv 0$ gibt, welche auf $|z - w| = |R|$ verschwindet, gibt es hier keine weiteren Freiheitsgrade und die Randbedingung fixiert die Greenfunktion eindeutig. Eine Greenfunktion, welche auf $|z| = R$ verschwindet, werden wir in Kürze daraus ableiten.

Wir betrachten nun die Greenfunktion zu (3.47) auf einer beliebigen beschränkten Fläche \mathcal{A} [36, 54, 56]. Finden wir eine konforme Abbildung $w \rightarrow z(w)$ des Gebiets $w \in \mathcal{A}$ auf den Einheitskreis in der komplexen Ebene, wobei ein beliebiger Aufpunkt z' in den Ursprung abgebildet wird, und der Rand von \mathcal{A} auf den Rand des Einheitskreises abgebildet wird, so ist die Fundamentallösung $G_{\mathcal{A}}(w|w')$ einfach gegeben durch [57, 58]

$$G_{\mathcal{A}}(w|w') = -\frac{1}{2\pi} \ln |z(w)| = -\frac{1}{2\pi} \operatorname{Re} \ln [z(w)]. \quad (3.90)$$

Das Problem besteht nun darin, eine solche konforme Abbildung zu finden. Der erste und im Allgemeinen schwierige Teil besteht darin, das Gebiet \mathcal{A} auf den Einheitskreis abzubilden. Dass dies prinzipiell möglich ist, ist die Aussage dies berühmten Riemannsches Abbildungssatzes [54]. In der Regel wendet man sukzessive bekannte konforme Abbildungen an, welche aufgrund der Gruppeneigenschaft wieder einer konformen Abbildung entspricht. Das verbleibende Problem der Abbildung eines beliebigen Punktes $w' \in \mathcal{A}$ ist wiederum trivial durch eine Möbius-Transformation der Form

$$z(w) = a \frac{w - w'}{\overline{w'}w - 1}, \quad |a| = 1, \quad (3.91)$$

zu erreichen. Diese Transformation bildet den Einheitskreis auf sich selbst ab, wobei der Punkt w' in den Ursprung $w = 0$ abgebildet wird, womit Gleichung (3.91) die gesuchte konforme Abbildung darstellt. Der Faktor $a = \exp[i\phi]$ mit $|a| = 1$ liefert eine zusätzliche Rotation des Einheitskreises um den Winkel ϕ , was den Einheitskreis natürlich invariant lässt. Anders ausgedrückt ist dieser Limes für Modelle gerechtfertigt, bei welchen der Rand des Systems das eigentliche Verhalten des Bulk-Modells nicht beeinflusst.

Wir betrachten dazu nun zuerst das Beispiel eines Kreises mit Radius R , wobei nun ein beliebiger Aufpunkt z' innerhalb des Einheitskreises zugelassen sein soll. Die Abbildung des Kreises mit Radius R auf den Einheitskreis erfolgt trivialerweise durch z/R . Mit Gleichung (3.91) erhalten wir die Greenfunktion

$$G_R(z|z') = -\frac{1}{2\pi} \ln \left| \frac{R(z - z')}{\overline{z'}z - R^2} \right|. \quad (3.92)$$

⁵ Für eine harmonische Funktion f gilt $\Delta f = 0$.

Für $|z| = R$ verschwindet nun $G_R(z|z')$ in der Tat, wie man leicht für $z = R \exp[i \arg z]$ nachrechnet. Im Grenzfall $R \rightarrow \infty$ findet man für $|z\bar{z}'| \ll R$ aus der letzten Gleichung wieder das Resultat (3.89), was daran liegt, dass in diesem Grenzfall $R \rightarrow \infty$ der Unterschied zwischen $|z| = R$ bzw. $|z - z'| = R$ für den Rand des Gebiets irrelevant wird.

Wir betrachten nun die Abbildung eines Streifens der Breite L auf einen Kreis mit Radius R . Dies erreichen wir durch 3 bekannte konforme Abbildungen

1. Abbildung des Streifens $0 \leq \text{Im}[w] \leq L$ auf die Halbebene $\text{Im}[z] \geq 0$ mittels der Abbildung $z \rightarrow e^{\pi w/L}$.
2. Abbildung der Halbebene auf den Einheitskreis mittels $z \rightarrow \frac{w-i}{w+i}$.
3. Abbildung des Einheitskreises auf sich selbst und Abbildung des Punktes w' in den Ursprung mittels $z \rightarrow \frac{w-w'}{w\bar{w}'-1}$.

Während die erste Abbildung trivial ist, erkennt man das Verhalten der zweiten Abbildung nicht sofort. Geometrisch sieht man jedoch leicht ein, dass $|w + w'| > |w - w'|$ gilt. Mittels einiger Umformungen findet man für den Betrag des Bildes der zweiten Transformation

$$\left| \frac{w-i}{w+i} \right| = \sqrt{1 - \frac{4 \text{Im}[w]}{\text{Re}^2[w] + (1 + \text{Im}[w])^2}}. \quad (3.93)$$

Für $\text{Im}[z] > 0$ ist dieser Betrag immer kleiner als 1, während $\text{Im}[z] = 0$ auf den Rand des Einheitskreises mit $\left| \frac{w-i}{w+i} \right| = 1$ abbildet, womit wir die gewünschte Eigenschaft gezeigt haben.

Die Verknüpfung der Transformation 1 und 2 liefert

$$f(w) = \frac{e^{\pi w/L} - i}{e^{\pi w/L} + i} = \tanh \left[\frac{\pi}{2} \left(\frac{w}{L} - \frac{i}{2} \right) \right]. \quad (3.94)$$

Mittels Abbildung 3 erhalten wir die folgende konforme Abbildung

$$F(w, w') = \frac{f(w) - f(w')}{f(w)\overline{f(w')} - 1}, \quad (3.95)$$

und daraus schlußendlich nach algebraischer Umformung die folgende Darstellung für den Betrag dieser Transformation

$$|F(w, w')|^2 = \frac{\sinh \left[\frac{\pi}{L} \left(\frac{w-w'}{2} \right) \right] \sinh \left[\frac{\pi}{L} \left(\frac{\bar{w}-\bar{w}'}{2} \right) \right]}{\sinh \left[\frac{\pi}{L} \left(\frac{w-\bar{w}'}{2} \right) \right] \sinh \left[\frac{\pi}{L} \left(\frac{\bar{w}-w'}{2} \right) \right]}. \quad (3.96)$$

konf. Abbildung des Streifens $0 \leq \text{Im}[z] \leq 3$ auf den EHK, $z' = -1 + 0.8i$

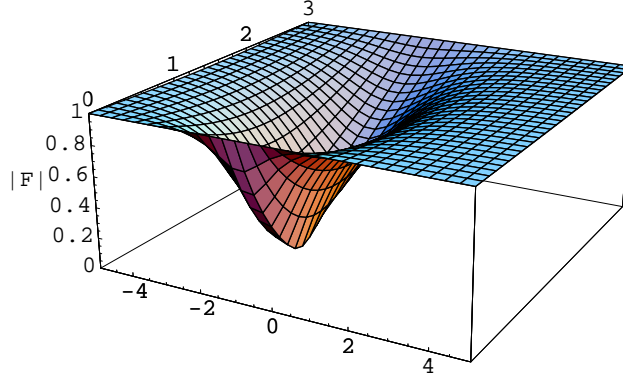


Abbildung 3.3: Dieser Plot zeigt die Funktion $|F(w, w')|$ aus Gleichung (3.96). Der Bildbereich dieser Funktion liegt zwischen 0 und 1, was einer Abbildung des Streifens $0 \leq \text{Im}[w] \leq 3$ auf den Einheitskreis entspricht. Der Aufpunkt liegt bei $w' = -1 + 0.8i$

Abbildung 3.3 zeigt die Funktion $|F(w, w')|$ der letzten Gleichung auf dem Definitionsbereich $0 \leq \text{Im}[w] \leq 3$ mit einem Aufpunkt $w' = -1 + 0.8i$. Die Fundamentallösung des Gauß-Modells auf dem Streifen $0 \leq \text{Im}[w] \leq L$ besitzt somit die folgende Form

$$G_{\text{strip}}(w|w') = -\frac{1}{4\pi} \log \left[\frac{\sinh \left[\frac{\pi}{L} \left(\frac{w-w'}{2} \right) \right] \sinh \left[\frac{\pi}{L} \left(\frac{\bar{w}-\bar{w}'}{2} \right) \right]}{\sinh \left[\frac{\pi}{L} \left(\frac{w-\bar{w}'}{2} \right) \right] \sinh \left[\frac{\pi}{L} \left(\frac{\bar{w}-w'}{2} \right) \right]} \right]. \quad (3.97)$$

Da aufgrund des Definitionsbereichs $w = \bar{w}'$ niemals erfüllt sein kann, bleibt der Nenner immer größer Null. Dies wiederum bedeutet, dass der Anteil

$$\tilde{G}(w|w') = \frac{1}{4\pi} \log \left[\sinh \left[\frac{\pi}{L} \left(\frac{w-\bar{w}'}{2} \right) \right] \sinh \left[\frac{\pi}{L} \left(\frac{\bar{w}-w'}{2} \right) \right] \right]. \quad (3.98)$$

der Greenfunktion eine homogene Lösung mit $\partial\bar{\partial}\tilde{G} = 0$ auf dem gesamten Definitionsbereich darstellt, welche lediglich die Randbedingung der Fundamentallösung $G_{\text{strip}}|_{\text{Rand}} = 0$ sicherstellt. Die primäre Eigenschaft steckt daher in der Form

$$G_{\text{prim}}(w|w') = -\frac{1}{2\pi} \log \left| \sinh \left[\frac{\pi}{L} \left(\frac{w-w'}{2} \right) \right] \right|, \quad (3.99)$$

welche uns im Folgenden noch mehrfach begegnen wird. Im Limes $L \rightarrow \infty$ finden wir sofort wieder den Ausdruck (3.89) mit $R = 2L/\pi \rightarrow \infty$.

In Literatur [36] wird auch explizit der Fall der konformen Abbildung eines Rechtecks auf den Einheitskreis mit Hilfe der Weierstraßschen Sigma-Funktion besprochen. Diese Abbildung ist nichttrivial, da der Rand des

Rechtecks auf den Rand des Einheitskreises abgebildet werden soll. Die konforme Abbildung eines Rechtecks mit den Seitenlängen ω_1 und $i\omega_2$ auf den Einheitskreis ist mittels elliptischer Funktionen möglich. In Literatur [36] wird die folgende Abbildung eines Rechtecks mit $0 \leq \text{Re}[z, w] \leq \omega_1$ bzw. $0 \leq \text{Im}[z, w] \leq \omega_2$ angegeben,

$$F(w, w') = \frac{\sigma(w - w'|\omega_1, \omega_2) \sigma(w + w'|\omega_1, \omega_2)}{\sigma(w - \bar{w}'|\omega_1, \omega_2) \sigma(w + \bar{w}'|\omega_1, \omega_2)}, \quad (3.100)$$

wobei es sich bei der Funktion $\sigma(z|\omega_1, \omega_2)$ um die quasi-periodische Weierstraßsche Sigma-Funktion mit der Produktdarstellung [51]

$$\sigma(z|\omega_1, \omega_2) = z \prod_{\{m,n\}'} \left(1 - \frac{z}{\Omega_{m,n}}\right) \exp\left[\frac{z}{\Omega_{m,n}} + \frac{z^2}{2\Omega_{m,n}^2}\right], \quad (3.101)$$

handelt und dabei der Faktor $m = 0, n = 0$ des Produkts ausgelassen wird und den Frequenzen $\Omega_{m,n}$ entsprechend

$$\Omega_{m,n} = 2m\omega_1 + 2n\omega_2. \quad (3.102)$$

Für die Greenfunktion auf dem Rechteck erhalten wir dadurch den Ausdruck

$$G_{\text{box}}(w|w') = -\frac{1}{2\pi} \log \left| \frac{\sigma(w - w'|\omega_1, \omega_2) \sigma(w + w'|\omega_1, \omega_2)}{\sigma(w - \bar{w}'|\omega_1, \omega_2) \sigma(w + \bar{w}'|\omega_1, \omega_2)} \right|. \quad (3.103)$$

Im Grenzfall $\omega_2 \rightarrow i\infty$ vereinfacht sich die Darstellung (3.101) zu

$$\lim_{\omega_2 \rightarrow i\infty} \sigma(z|\omega_1, \omega_2) = \frac{2\omega_1}{\pi} \exp\left[\frac{1}{6}\left(\frac{\pi z}{2\omega_1}\right)^2\right] \sin\left[\frac{\pi z}{2\omega_1}\right], \quad (3.104)$$

und $F(w, w')$ entspricht nun einer Abbildung eines Halb-Streifens mit $\text{Re}[z] \geq 0, 0 \leq \text{Im}[z] \leq \omega_1$ auf den Einheitskreis.

3.3 Das (Boundary-) Sine-Gordon Modell

Das Sine-Gordon Modell erweitert das Gauß-Modell (3.27) um den zusätzlichen nichtlinearen Term $\alpha_{\text{SG}} \cos[\phi(x)]$ und besitzt die Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z_{\text{SG}} &= \oint \mathcal{D}\phi \exp\left[-\frac{1}{2} \int d^2x (\partial_\mu \phi(x))^2 + \alpha_{\text{SG}} \cos[\phi(x)]\right] \\ &= \left\langle -\frac{1}{2} \int d^2x \exp\left[\alpha_{\text{SG}} \cos[\beta\phi(x)]\right] \right\rangle_{\text{Gauss}}. \end{aligned} \quad (3.105)$$

Indem wir die Exponentialfunktion als Reihenentwicklung schreiben, erhalten wir

$$Z_{\text{SG}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha_{\text{SG}})^n}{2^n n!} \left\langle \left[\int d^2x e^{i\beta\phi(x)} + \int d^2y e^{-i\beta\phi(y)} \right]^n \right\rangle_{\text{Gauss}}, \quad (3.106)$$

Aufgrund der Superauswahlregel aus Gleichung (3.45) tragen nur neutrale Ladungskonfigurationen, also Terme mit gleicher Anzahl von Faktoren $e^{i\beta\phi}$ und $e^{-i\beta\phi}$ bei. Insbesondere ist dies nur für gerade n erfüllt. Für den obigen Erwartungswert und damit der Zustandssumme (3.105) erhalten wir

$$\begin{aligned} & \left\langle \left[\int d^2x e^{i\beta\phi(x)} + \int d^2y e^{-i\beta\phi(y)} \right]^{2n} \right\rangle_{\text{Gauss}} \\ &= \left\langle \frac{(2n)!}{(n!)^2} \prod_{i=1}^n \int d^2x_i d^2y_i e^{i\beta\phi(x_i)} e^{-i\beta\phi(y_i)} \right\rangle_{\text{Gauss}}, \end{aligned} \quad (3.107)$$

durch die Kombination von jeweils n gleichen Ladungen. Der Vorfaktor entspricht dabei dem Binomialkoeffizienten $\binom{2n}{n}$, also der Anzahl der neutralen Kombinationsmöglichkeiten. Je nach Ladungskombination erhalten wir so Faktoren in der Form (3.45) mit Exponenten $+\beta^2/(8\pi)$ bei gleicher Ladung und $-\beta^2/(8\pi)$ bei alternierender Ladung, womit nun die Zustandssumme (3.105) die folgende Form annimmt,

$$Z_{\text{SG}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_{\text{SG}}^{2n}}{2^{2n} (n!)^2} \prod_{i=1}^n \int d^2x_i d^2y_i \left[\frac{\prod_{i<j} |x_i - x_j| |y_i - y_j|}{\prod_{i,j} |x_i - y_j|} \right]^{\frac{\beta^2}{8\pi}}. \quad (3.108)$$

Wenn wir nun die Ladungen auf dem Kreis mit Radius $|x| = U$ plazieren, geht der Abstand zweier Ladungen $|x_i - y_i|$ in

$$|x_i - y_i| \rightarrow 2U \sin \left[\frac{\Delta\phi}{2} \right] \quad (3.109)$$

über, wobei $\Delta\phi$ dem Winkel zwischen den beiden Ladungen auf dem Kreis mit Radius U entspricht, und wir bekommen die folgende Zustandssumme, welche weiter unten benötigt wird,

$$\begin{aligned} Z|_{|z|=R} = Z_{\text{BSG}}^{\odot} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_{\text{SG}}^{2n}}{2^{2n} (n!)^2} U^{2n} \prod_{i=1}^n \int_0^{2\pi} du_i du'_i \\ &\times \left[\frac{\prod_{i<j} \left| 2U \sin \left[\frac{u_i - u_j}{2} \right] \right| \left| 2U \sin \left[\frac{u'_i - u'_j}{2} \right] \right|}{\prod_{i,j} \left| 2U \sin \left[\frac{u_i - u'_j}{2} \right] \right|} \right]^{\frac{\beta^2}{8\pi}}. \end{aligned} \quad (3.110)$$

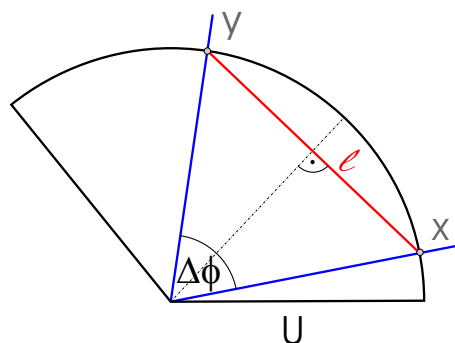


Abbildung 3.4: Die Ladungen x und y auf dem Kreis mit Radius U und Winkel $\Delta\phi$ liegen im Abstand $\ell/2 = U \sin[\Delta\phi/2]$ auseinander.

Die obige Einschränkung, dass Ladungen nur auf dem Kreis $|z| = R$ liegen, entspricht dem Übergang zu einem Boundary Sine-Gordon Modell; der nicht-lineare Term ist dabei auf den Bereich $|z| = R$ beschränkt. Formal lässt sich dies folgendermaßen schreiben,

$$Z_{\text{BSG}}^{\circ} = \oint \mathcal{D}\phi \exp \left[-\frac{1}{2} \int d^2x (\partial_{\mu}\phi(x))^2 + \delta(x^2 - R) \alpha_{\text{SG}} \cos[\phi(x)] \right]. \quad (3.111)$$

In Abschnitt 3.5 werden wir dieses Modell näher betrachten.

3.4 Abbildung des BSG-Modells auf ein dissipatives TB-Modell

In den Veröffentlichungen [45, 46, 47] wurde die Leitfähigkeit einer gestörten Luttinger-Flüssigkeit durch Fendley, Lesage und Saleur betrachtet. Wir werden nun zeigen, dass das dort verwendete Modell einer genauen Abbildung auf das Vielmuldenmodell im Tight-Binding Limes entspricht.

Als Ausgangspunkt wurde in den obigen Arbeiten die Zustandssumme eines Coulomb-Gases berechnet.

$$Z = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{x^{2m}}{(m!)^2} \prod_{s=1}^m \left[\oint_{|z_s|=1} \frac{dz_s}{2\pi i z_s} \frac{dz'_s}{2\pi i z'_s} \right] \prod_{i=1}^m \left(\frac{z_i}{z'_i} \right)^p \times \left[\frac{\prod_{i<j}^m (z_i - z_j)(\bar{z}_i - \bar{z}_j) \prod_{k<l}^m (z'_k - z'_l)(\bar{z}'_k - \bar{z}'_l)}{\prod_{i,k}^m (1 - z_i \bar{z}'_k)(1 - \bar{z}_i z'_k)} \right]^K. \quad (3.112)$$

Wir erkennen hier sofort die Greenfunktion des Gauß-Modells auf dem Einheitskreis aus Gleichung (3.92) mit $R = 1$, wobei hier die konforme Abbildung

des Einheitskreises auf sich selbst angewandt wird, indem $z_i = z_j$ auf den Ursprung entsprechend Transformation 3 auf Seite 185 bzw. Gleichung (3.91) abgebildet wird. Mit einer Variablentransformation auf reelle Koordinaten σ_s über die Substitution $z_s = \exp[i2\pi/(\hbar\beta)\sigma_s]$ gelangen wir zu der Darstellung

$$Z = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{x^{2m}}{(m!)^2} \prod_{s=1}^m \left[\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\sigma_s}{\hbar\beta} \frac{d\sigma'_s}{\hbar\beta} \right] \prod_{i=1}^m \exp \left[ip \frac{2\pi}{\hbar\beta} (\sigma_i - \sigma'_i) \right] \quad (3.113)$$

$$\times \left[\frac{\prod_{i<j}^m \left| 2 \sin \left[\frac{\pi}{\hbar\beta} (\sigma_i - \sigma_j) \right] \right| \prod_{k<l}^m \left| 2 \sin \left[\frac{\pi}{\hbar\beta} (\sigma'_k - \sigma'_l) \right] \right|}{\prod_{i,k}^m \left| 2 \sin \left[\frac{\pi}{\hbar\beta} (\sigma_i - \sigma'_k) \right] \right|} \right]^{2K}.$$

Dies sieht man einfach unter Verwendung der Identität

$$2 - e^{ix} - e^{-ix} = 4 \sin^2[x/2] \quad (3.114)$$

und der Eigenschaft von $z\bar{z} = 1$ wegen $|z| = 1$. Da wir die Potenz 2 vom Sinus herausgezogen haben, geht nun der Sinus als Betragsfunktion ein. Nur für $K \in \mathbb{Z}$ ist dies nicht notwendig. Wir bemerken, dass diese Zustandssumme identisch mit der Zustandssumme (3.110) des Sine-Gordon Modells mit der Einschränkung der euklidischen Fläche auf einen Kreis mit Radius R ist. Dieser Ausdruck kann nun durch einfache Kombinatorik mit der folgenden aus Gleichung (2.258) bekannten Zustandssumme des Schmid-Modells im Tight-Binding Limes mit Bias identifiziert werden,

$$Z_{\text{STB}} = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\Delta}{2} \right)^{2m} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{2m} \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \sum_{\{\xi_i\}} \exp \left[-\lambda \sum_{j=1}^{2m} \xi_j \tau_j \right]$$

$$\times \exp \left[\sum_{j>i}^{2m} \xi_i \xi_j 2K \ln \left\{ \frac{\hbar\beta\omega_c}{2} \sin \left[\frac{\pi}{\hbar\beta} (\tau_i - \tau_j) \right] \right\} \right]. \quad (3.115)$$

Wir bemerken, dass im letzten Term der Gleichung für Z_{STB} im Exponenten das Produkt $\xi_i \xi_j$ nur ein Vorzeichen ± 1 produziert, so dass wir diese Exponentialfunktion auch durch die Faktoren

$$\left| \frac{\hbar\beta\omega_c}{2} \sin \left[\frac{\pi}{\hbar\beta} (\tau_i - \tau_j) \right] \right|^{\pm 2K} \quad (3.116)$$

darstellen können.

Um dieses Vorzeichen besser kontrollieren zu können, führen wir die ungeordnete Integration über die Imaginärzeiten $\{\sigma_i\}$ und $\{\sigma'_i\}$ als

$$\frac{1}{(m!)^2} \int_0^{\hbar\beta} d\sigma_1 \cdots d\sigma_m \int_0^{\hbar\beta} d\sigma'_1 \cdots d\sigma'_m \quad (3.117)$$

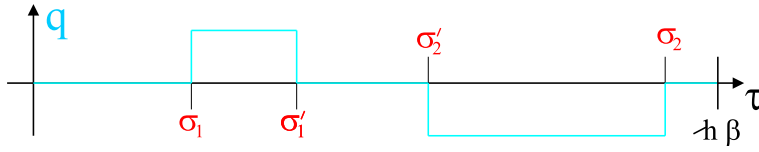


Abbildung 3.5: Die Zeiten σ_1 und σ_2 gehören zur Ladung \oplus , während die Zeiten σ'_1 und σ'_2 zur Ladung \ominus gehören.

ein und identifizieren die Zeiten $\{\sigma_i\}$ mit den Sprungzeiten für das Sprunggewicht $\xi = +1$, während die Zeiten $\{\sigma'_i\}$ für Sprungzeiten des Sprunggewichtes $\xi = -1$ stehen. Bild 3.5 zeigt dies für den Fall $n = 2$ exemplarisch. Die Randbedingung $\sum_m \xi_m = 0$ wird damit automatisch erfüllt. Der Faktor $\xi_i \xi_j$ hängt nun davon ab, welche Zeiten in den Exponenten eingehen. Die Darstellung 3.6 verdeutlicht den Sachverhalt anhand eines Beispiels für die Ordnung $m = 2$. Die linke Tabelle zeigt die möglichen Pfadkombinationen bzw. Pfadgewichte $\{\xi_i\}$ für die Zeitordnung $\tau_1 \leq \dots \leq \tau_4$. Die rechte Tabelle zeigt nun für die erste Zeile $(++--)$ in der linken Tabelle die entsprechenden möglichen Konfigurationen für das nicht zeitgeordnete Integral (3.117). Im ungeordneten Fall gibt es also $(m!)^2$ äquivalente Kombinationen, was durch den entsprechenden Vorfaktor in Gleichung (3.117) berücksichtigt wurde. Mit diesen Vorüberlegungen können wir nun Gleichung (3.115) in folgender Form darstellen,

$$Z_{\text{STB}} = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{2m} \frac{1}{(m!)^2} \int_0^{\hbar\beta} d\sigma_1 \dots d\sigma_m \int_0^{\hbar\beta} d\sigma'_1 \dots d\sigma'_m \quad (3.118)$$

$$\times \left| \frac{\hbar\beta\omega_c}{4} \right|^{-2mK} \prod_{i=1}^m \exp \left[-\lambda(\sigma_i - \sigma'_i) \right]$$

τ_1	\leq	τ_2	\leq	τ_3	\leq	τ_4	\implies	Imaginärzeitordnung \longrightarrow					
+		+		-		-	\implies	+	+	-	-		
+		-		+		-		$\sigma_1 \leq \sigma_2 \leq \sigma'_1 \leq \sigma'_2$					
+		-		-		+		$\sigma_2 \leq \sigma_1 \leq \sigma'_1 \leq \sigma'_2$					
-		+		+		-		$\sigma_1 \leq \sigma_2 \leq \sigma'_2 \leq \sigma'_1$					
-		+		-		+		$\sigma_2 \leq \sigma_1 \leq \sigma'_2 \leq \sigma'_1$					

Abbildung 3.6: Die linke Tabelle zeigt die möglichen Sprunggewichte in Ordnung $m = 2$ im zeitgeordneten Fall. Die rechte Tabelle zeigt die $(m!)^2 = 4$ verschiedenen Kombinationen im ungeordneten Fall exemplarisch für die linke Konfiguration $(++--)$.

$$\times \left[\frac{\prod_{i \leq j}^m \left| 2 \sin \left[\frac{\pi}{\hbar\beta} (\sigma_i - \sigma_j) \right] \right| \prod_{k \leq l}^m \left| 2 \sin \left[\frac{\pi}{\hbar\beta} (\sigma'_k - \sigma'_l) \right] \right|}{\prod_{i,j}^m \left| 2 \sin \left[\frac{\pi}{\hbar\beta} (\sigma_i - \sigma'_j) \right] \right|} \right]^{2K} .$$

Indem wir die folgenden Relationen verwenden

$$p = p(\lambda) = i\lambda \frac{2\pi}{\hbar\beta}, \quad (3.119)$$

$$x = x(\Delta) = \frac{\Delta}{2} \hbar\beta \left(\frac{4}{\hbar\beta\omega_c} \right)^K, \quad (3.120)$$

können wir die Gleichung (3.113) auf den Imaginärzeit Ausdruck (3.118) abbilden.

3.5 Die Ausreduktion der Bulk Freiheitsgrade des Gauß-Modells mit Randterm

In diesem Abschnitt werden wir zeigen, dass das sogenannte Boundary Sine-Gordon Modell (BSGM) äquivalent zum Schmid-Modell (SM) im ohmschen Skalen-Limes ist, nachdem die Bulk-Freiheitsgrade der beiden Modelle ausintegriert wurden. Ganz allgemein werden wir diese Äquivalenz für beliebige dissipative eindimensionale Systeme der Form $S[q] = (M/2) \dot{q}^2 + U(q)$ mit einem beliebigen Potenzial $U(q)$ und einem kinetischen Term mit der Masse M zeigen, wobei $S[q]$ der Rolle des Randtermes S_g im Folgenden entspricht und das ohmsche Bad durch das Gauß-Modell repräsentiert wird.

Die Zustandssumme eines solchen generischen Modells besitze die folgende Form,

$$\mathcal{Z}_g = \int \mathcal{D}\Phi(x, \tau) \exp \left[- S_g[\Phi(x, \tau)]/\hbar \right], \quad (3.121)$$

$$S_g[\Phi] = S_0[\Phi(x, \tau)] + S_b[\Phi(x=0, \tau)]. \quad (3.122)$$

Für die Wirkung $S_0[\Phi]$ des Gauß-Modells schreiben wir

$$S_0[\Phi] = \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_{-L/2}^{L/2} dx \rho (\partial_\tau \Phi)^2 + \sigma (\partial_x \Phi)^2. \quad (3.123)$$

Die Faktoren ρ und σ können dabei als Massendichte und Federkonstante eines Strings der Länge L betrachtet werden. Den Randterm $S_b[\Phi(x=0, \tau)]$ werden wir im Moment noch nicht näher spezifizieren, ausser dass er lediglich an der Stelle $x=0$ beiträgt und für $x \neq 0$ identisch verschwindet.

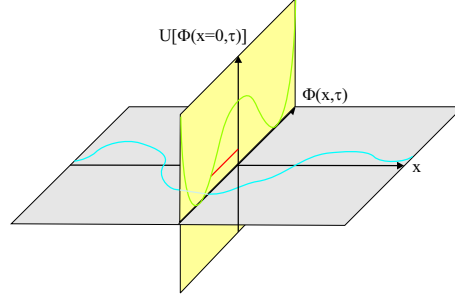


Abbildung 3.7: Das Gauß-Modell entspricht einem String $\Phi(x, \tau)$, welcher an der Stelle $x = 0$ an das System mit dem Potenzial $U[\Phi(x = 0, \tau)]$ koppelt. Somit kann das System an der Stelle $x = 0$ Energie mit dem String austauschen, d.h. Dissipation wird dadurch ermöglicht.

Die effektive Wirkung des obigen Modells (3.121) erhalten wir durch Ausintegration der Bulk-Freiheitsgrade für das Feld $\Phi(x, \tau)$ im Bereich $x \neq 0$. Da hier der Randterm $S_b[\Phi(x = 0, \tau)]$ der generischen Wirkung $S_g[\Phi(x, \tau)]$ identisch Null ist, kann die Integration als gaußsches Integral durchgeführt werden. Dies betrachten wir nun etwas genauer; mit $\Theta(\tau) \equiv \Phi(x = 0, \tau)$ schreiben wir

$$\mathcal{Z}_g = \int \mathcal{D}\Theta(\tau) \exp \left[-S_g^{\text{eff}}[\Theta(\tau)]/\hbar \right], \quad (3.124)$$

mit der effektiven Wirkung

$$\begin{aligned} \exp \left[-S_g^{\text{eff}}[\Theta(\tau)]/\hbar \right] &= \int \mathcal{D}\Phi(x, \tau) \delta \left[\Phi(x=0, \tau) - \Theta(\tau) \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left(S_0[\Phi(x, \tau)] + S_b[\Theta(\tau)] \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.125)$$

Abbildung 3.7 verdeutlicht nochmals die Randbedingung für das Feld $\Phi(x, \tau)$ via $\delta[\Phi(x = 0, \tau) - \Theta(\tau)]$. Somit entkoppelt der Randterm S_b von dem Feld $\Phi(x, \tau)$. Mit der Notation $\delta[f(\tau)]$ bezeichnen wir die Verallgemeinerung einer Dirac-Deltafunktion auf Funktionale mit der entsprechenden Fourier-Darstellung

$$\delta[f(\tau)] = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\lambda(\tau) \exp \left[i \int_0^{\hbar\beta} d\tau \lambda(\tau) f(\tau) \right] \quad (3.126)$$

$$= \mathcal{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{l=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda_l \right] \exp \left[i \sum_{l=1}^N \frac{\hbar\beta}{N} \lambda_l f_l \right] \quad (3.127)$$

$$= \mathcal{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{2\pi N}{\hbar\beta} \right)^N \prod_{l=1}^N \delta(f_l) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{l=1}^N \delta(f_l) \quad (3.128)$$

und einer Normierungskonstante \mathcal{N} mit der Bezeichnung $f_l = f(\tau_l)$ und entsprechend dasselbe für λ_l . Durch das Einschleiben der Delta-Funktion in der Darstellung (3.126) in Gleichung (3.125) können wir nun die freie Integration über $\mathcal{D}\Phi$ durchführen, da die Randbedingung $\Phi(x=0, \tau) = \Theta(\tau)$ automatisch erfüllt wird. Wir erhalten somit

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_g = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\Theta(\tau) \mathcal{D}\lambda(\tau) \mathcal{D}\Phi(x, \tau) \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \int d\tau \int dx \rho (\partial_\tau \Phi)^2 + \sigma (\partial_x \Phi)^2 \right. \\ \left. - i2\hbar \lambda(\tau) \delta(x) [\Phi(x, \tau) - \Theta(\tau)] \right] \exp \left[-S_b[\Theta]/\hbar \right]. \end{aligned} \quad (3.129)$$

Die gaußsche Integration über das Feld $\Phi(x, \tau)$ liefert

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}\Phi \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \Phi(x, \tau) \cdot B(x, \tau|x', \tau') \cdot \Phi(x', \tau') + i\delta(x) \cdot \Phi(x, \tau) \cdot \lambda(\tau) \right] \\ = \mathcal{Z}_0[0] \exp \left[-\frac{\hbar}{2} \lambda(\tau) \cdot B^{-1}(0, \tau|0, \tau') \cdot \lambda(\tau') \right]. \end{aligned} \quad (3.130)$$

In der obigen Gleichung haben wir wieder die Notation (1.286) verwendet. Der Integralkern $B(x, \tau|x', \tau')$ besitzt die Darstellung

$$B(x, \tau|x', \tau') = - : \delta(x - x') :_L : \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta} \left[\rho \partial_{\tau'}^2 + \sigma \partial_{x'}^2 \right] \quad (3.131)$$

und entspricht dem Integralkern des masselosen Gauß-Modells weiter oben im Text. Mithilfe eines Ansatzes analog zu Gleichung (1.390) finden wir für den inversen Integralkern die Darstellung

$$B^{-1}(x, \tau|x', \tau') = \frac{1}{L \hbar \beta} \sum_{\{l, m\}'} e^{iq_l(x-x')} e^{i\nu_m(\tau-\tau')} \left[\rho \nu_m^2 + \sigma q_l^2 \right]^{-1}, \quad (3.132)$$

wobei bei der Summation das Index-Paar $l=0, m=0$ ausgeschlossen wird und mit den entsprechenden Matsubara-Frequenzen

$$\nu_m = \frac{2\pi}{\hbar\beta} m, \quad q_l = \frac{2\pi}{L} l, \quad m, l \in \mathbb{Z}. \quad (3.133)$$

Da wir in Gleichung (3.130) nur an $B^{-1}(0, \tau|0, \tau')$ interessiert sind, können wir die Summation über l leicht ausführen⁶,

$$B^{-1}(0, \tau|0, \tau') = \frac{1}{2 \hbar \beta} \sum_m e^{i\nu_m(\tau-\tau')} \frac{\coth[\sqrt{\rho/\sigma} \nu_m L/2]}{\sqrt{\rho\sigma} \nu_m}, \quad (3.134)$$

⁶Die Summation entspricht im wesentlichen derer aus Gleichung (1.400) an der Stelle $\sigma=0$.

Im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ geht der Kotangens in die Vorzeichenfunktion $\text{sign}[m]$ über, so dass wir den einfachen Fall

$$\lim_{L \rightarrow \infty} B^{-1}(0, \tau | 0, \tau') = \frac{1}{2\hbar\beta\alpha} \sum_m \frac{e^{i\nu_m(\tau-\tau')}}{|\nu_m|} \quad (3.135)$$

bekommen.

Da im Limes $L \rightarrow \infty$ eine beliebige Umskalierung von $x \rightarrow \lambda x$ gewählt werden kann, sollte das Modell demgegenüber invariant sein. Dabei skalieren die beiden Parameter ρ und σ wie folgt: $\rho \rightarrow \rho/\lambda$, $\sigma \rightarrow \sigma\lambda$. Somit ist die Kombination

$$\alpha = \sqrt{\rho\sigma} \quad (3.136)$$

im Nenner von Gleichung (3.135) in der Tat skalierungsinvariant.

Beide Summen (3.134) und (3.135) besitzen den divergenten Term $m = 0$. Dieser Term gehört zur Eigenfunktion $\lambda(\tau) = \text{const.}$ mit Eigenwert Null. Die Ursache liegt in der Invarianz des Gauß-Modells unter einer Verschiebung des Feldes $\Phi(x, \tau) \rightarrow \Phi(x, \tau) + \text{const.}$ und damit des Exponenten in Gleichung (3.130) unter der Transformation $\lambda(\tau) \rightarrow \lambda(\tau) + \text{const.}$ Damit gibt es eine ganze Schar von extremalen (und damit äquivalenten) Lösungen, wodurch das verbleibende Pfadintegral über $\int \mathcal{D}\lambda$ stark divergiert. Genau dasselbe Problem tritt bei allen eichinvarianten Modellen auf; da sich deren Wirkung unter einer Eichtransformation nicht ändert, liegt das Extremum immer als komplette Lösungsschar vor. Der Ausweg liegt nun darin, eine Eichung vorzunehmen, d.h. sich auf genau einen Repräsentanten der Lösungsschar zu beschränken. Formal elegant können wir dies im Pfadintegralformalismus durch eine Dirac-Deltafunktion in der Verallgemeinerung eines Funktionals (3.130) darstellen. Im obigen Fall beispielsweise wäre die Eichung durch eine Fixierung des sogenannten Gleichstromanteils von $\Theta(\tau)$ festgelegt,

$$\int \mathcal{D}\Theta(\tau) \rightarrow \int \mathcal{D}\Theta(\tau) \delta[c - \int d\tau \Theta(\tau)]. \quad (3.137)$$

Die Konstante c entspricht nun aber im Fourierraum gerade der Fourierkomponente mit der Matsubara-Frequenz $\nu_m = 0$. Über diese Eigenmode wird also nicht integriert. Damit haben wir aus dem Funktionenraum die Eigenfunktion ausgeschlossen, welche zu einem Eigenwert Null gehört. Dementsprechend existiert damit die inverse Darstellung, also B^{-1} , wobei sowohl in der Darstellung von B^{-1} als auch in der Darstellung von B der Term mit $m = 0$ ignoriert wird, wobei im letzteren Fall dieser keinen Beitrag liefert,

da er ja zum Eigenwert Null gehört. Im Folgenden ignorieren wir den dazugehörigen Term $m = 0$ und erhalten nach Ausführen der Summation

$$\lim_{L \rightarrow \infty} B^{-1}(0, \tau | 0, \tau') = -\frac{1}{2\pi\alpha} \ln \left[2 \sin \left[\frac{\pi(\tau - \tau')}{\hbar\beta} \right] \right]. \quad (3.138)$$

Dies entspricht dem Propagator auf dem Einheitskreis aus Gleichung (3.99).

Die Greenfunktion $B^{-1}(x, \tau | x', \tau')$ aus Gleichung (3.132) lässt sich im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ auch allgemein für $x \neq x'$ ausführen. Man findet dabei

$$\lim_{L \rightarrow \infty} B^{-1}(x, \tau | x', \tau') = \frac{1}{2\pi \hbar\beta} \sum_{l \neq 0} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ik(x-x')} e^{i\nu_l(\tau-\tau')}}{\sigma k^2 + \rho \nu_l^2}. \quad (3.139)$$

Für das Integral findet man mithilfe des Residuensatzes [51]

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ikx}}{k^2 + a^2} = \frac{1}{2|a|} e^{-|ax|}, \quad (3.140)$$

und damit

$$\lim_{L \rightarrow \infty} B^{-1}(x, \tau | x', \tau') = \frac{1}{2\alpha \hbar\beta} \sum_{l \neq 0} \frac{e^{i\nu_l(\tau-\tau')} e^{-|\nu_l(x-x')/v|}}{|\nu_l|}. \quad (3.141)$$

Unter Verwendung der weiter oben eingeführten Variablen $\alpha = \sqrt{\rho\sigma}$, $v = \sqrt{\sigma/\rho}$ und $z = \tau + ix/v$ und der Reihendarstellung des Logarithmus in der Gestalt

$$\nu_1 \sum_{l > 0} \frac{e^{i\nu_l z}}{\nu_l} = -\ln [1 - e^{i\nu_1 z}], \quad (3.142)$$

erhalten wir die Darstellung ($\Delta z = z - z'$, $\Delta \bar{z} = \bar{z} - \bar{z}'$),

$$\lim_{L \rightarrow \infty} B^{-1}(z | z') = \begin{cases} \frac{1}{4\pi\alpha} \ln [(1 - e^{i\nu_1 \Delta z}) (1 - e^{-i\nu_1 \Delta \bar{z}})] & x - x' > 0 \\ \frac{1}{4\pi\alpha} \ln [(1 - e^{i\nu_1 \Delta \bar{z}}) (1 - e^{-i\nu_1 \Delta z})] & x - x' < 0 \end{cases}, \quad (3.143)$$

$$= -\frac{1}{4\pi\alpha} \ln \left[\frac{4 \sin[\nu_1(z - z')/2] \sin[\nu_1(\bar{z} - \bar{z}')/2]}{\exp[-\nu_1 |\text{Im}[z - z']|]} \right]. \quad (3.144)$$

Am Anfang dieses Kapitels erkannten wir, dass zur Greenfunktion des Laplace-Operators eine beliebige holomorphe bzw. antiholomorphe Funktion mit

$$\partial_{\bar{z}} f(z) = 0, \quad \text{bzw.} \quad \partial_z g(\bar{z}) = 0, \quad (3.145)$$

dazuaddiert werden kann, da es sich hierbei um die homogene Lösung des Problems handelt. Der Term im Nenner des Bruchs trägt aber gerade in einer solchen Form

$$\ln \left[\exp[-\nu_1 |\operatorname{Im}[z - z']|] \right] = -\nu_1 \left| \frac{z - z'}{2} - \frac{\bar{z} - \bar{z}'}{2} \right| \quad (3.146)$$

zur Green-Funktion $B^{-1}(z|z')$ bei, weswegen wir diesen Term im Folgenden weglassen und die Form

$$\lim_{L \rightarrow \infty} B^{-1}(z|z') = -\frac{1}{2\pi\alpha} \ln \left| 2 \sin \left[\frac{\nu_1(z - z')}{2} \right] \right|, \quad (3.147)$$

verwenden. Dies wurde ausführlich in Abschnitt 3.2.1 diskutiert.

In den ursprünglichen Koordinaten x und τ erhalten wir die Form

$$-\frac{1}{4\pi\alpha} \ln \left[2 \left(\cosh[\nu_1(x - x')/(2v)] - \cos[\nu_1(\tau - \tau')/2] \right) \right]. \quad (3.148)$$

Der Grenzfall $\operatorname{Im}[z - z'] = 0$, also $x = x'$ in den ursprünglichen Koordinaten, liefert sofort die zuvor gefundene Darstellung (3.138).

Wir führen nun die gaußsche Integration über $\mathcal{D}\lambda(\tau)$ in Gleichung (3.129) durch,

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}\lambda(\tau) \exp \left[-\frac{\hbar}{2} \lambda(\tau) \cdot B^{-1}(0, \tau|0, \tau') \cdot \lambda(\tau') - i\lambda(\tau) \cdot \Theta(\tau) \right] \\ &= \mathcal{Z}_0^{-1}[0] \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \Theta(\tau) \cdot B'(0, \tau|0, \tau') \cdot \Theta(\tau') \right]. \end{aligned} \quad (3.149)$$

Für den Integrkern $B'(0, \tau|0, \tau')$ finden wir im Grenzfall $L \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} B'(0, \tau|0, \tau') &\equiv \left[\lim_{L \rightarrow \infty} B^{-1}(0, \tau|0, \tau') \right]^{-1} \\ &= \frac{2\alpha}{\hbar\beta} \sum_m e^{i\nu_m(\tau - \tau')} |\nu_m| = -\frac{2\pi\alpha}{(\hbar\beta)^2 \sin^2 \left[\frac{\pi(\tau - \tau')}{\hbar\beta} \right]}. \end{aligned} \quad (3.150) \quad (3.151)$$

Dies entspricht genau der weiter oben gefundenen Korrelationsfunktion im ohmschen Skalen-Limes, Gleichung (1.418) bzw. (1.480). Da hier die Nullmode $m = 0$ nicht beiträgt, spielt es keine Rolle, ob über $m = 0$ summiert wird, oder nicht. Allerdings entspricht $B'(0, \tau|0, \tau')$ nicht direkt dem ursprünglichen Integrkern $B(0, \tau|0, \tau')$ in der allgemeinen Fourierdarstellung im Grenzfall $L \rightarrow \infty$, wie in Abbildung 3.8 skizziert

$$\lim_{L \rightarrow \infty} B(x, \tau|x', \tau') = \frac{-1}{2\pi\hbar\beta} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-x')} e^{i\nu_m(\tau-\tau')} \left[\rho \nu_m^2 + \sigma k^2 \right].$$

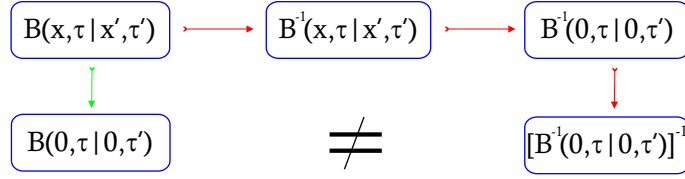


Abbildung 3.8: Durch zweimalige gaußsche Integration geht B in B^{-1} und wieder in B über. Aufgrund der Nullmode kommt man dabei nicht zum ursprünglichen Integralkern B zurück.

Allgemein erhalten wir für endliches L die Darstellung

$$B(0, \tau | 0, \tau') = -\frac{2\alpha}{\hbar\beta} \sum_m e^{i\nu_m(\tau-\tau')} \frac{\nu_m}{\coth[\nu_m L/(2\nu)]}. \quad (3.152)$$

Unter Verwendung der Poissonschen Summenformel, d.h. Einschieben einer periodischen Deltafunktion (1.383) bekommen wir

$$B(0, \tau | 0, \tau') = -\frac{\alpha}{\pi} \sum_l \int_{-\infty}^{\infty} d\nu e^{-i\nu[\hbar\beta l - (\tau - \tau')]} \frac{\nu}{\coth[\nu L/(2\nu)]}. \quad (3.153)$$

Dieses Integral über die Variable ν liefert den Wert [51],

$$\int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\gamma s} \frac{s}{\coth[s]} = -\frac{\pi^2}{2} \frac{\coth[\pi\gamma/2]}{\sinh[\pi\gamma/2]}. \quad (3.154)$$

Wir erhalten dadurch eine verbleibende Summe der Gestalt

$$B(0, \tau | 0, \tau') = 2\pi\alpha \left(\frac{\nu}{L}\right)^2 \sum_l \frac{\coth\left[\pi\frac{\nu}{L}(\hbar\beta l - (\tau - \tau'))\right]}{\sinh\left[\pi\frac{\nu}{L}(\hbar\beta l - (\tau - \tau'))\right]}. \quad (3.155)$$

Leider können wir diesen Ausdruck im Moment nicht weiter auswerten. Es ist jedoch zu erwarten, dass er mit dem nichtharmonischen Anteil von Gleichung (3.103) für die Fundamentallösung auf einem Rechteck eng zusammenhängt.

Der Kopplungsterm (3.151) ist nun identisch mit dem Kopplungsterm (1.480) des Caldeira-Legget Modells im ohmschen Skalen-Limes. Für die Zustandssumme \mathcal{Z}_g aus Gleichung (3.124) finden wir damit zusammengefasst die effektive Wirkung $S_g^{\text{eff}}[\Theta(\tau)]$ im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ in der Form

$$\mathcal{Z}_g = \int \mathcal{D}\Theta(\tau) \exp\left[\frac{-S_g^{\text{eff}}[\Theta(\tau)]}{\hbar}\right], \quad (3.156)$$

$$\exp\left[S_g^{\text{eff}}[\Theta(\tau)]\right] = \mathcal{N} e^{-S_b[\Theta(\tau)]} \exp\left[-\frac{1}{2} \Theta(\tau) \cdot B'(0, \tau | 0, \tau') \cdot \Theta(\tau')\right] \quad (3.157)$$

$$B'(0, \tau | 0, \tau') = \frac{2\pi\alpha}{(\hbar\beta)^2 \sin^2\left[\frac{\pi(\tau-\tau')}{\hbar\beta}\right]}. \quad (3.158)$$

Durch die Freiheit der Wahl des Randtermes $S_b[\Theta(\tau)]$ kann somit jedes ein-dimensionale Modell, welches an ein ohmsches Bad im Skalenlimes koppelt, modelliert werden.

Anhang A

Anhang

A.1 Der Harmonische Oszillator mit linearer Kopplung

Im Folgenden betrachten wir die verschiedenen relevanten Funktionen bezüglich des Integralkerns des harmonischen Oszillators in Imaginär- und Realzeit, um das Pfadintegral eines linear gekoppelten harmonischen Oszillators zu bestimmen. Der dabei verwendete Funktionenraum ist auf solche Funktionen beschränkt, welche den zugrunde liegenden Randbedingungen genügen. Im Imaginärzeitfall zur Berechnung der Zustandssumme ist der Funktionenraum \mathcal{G}_I auf quadratintegrale Funktionen mit explizit periodischer Fortsetzung auf dem Intervall $[0, \hbar\beta]$ und mit periodischen Randbedingungen $x(0) = x(\hbar\beta)$ beschränkt. In der Fourierdarstellung treten dadurch die charakteristischen Matsubara-Frequenzen $\nu_n = 2\pi n/(\hbar\beta)$ auf. Hingegen haben wir im Realzeitfall zur Berechnung des Propagators die Beschränkung des Funktionenraumes $\mathcal{G}_R(x', x'')$ auf quadratintegrale Funktionen auf dem Intervall $[t', t'']$ mit den expliziten Dirichlet-Randbedingungen $x(t') = x'$ und $x(t'') = x''$. Diese können nun sowohl periodisch als auch antiperiodisch fortgesetzt werden. In der Fourierdarstellung entsprechen die geraden/ungeraden Frequenzanteile $2n\pi/(t'' - t')$ bzw. $(2n + 1)\pi/(t'' - t')$ der periodischen/antiperiodischen Fortsetzung. Es treten daher im Realzeitfall die charakteristischen Frequenzen $\nu_n = \pi n/(\hbar\beta)$ auf. Der Funktionenraum $\mathcal{G}_R(x', x'')$ wird durch die beiden Parameter x' und x'' bestimmt, während im Imaginärzeitfall diese expliziten Randbedingungen nicht vorliegen.

Für Fluktuationen $y(t)$ bzw. $y(\tau)$ um die extremale Lösung herum gilt in beiden Fällen dieselbe Randbedingung $y(t') = y(t'') = 0$ bzw. $y(0) = y(\hbar\beta) = 0$.

Ist eine Wirkung wie im Falle des zu behandelnden harmonischen Oszil-

lators mit linearer Kopplung maximal quadratisch in der zu integrierenden Koordinatenfunktion, so entspricht der Propagator bis auf einen Vorfaktor der Phase $\exp[(i/\hbar)S_{\text{kl}}]$, wobei $S_{\text{kl}} = S[x_{\text{kl}}]$ der Wirkung für die klassische Lösung $x_{\text{kl}}(t)$ gegeben durch die Bedingung

$$\left. \frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} \right|_{x_{\text{kl}}} = 0 \quad (\text{A.1})$$

entspricht. Der noch fehlende Vorfaktor wird durch die Fluktuationen erzeugt.

A.1.1 Zustandssumme als Imaginärzeit-Pfadintegral

Die Zustandssumme des linear gekoppelten harmonischen Oszillators kann mit der in Kapitel 1.4.10 eingeführten Notation (1.286) durch partielle Integration in die Form

$$\begin{aligned} Z[b] &= \oint \mathcal{D}x \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S^{(\text{E})}[x, b] \right] \\ &= \oint \mathcal{D}x \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left(\frac{1}{2} x(\tau) \cdot K(\tau, \tau') \cdot x(\tau') - b(\tau) \cdot x(\tau) \right) \right], \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

gebracht werden. Nur wegen der Einschränkung des Pfadintegrals auf periodische Pfade mit $x(0) = x(\hbar\beta)$ tritt bei der partiellen Integration kein zusätzlicher Randterm auf. Der Integralkern $K(\tau, \tau')$ besitzt die in Gleichung (1.382) gefundene reelle $\hbar\beta$ -periodische Form

$$K(\tau, \tau') = -m : \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta} (\partial_{\tau'}^2 - \omega^2), \quad (\text{A.3})$$

$$= \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\nu_n(\tau - \tau')} m(\nu_n^2 + \omega^2), \quad \nu_n = \frac{2\pi}{\hbar\beta} n, \quad (\text{A.4})$$

$$= \frac{m}{\hbar\beta} \left[\omega^2 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos[\nu_n(\tau - \tau')] (\nu_n^2 + \omega^2) \right]. \quad (\text{A.5})$$

mit der periodisch fortgesetzten Delta-Distribution $: \delta(\tau - \tau') :_{\hbar\beta}$ aus Gleichung (1.383), was der Darstellung des Eins-Operators im verwendeten Funktionenraum \mathcal{G}_1 entspricht. Der inverse Integralkern $K^{-1}(\tau)$, welcher durch die Bedingung

$$K(\tau, \tau') \cdot K^{-1}(\tau', \tau'') = : \delta(\tau - \tau'') :_{\hbar\beta} . \quad (\text{A.6})$$

gegeben ist, existiert für $\omega \neq 0$ und wurde in Gleichung (1.390) definiert,

$$K^{-1}(\tau, \tau') = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\nu_n(\tau-\tau')} \frac{1}{m} \frac{1}{\nu_n^2 + \omega^2}, \quad (\text{A.7})$$

$$= \frac{1}{m\hbar\beta} \left(\frac{1}{\omega^2} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos[\nu_n(\tau - \tau')]}{\nu_n^2 + \omega^2} \right). \quad (\text{A.8})$$

Gleichung (A.4) und (A.7) haben nur Gültigkeit bei Anwendung auf Funktionen aus \mathcal{G}_1 , also auf Funktionen aus dem verwendeten Funktionenraum.

Für den Bereich $\tau - \tau' \in [0, \hbar\beta]$ können wir die spezielle Darstellung aus Gleichung (1.399) verwenden,

$$K^{-1}(\tau, \tau') = \frac{1}{2m\omega} \frac{\cosh[\omega(\hbar\beta/2 - (\tau - \tau'))]}{\sinh(\omega\hbar\beta/2)}. \quad (\text{A.9})$$

Im Folgenden interessieren wir uns für 3 verschiedene periodische Funktionen bezüglich des Integralkerns $K(\tau, \tau')$.

1. Die homogene Lösung (EF zum EW Null) $K(\tau, \tau') \cdot x^h(\tau') = 0$.
2. Die partikuläre Lösung $K(\tau, \tau') \cdot x^p(\tau') = b(\tau)$.
3. Eigenfunktionen zu K mit $K(\tau, \tau') \cdot x^\lambda(\tau') = \lambda x^\lambda(\tau)$, $\lambda \neq 0$.

Die homogene Lösung mit der partikulären Lösung entspricht der klassischen Lösung

$$x_{\text{kl}}(\tau) = x^h(\tau) + x^p(\tau) \quad (\text{A.10})$$

des Problems, da die Bedingung (A.1) angewand auf Gleichung (A.2) die Bewegungsgleichung

$$K(\tau, \tau') \cdot x_{\text{kl}}(\tau') - b(\tau) = 0. \quad (\text{A.11})$$

liefert. Eventuelle Randbedingungen können dabei nur durch die Wahl der Konstanten der homogenen Lösung $x^h(\tau)$ angepasst werden. Die partikuläre Lösung $x^p(\tau)$ demgegenüber lässt keine Freiheitsgrade zu und ist vollständig fixiert und verschwindet, wenn die Störung $b(\tau)$ verschwindet. Formal ergibt sich die partikuläre Lösung mithilfe der Greenfunktion $K^{-1}(\tau, \tau')$, wie wir im weiteren sehen werden. Die Eigenfunktionen $x^\lambda(\tau)$ wiederum spielen eine Rolle für die Invertierbarkeit und bei der Berechnung der Determinante des Integralkerns. Sie bilden den kompletten relevanten Funktioneneigenraum für den Operator $K(\tau, \tau')$, wobei eventuelle Randbedingungen diesen Raum

einschränken. So werden wir sehen, dass oftmals für Fluktuationen nur der Unterraum von Eigenfunktionen, welche am Rand verschwinden, relevant ist.

Als Ansatz der Funktion $x(\tau)$ verwenden wir die reelle und explizit $\hbar\beta$ -periodische Fourierreihe

$$x(\tau) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\nu_n\tau} \tilde{x}_n \quad \text{mit} \quad \tilde{x}_{-n} = \tilde{x}_n^*, \quad (\text{A.12})$$

$$= \frac{\tilde{x}'_0}{\hbar\beta} + \frac{2}{\hbar\beta} \sum_{n>0} \left\{ \tilde{x}'_n \cos[\nu_n\tau] - \tilde{x}''_n \sin[\nu_n\tau] \right\} \quad (\text{A.13})$$

und suchen nach Lösungen für die Koeffizienten \tilde{x}_n , welche die obigen Bedingungen erfüllen.

Die homogene Lösung $x^h(\tau)$:

Für die homogene Lösung ergibt sich aus dem Reihenansatz (A.12) die folgende Bedingung für die Koeffizienten \tilde{x}_n^h

$$\tilde{x}_n^h(\nu_n^2 + \omega^2) = 0. \quad (\text{A.14})$$

Für $\omega \neq 0$ gibt es daher als Lösung nur den trivialen Fall $\tilde{x}_n^h = 0$ für alle n und damit

$$x^h(\tau) = 0. \quad (\text{A.15})$$

Dieses Resultat war zu erwarten, da der inverse Kern K^{-1} nur dann existiert, wenn keine Eigenfunktionen mit Eigenwert Null existieren.

Für das freie Teilchen mit $\omega = 0$ gibt es zusätzlich die Lösung $x_{\omega=0}^h(\tau) = \tilde{x}_0^h$. Daher existiert in diesem Fall K^{-1} nur dann, wenn der Lösungsraum keine Nullmode enthält, wie man auch direkt an der Reihendarstellung (A.7) sieht.

Es sei noch angemerkt, dass durchaus eine homogene Lösung des Problems existiert, wenn man die Forderung der Periodizität vernachlässigt. Man bekommt dann eine Lösung der Gestalt

$$x^h(\tau) = \alpha_+ e^{\omega\tau} + \alpha_- e^{-\omega\tau}. \quad (\text{A.16})$$

Mit der Randbedingung $x^h(0) = x^h(\hbar\beta) = x_0^h$ werden die Koeffizienten α_{\pm} festgelegt und wir erhalten die Form

$$x^h(\tau) = x_0^h \left(\frac{e^{\omega\tau}}{1 + e^{\omega\hbar\beta}} + \frac{e^{-\omega\tau}}{1 + e^{-\omega\hbar\beta}} \right) = x_0^h \frac{\cosh[\omega(\hbar\beta/2 - \tau)]}{\cosh[\omega\hbar\beta/2]}. \quad (\text{A.17})$$

Wenn wir diese Lösung nun periodisch fortsetzen, bekommen wir für $K \cdot x^h$ gerade die periodisch fortgesetzte Delta-Distribution (1.383), da die Ableitung der periodisch fortgesetzten Funktion an den Stellen $\tau = n\hbar\beta$, $n \in \mathbb{N}$ nichtstetig ist. Mit der Wahl für den obigen Koeffizienten $x_0^h = [2m\omega \tanh(\omega\hbar\beta/2)]^{-1}$ bekommen wir gerade den inversen Integrkern $K^{-1}(\tau)$ aus Gleichung (A.7) zurück.

Die partikuläre Lösung $x^p(\tau)$:

Die partikuläre Lösung erhalten wir formal mit Hilfe des inversen Kerns $K^{-1}(\tau, \tau')$ als

$$x^p(\tau) = K^{-1}(\tau, \tau') \cdot b(\tau'). \quad (\text{A.18})$$

Der inverse Integrkern entspricht also der Greenfunktion des obigen Problems. Mit der Darstellung (A.9) für K^{-1} bekommen wir den folgenden Ausdruck

$$x^p(\tau) = \frac{1}{2m\omega} \frac{\cosh[\omega(\hbar\beta/2 - (\tau - \tau'))]}{\sinh[\omega\hbar\beta/2]} \cdot b(\tau'). \quad (\text{A.19})$$

Diese Funktionen erfüllen ebenfalls die periodischen Randbedingungen $x^p(0) = x^p(\hbar\beta)$.

Die Eigenfunktionen $x^\lambda(\tau)$:

Für die Eigenfunktionen x^λ bekommen wir folgende Bedingung für die Fourier-Koeffizienten

$$\tilde{x}_n \left[(\nu_n^2 + \omega^2) - \frac{\lambda}{m} \right] = 0. \quad (\text{A.20})$$

Zu den reellen und positiven Eigenwerten

$$\lambda_l = m(\nu_l^2 + \omega^2) \quad (\text{A.21})$$

verschwinden alle Koeffizienten \tilde{x}_n mit $n \neq \pm l$. Damit bekommen wir die für $l \neq 0$ zweifach entarteten und normierten Eigenfunktionen

$$x^{\lambda_l}(\tau) = \sqrt{\frac{2}{\hbar\beta}} \left\{ c_l' \cos[\nu_l \tau] - c_l'' \sin[\nu_l \tau] \right\} = \sqrt{\frac{2}{\hbar\beta}} \operatorname{Re}[c_l e^{i\nu_l \tau}] , \quad (\text{A.22})$$

$$\text{mit } |c|^2 = c'^2 + c''^2 = 1 , \quad (\text{A.23})$$

und für $l = 0$ die nicht entartete Eigenfunktion

$$x^{\lambda_0}(\tau) = \sqrt{\frac{1}{\hbar\beta}} . \quad (\text{A.24})$$

Der Kern K ist somit positiv definit, da alle Eigenwerte $\lambda_l > 0$ sind. Die weiter oben verwendete Darstellung für K (A.4) und K^{-1} (A.7) entspricht der sogenannten Spektraldarstellung, also der Entwicklung nach normierten Eigenfunktionen $\langle \tau | \lambda_l \rangle = 1/\sqrt{\hbar\beta} \exp[i\nu_l \tau]$ der Gestalt

$$K(\tau, \tau') = \langle \tau | K | \tau' \rangle = \sum_l \lambda_l \langle \tau | \lambda_l \rangle \langle \lambda_l | \tau' \rangle, \quad (\text{A.25})$$

$$K^{-1}(\tau, \tau') = \langle \tau | K^{-1} | \tau' \rangle = \sum_l \frac{1}{\lambda_l} \langle \tau | \lambda_l \rangle \langle \lambda_l | \tau' \rangle. \quad (\text{A.26})$$

Diese beiden Darstellungen sind nur korrekt, solange die darauf angewendeten Funktionen im Funktionenraum \mathcal{G}_I liegen, da die Eins-Darstellung $\sum_l |\lambda_l\rangle \langle \lambda_l|$ nur die Identität in \mathcal{G}_I darstellt, für allgemeine quadratintegrale Funktionen jedoch einem Projektor auf den Raum \mathcal{G}_I entspricht. Da wir das Pfadintegral über reelle Pfade bilden, interessiert uns an den oben gefundenen Lösungen nur der Realteil.

Klassische Wirkung in Imaginärzeit

Wir können nun die klassische Lösung x_{kl} aus Gleichung (A.10) in die Wirkung $S^{(\text{E})}[x]$ einsetzen. Dabei erhalten wir die sogenannte klassische Wirkung

$$S^{(\text{E})}[x_{\text{kl}}] = S_{\text{kl}}^{(\text{E})} = -\frac{1}{2} b(\tau) \cdot K^{-1}(\tau, \tau') \cdot b(\tau'). \quad (\text{A.27})$$

Quadratische Ergänzung

Nachdem die Existenz des inversen Integralkernes $K^{-1}(\tau, \tau')$ gezeigt wurde, sind wir nun in der Lage, die Zustandssumme (A.2) durch eine quadratische Ergänzung der Wirkung in ein rein gaußsches Integral überzuführen. Mit der Substitution $x(\tau) = K^{-1}(\tau, \tau') \cdot b(\tau') + y(\tau)$ geht die Zustandssumme $Z[b]$ in die Form

$$Z[b] = Z[0] \exp \left[\frac{1}{2\hbar} b(\tau) \cdot K^{-1}(\tau, \tau') \cdot b(\tau') \right], \quad (\text{A.28})$$

$$Z[0] = \oint_{y(0)=y(\hbar\beta)} \mathcal{D}y \exp \left[\frac{-1}{2\hbar} y(\tau) \cdot K(\tau, \tau') \cdot y(\tau') \right], \quad (\text{A.29})$$

über. Der Exponent des ersten Terms lässt sich wahlweise auch schreiben als

$$b(\tau) \cdot K^{-1}(\tau, \tau') \cdot b(\tau') = b(\tau) \cdot x^{\text{p}}(\tau) = x^{\text{p}}(\tau) \cdot K(\tau, \tau') \cdot x^{\text{p}}(\tau'). \quad (\text{A.30})$$

Dies ist jedoch gerade die klassische Wirkung, wie man aus (A.27) direkt abliest. Bei gaußschen Integralen ist dies ganz allgemein der Fall, da dies einer

Funktionalentwicklung der Pfade $x(\tau)$ um die klassische Lösung $K^{-1}(\tau, \tau') \cdot b(\tau')$ herum entspricht und die Fluktuationen wieder exakt quadratisch in den Exponenten eingehen.

Das verbleibende Integral über $\mathcal{D}y$ entspricht der wohlbekanntem Zustandssumme des freien, nichtgekoppelten Oszillators, welcher im Operatorbild durch Spurbildung in Gleichung (1.48) zu $Z[0] = 1/(2 \sinh[\omega \hbar \beta / 2])$ bestimmt wurde. Spaltet man von der Koordinate y den konstanten Gleichstromanteil y_0 ab, so bleibt eine reine Fluktuation δy übrig, welche am Rand verschwindet. Wie in Abschnitt 1.4.11, Gleichung (1.432) und (1.433) gezeigt wurde, liefert der konstante Anteil y_0 den klassischen Wert der Zustandssumme $1/(\omega \hbar \beta) = \lim_{\hbar \beta \rightarrow 0} Z[0]$, während die Fluktuationen δy die quantenmechanische Korrektur $\omega \hbar \beta Z$ bedeutet, welche für $\omega \hbar \beta \ll 1$ die Entwicklung

$$\omega \hbar \beta Z[0] = 1 - (\omega \hbar \beta)^2 / 24 + \mathcal{O}(\omega \hbar \beta)^4 \quad (\text{A.31})$$

besitzt.

Somit erhalten wir für die quantenmechanische Zustandssumme des gestörten harmonischen Oszillators den Ausdruck

$$Z[b] = \frac{1}{2 \sinh[\omega \hbar \beta / 2]} \exp \left[\frac{1}{2 \hbar} b(\tau) \cdot \frac{\cosh[\omega \{ \hbar \beta / 2 - |\tau - \tau'| \}]}{2 m \omega \sinh[\omega \hbar \beta / 2]} \cdot b(\tau') \right]. \quad (\text{A.32})$$

$$= Z[0] \exp[-S_{\text{kl}}/\hbar]. \quad (\text{A.33})$$

wobei wir für den inversen Integralkern $K^{-1}(\tau, \tau')$, $\tau - \tau' \in [-\hbar \beta, \hbar \beta]$ die Darstellung aus Gleichung (1.399) verwendet haben.

Für die klassische Zustandssumme finden wir im Falle einer konstanten Kraft b den Ausdruck

$$Z_{\text{kl}} = \int \frac{dp dx}{2\pi \hbar} \exp \left[-\beta \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 x^2}{2} + bx \right) \right] \quad (\text{A.34})$$

$$= \frac{1}{\omega \hbar \beta} \exp \left[\frac{\beta}{2} \frac{b^2}{m\omega^2} \right]. \quad (\text{A.35})$$

Dasselbe Resultat erhalten wir aus der quantenmechanischen Zustandssumme (A.32) im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$. Dazu bemerken wir, dass die zweifache Integration des Kernes das folgende Resultat liefert,

$$\int_0^{\hbar \beta} d\tau d\tau' \cosh[\omega \{ \hbar \beta / 2 - |\tau - \tau'| \}] = 2 \hbar \beta \frac{\sin[\omega \hbar \beta / 2]}{\omega}. \quad (\text{A.36})$$

Durch Linearisierung des Sinus-Hyperbolicus erhalten wir den klassischen Ausdruck (A.35). Dies war zu erwarten, da wir in Gleichung (1.48) den

Zusammenhang zwischen der klassischen und der quantenmechanischen Zustandssumme aufgezeigt haben, wobei die klassische Zustandssumme aus der quantenmechanischen Zustandssumme im klassischen Grenzfall hervorging.

A.1.2 Propagator als Realzeit-Pfadintegral

Der Realzeitfall unterscheidet sich vom oben diskutierten Imaginärzeitfall in zwei wesentlichen Punkten. Zum einen haben wir allgemeinere Randbedingungen und die Ableitung $-\partial_\tau^2$ des Imaginärzeit-Kerns (A.3) geht im Realzeitfall in $+\partial_t^2$ über. Der für uns interessante Propagator (1.148) besitzt in Analogie zur obigen Zustandssumme (A.2) die Form eines Pfadintegrals über Pfade mit den Dirichlet-Randbedingungen $x(t') = x'$, $x(t'') = x''$

$$\langle x'' | U(t'', t') | x' \rangle = \int \mathcal{D}x \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2} x(s) \cdot N(s, s') \cdot x(s') + b(s) \cdot x(s) + \frac{m}{2} x(s) \dot{x}(s) \Big|_{t'}^{t''} \right) \right]. \quad (\text{A.37})$$

Da nun keine periodischen Randbedingungen vorliegen, tritt durch die partielle Integration ein Randterm auf, den wir mit einbeziehen müssen. Der symmetrische Integralkern der Pfadkopplung besitzt nun die Form

$$N(s, s') = -m \delta(s - s') (\partial_{s'}^2 + \omega^2). \quad (\text{A.38})$$

Unter der Notation (1.286) verstehen wir im Realzeitfall

$$a(s) \cdot b(s) = \int_{t'}^{t''} ds a(s) b(s). \quad (\text{A.39})$$

Eigenfunktionen $x^\lambda(s)$ & homogene Lösung $x^h(s)$:

Im Gegensatz zum euklidischen Fall besitzt dieser Integralkern reelle homogene Lösungen aus $\mathcal{G}_R(x', x'')$ der Form

$$x^h(s) = \frac{x' \sin[\omega(t'' - s)] + x'' \sin[\omega(s - t')]}{\sin[\omega(t'' - t')]}, \quad \omega \neq \frac{n\pi}{t'' - t'}, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (\text{A.40})$$

welche die Randbedingungen des Realzeitfalles

$$x(t') = x', \quad x(t'') = x'' \quad (\text{A.41})$$

erfüllen. Der oben ausgeschlossene Fall $\omega = \pi n / (t'' - t')$ wird als Kaustik bezeichnet. Diese Frequenzen entsprechen den halben Matsubara-Frequenzen

und liefern daher eine periodische / antiperiodische Fortsetzung für n gerade/ungerade auf dem Intervall $t'' - t'$. Dies ist jedoch nur mit den speziellen Randbedingungen $x' = \pm x''$ kompatibel und daher ist die Gleichung (A.40) im allgemeinen Fall nicht erfüllt. Aus diesem Grund finden wir für die spezielle Randbedingung $x(t') = x(t'')$ eine Lösung $x_+^h(s) \in \mathcal{G}_R(x', x')$ unter Verwendung der Additionstheoreme der trigonometrischen Funktionen

$$x_+^h(s) = x' \frac{\cos \left[\omega \left(s - \frac{t''+t'}{2} \right) \right]}{\cos \left[\omega \frac{t''-t'}{2} \right]}, \quad \omega \neq \frac{(2n+1)\pi}{t''-t'}, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.42})$$

Es werden also nur Frequenzen ω ausgeschlossen, welche zur antiperiodischen Fortsetzung gehören. Analog finden wir Lösungen $x_-^h(s) \in \mathcal{G}_R(x', -x')$ zur antiperiodischen Randbedingung $x(t') = -x(t'')$

$$x_-^h(s) = -x' \frac{\sin \left[\omega \left(s - \frac{t''+t'}{2} \right) \right]}{\sin \left[\omega \frac{t''-t'}{2} \right]}, \quad \omega \neq \frac{(2n)\pi}{t''-t'}, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.43})$$

Für Fluktuationen $\delta x \in \mathcal{G}_R(0, 0)$, welche den Randbedingungen $x(t') = x(t'') = 0$ genügen, finden wir zusätzlich noch die Lösung

$$x_0^h(s) = c \sin [\omega(t'' - s)], \quad \omega = \frac{n\pi}{t'' - t'}, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad c \in \mathbb{R}, \quad (\text{A.44})$$

mit beliebiger Amplitude c , sofern die Frequenz ω die obige Bedingung erfüllt. Dies sind nun genau die in (A.40) ausgeschlossenen Frequenzen, womit der Funktionenraum in zwei getrennte und zueinander orthogonale Unterräume

$$\mathcal{G}_R = \mathcal{G}_R(x', x'' \neq 0) \oplus \mathcal{G}_R(0, 0), \quad (\text{A.45})$$

$$\text{mit} \quad \mathcal{G}_R(x', x'' \neq 0) \cap \mathcal{G}_R(0, 0) = 0 \quad (\text{A.46})$$

entsprechend den Randbedingungen zerlegt werden kann, sofern i.A. $x' \neq x''$ gilt.

Als orthonormierte Eigenfunktionen auf dem Intervall $[t', t'']$, welche der Bedingung $x' = x'' = 0$ genügen, finden wir

$$x^{\lambda_l}(s) = \langle s | \lambda_l \rangle = \sqrt{\frac{2}{t'' - t'}} \sin [\nu_l(t'' - s)], \quad \nu_l = \frac{l\pi}{t'' - t'}, \quad l \in \mathbb{N}^+ \quad (\text{A.47})$$

mit Eigenwert $\lambda_l = m(\nu_l^2 - \omega^2)$.

Dies nützen wir nun aus, indem wir Pfade, welche den Randbedingungen (A.41) genügen, in die Anteile

$$x(s) = x^h(s) + \delta x(s), \quad (\text{A.48})$$

mit den Randbedingungen

$$\delta x(t') = \delta x(t'') = 0, \quad x^h(t') = x', \quad x^h(t'') = x'' \quad (\text{A.49})$$

aufspalten. Eingesetzt in den Propagator (A.37) erhalten wir so

$$\begin{aligned} \langle x'' | U(t'', t') | x' \rangle &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(b(s) \cdot x^h(s) + \frac{m}{2} x^h(s) \dot{x}^h(s) \right) \Big|_{t'}^{t''} \right] \\ &\times \oint \mathcal{D} \delta x \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2} \delta x(s) \cdot N(s, s') \cdot \delta x(s') + b(s) \cdot \delta x(s) \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

Der erste Faktor entspricht dabei wieder der klassischen Wirkung im Exponenten. Mit Gleichung (A.40), (A.41) erhalten wir dafür

$$\begin{aligned} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{\text{kl}} \right] &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(b(s) \cdot \frac{x' \sin[\omega(t'' - s)] + x'' \sin[\omega(s - t')]}{\sin[\omega(t'' - t')]} \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{m\omega}{2 \sin[\omega(t'' - t')]} \{ (x''^2 + x'^2) \cos[\omega(t'' - t')] - 2x'x'' \} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

Für die beiden speziellen Randbedingungen $x' = \pm x''$ vereinfacht sich der Ausdruck für die klassische Wirkung analog zu Gleichung (A.42) bzw. (A.43).

Klassische Wirkung in Realzeit

Die klassische Bewegungsgleichung zu diesem Problem besitzt die Form

$$N(s, s') \cdot x_{\text{kl}}(s') = b(s), \quad (\text{A.52})$$

wobei die klassische Lösung formal wieder durch

$$x_{\text{kl}}(s) = x^h(s) - N^{-1}(s, s') \cdot b(s'), \quad N(s, s') \cdot x^h(s') = 0 \quad (\text{A.53})$$

gegeben ist. Damit finden wir den klassischen Beitrag der Wirkung,

$$\begin{aligned} S_{\text{kl}} &= -\frac{1}{2} b(s) \cdot N^{-1}(s, s') \cdot b(s') \\ &+ \frac{m\omega}{2 \sin[\omega(t'' - t')]} \left\{ (x''^2 + x'^2) \cos[\omega(t'' - t')] - 2x'x'' \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.54})$$

Quadratische Ergänzung und partikuläre Lösung $x^p(s)$:

Den zweiten Faktor in (A.50) kann man nun quadratisch ergänzen. Dazu entwickeln wir N und N^{-1} nach den Eigenfunktionen (A.47) analog zu Gleichung (A.25), (A.26) mit der Einschränkung $\nu_l^2 \neq \omega^2$ aus Gleichung (A.40)

für N^{-1} ,

$$N(s, s') = \sum_{l=1}^{\infty} \lambda_l \langle s | \lambda_l \rangle \langle \lambda_l | s' \rangle, \quad (\text{A.55})$$

$$N^{-1}(s, s') = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_l} \langle s | \lambda_l \rangle \langle \lambda_l | s' \rangle \quad (\text{A.56})$$

$$= \frac{2}{t'' - t'} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\sin[\nu_l(t'' - s)] \sin[\nu_l(s' - t'')]}{m(\nu_l^2 - \omega^2)}. \quad (\text{A.57})$$

Die Summe über gerade l stellt die periodische Fortsetzung dar, während die Summe über ungerade l der antiperiodischen Fortsetzung entspricht. Wie im Imaginärzeitformalismus muss beachtet werden, dass die obige Darstellung nur für die Anwendung auf Funktionen aus \mathcal{G}_R gilt, da $\sum_l |\lambda_l\rangle \langle \lambda_l| = 1_{\mathcal{G}_R}$ der Identität im Raum \mathcal{G}_R entspricht und für allgemeinere Funktionenräume wieder einen Projektor auf den Unterraum \mathcal{G}_R darstellt.

Die partikuläre Lösung finden wir nun mit Hilfe dieses inversen Integralkernelns N^{-1} ,

$$x^p(s) = N^{-1}(s, s') \cdot b(s'). \quad (\text{A.58})$$

Die Summation in Gleichung (A.56) kann nun ähnlich wie im Imaginärzeitfall explizit durchgeführt werden, wobei die Fallunterscheidung des Vorzeichens von $s - s'$ etwas mehr Mühe bereitet. Als Resultat erhält man den per Konstruktion in $s - s'$ symmetrischen Integralkern

$$\begin{aligned} N^{-1}(s, s') &= \Theta(s - s') \frac{\sin[\omega(t'' - s)] \sin[\omega(s' - t'')]}{m\omega \sin[\omega(t'' - t')]} \\ &+ \Theta(s' - s) \frac{\sin[\omega(t'' - s')] \sin[\omega(s - t'')]}{m\omega \sin[\omega(t'' - t')]} . \end{aligned} \quad (\text{A.59})$$

Wie wir schon im Imaginärzeitformalismus festgestellt haben, kann das verbleibende Pfadintegral über die Quantenfluktuationen $\mathcal{D}\delta x$ nicht naiverweise über die Determinante des entsprechenden Operators ausgedrückt werden. Hier hilft wiederum der Ausweg über die diskrete Darstellung des Pfadintegrals und der Grenzwertbildung am Ende der Rechnung. Für Zeiten $t < \pi/\omega$ erhält man

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar}} \sqrt{\frac{\omega}{\sin[\omega(t'' - t')]} . \quad (\text{A.60})$$

Als Besonderheit tritt im Realzeitfall das Phänomen der Kaustik auf: Beim Durchlaufen jedes Zeitabschnittes $T = \pi/\omega$ tritt ein zusätzlicher Phasen-

faktor $e^{-i\pi/2}$ auf, da das Argument der Wurzel negativ wird¹. Interessanterweise kann dies auch durch eine Regularisierung $\omega \rightarrow \omega - i\epsilon$ im Limes $\epsilon \rightarrow 0^+$ im obigen Ausdruck erreicht werden. Diese Art der Regularisierung trat schon ganz zu Beginn der Betrachtung vom gaußschen Integralen in Gleichung (1.159) auf.

Zusammenfassend erhalten wir den Realzeitpropagator des linear gekoppelten harmonischen Oszillators (A.37) unter Verwendung des Beitrags der klassischen Lösung (A.51),

$$\begin{aligned} \langle x'' | U(t'', t') | x' \rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t'' - t')]} } \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(b(s) \cdot \frac{x' \sin[\omega(t'' - s)] + x'' \sin[\omega(s - t')]}{\sin[\omega(t'' - t')]} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{m\omega}{2 \sin[\omega(t'' - t')]} \{ (x''^2 + x'^2) \cos[\omega(t'' - t')] - 2x'x'' \} \right) \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} b(s) \cdot N^{-1}(s, s') \cdot b(s') \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.61})$$

Im Grenzfall verschwindender Kopplung, $b \rightarrow 0$ geht dieser Ausdruck in die auch unter dem Namen Feynman-Soriau Formel bekannte Form über,

$$\begin{aligned} \langle x'' | U(t'', t') | x' \rangle |_{b=0} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \hbar \sin[\omega(t'' - t')]} } \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin[\omega(t'' - t')]} \{ (x''^2 + x'^2) \cos[\omega(t'' - t')] - 2x'x'' \} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.62})$$

Ein weiterer Spezialfall stellt eine explizit zeitunabhängige Störung dar. Wir werden dies im folgenden nutzen, um den Propagator für ein Teilchen im homogenen Gravitationsfeld zu berechnen. Dazu führen wir den Limes $\omega \rightarrow 0$ durch und setzen die externe Kraft $b(s) = -mg$. Wir erhalten dadurch den Propagator zu dem quantenmechanischen System

$$H = \frac{p^2}{2m} + mgx. \quad (\text{A.63})$$

Für die beiden Integrationen in Gleichung (A.61) finden wir

$$\begin{aligned} &\int_{t'}^{t''} ds \frac{x' \sin[\omega(t'' - s)] + x'' \sin[\omega(s - t')]}{\sin[\omega(t'' - t')]} \\ &= \frac{(x' + x'') \tan\left[\frac{\omega}{2}(t'' - t')\right]}{\omega} \xrightarrow{\omega \rightarrow 0} \frac{(x' + x'')(t'' - t')}{2}, \end{aligned} \quad (\text{A.64})$$

¹ Zur Entscheidung des Vorzeichens des Phasenfaktors bedarf es einer genaueren Betrachtung

und entsprechend für $N^{-1}(s, s')$,

$$\begin{aligned}
& \int_{t'}^{t''} ds ds' N^{-1}(s, s') \\
&= \Theta(t'' - t') \frac{2 \tan \left[\frac{\omega}{2}(t'' - t') \right] - (t'' - t')\omega}{m\omega^3} \\
&+ \Theta(t' - t'') \frac{2 \tan \left[\frac{\omega}{2}(t'' - t') \right] - 2 \sin [\omega(t'' - t')] + (t'' - t')\omega}{m\omega^3} \\
&\xrightarrow{\omega \rightarrow 0} \Theta(t'' - t') \frac{(t'' - t')^3}{12m} + \Theta(t' - t'') \frac{5(t'' - t')^3}{12m}. \tag{A.65}
\end{aligned}$$

Mit diesen Vorüberlegungen finden wir für den Propagator des freien Teilchens der Masse m im homogenen Gravitationsfeld aus Gleichung (A.61) das Matrixelement in der Ortsdarstellung [59],

$$\begin{aligned}
\langle x'' | U(t'', t') | x' \rangle &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t'' - t')}} \exp \left[\frac{i m (x'' - x')^2}{\hbar 2 (t'' - t')} \right. \\
&\quad \left. - \frac{i m g}{\hbar 2} (t'' - t')(x'' + x') - \frac{i m g^2}{\hbar 24} (t'' - t')^3 \right]. \tag{A.66}
\end{aligned}$$

Der Ausdruck im Exponenten entspricht (i/\hbar) mal der Wirkung für die klassische Lösung, welche der Bewegungsgleichung $\ddot{x} = -g$ genügt, und mit den geforderten Randbedingungen die Form

$$x = x' + v_0(t - t') - \frac{1}{2}g(t - t')^2, \tag{A.67}$$

$$\dot{x} = v_0 - g(t - t'), \tag{A.68}$$

$$v_0 = \frac{g}{2}(t'' - t') + \frac{x'' - x'}{t'' - t'} \tag{A.69}$$

annimmt.

Eine weitere Möglichkeit der Verifizierung bietet die Anwendung der Zassenhaus Gleichung [61], welche ähnlich der Baker-Campbell-Hausdorff Gleichung eine Entwicklung der Form

$$e^{T+V} = e^T e^V e^{X_2} e^{X_3} \dots, \tag{A.70}$$

$$X_2 = -\frac{1}{2}[T, V], \tag{A.71}$$

$$X_3 = \frac{1}{3!} \left([T, [T, V]] + 2[V, [T, V]] \right), \tag{A.72}$$

$$X_4 = \dots$$

des Propagators liefert. Im hier betrachteten Fall eines Teilchens in homogenem Gravitationsfeld verschwinden alle Terme X_n für $n \geq 4$.

Zum weiteren Verständnis des obigen Propagators gehen wir in den Impulsraum. Wir finden unter Verwendung der Vollständigkeitsrelation für die Ortseigenfunktionen

$$\begin{aligned} \langle p'' | U(t'', t') | p' \rangle &= \int dx'' dx' \langle p'' | x'' \rangle \langle x'' | U(t'', t') | x' \rangle \langle x' | p' \rangle \\ &= \delta \left[p'' - p' + mg(t'' - t') \right] \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \frac{t'' - t'}{2m} \frac{p''^3 - p'^3}{3(p'' - p')} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.73})$$

Der Faktor $\frac{p''^3 - p'^3}{3(p'' - p')}$ in der obigen Gleichung entspricht dem Mittelwert

$$\frac{1}{p'' - p'} \int_{p'}^{p''} dp p^2. \quad (\text{A.74})$$

Eine Diskussion des Propagators in der Ortsdarstellung (A.66) und Impulsdarstellung (A.73) findet sich in [60].

Im Grenzfall einer verschwindenden Gravitationsbeschleunigung $g \rightarrow 0$ finden wir sofort den wohlbekannteren Propagator eines freien Teilchens im Impulsraum

$$\langle p'' | U(t'', t') | p' \rangle = \delta \left[p'' - p' \right] \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \frac{t'' - t'}{2m} p'^2 \right]. \quad (\text{A.75})$$

Den wohlbekannteren Propagator eines freien Teilchens im Ortsraum findet man direkt aus Gleichung (A.66), indem die Kopplungskonstante $g = 0$ gesetzt wird.

Imaginärzeit-Propagator

Bei der Beschreibung der reduzierten Dichtematrix wird in dieser Arbeit auch der Imaginärzeit Propagator

$$\begin{aligned} \langle x'' | U(-i\hbar\beta, 0) | x' \rangle &= \langle x'' | U^{(E)}(\hbar\beta) | x' \rangle = \langle x'' | e^{-\beta H} | x' \rangle \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh[\omega\hbar\beta]}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \left(b(\sigma) \cdot \frac{x' \sinh[\omega(\hbar\beta - \sigma)] + x'' \sinh[\omega\sigma]}{\sinh[\omega\hbar\beta]} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{m\omega}{2 \sinh[\omega\hbar\beta]} \{ (x''^2 + x'^2) \cosh[\omega\hbar\beta] - 2x'x'' \} \right) \right] \\ &\quad \times \exp \left[\frac{1}{\hbar} \frac{1}{2} b(\sigma) \cdot iN^{-1}(-i\sigma, -i\sigma') \cdot b(\sigma') \right] \end{aligned}$$

verwendet. Diesen allgemeinen Ausdruck erhalten wir durch die Wick-Rotation $t \rightarrow -i\sigma$ und im speziellen durch $t'' \rightarrow -i\hbar\beta$, $t' \rightarrow 0$, also die analytische Fortsetzung des weiter unten abgeleiteten Realzeitpropagators (A.61) Dies

ist möglich, da die Randbedingungen dem allgemeinen Fall des Realzeitpropagators entsprechen und nicht wie in der Zustandssumme auf periodische Pfade beschränkt sind. Weiterhin muß der Vorzeichenwechsel der euklidischen Wirkung mitberücksichtigt werden, welcher durch den Übergang des Integrationsmaßes von dt nach $-id\sigma$ stattfindet. Zu beachten ist hier insbesondere, dass der Imaginärzeitkern $iN^{-1}(-i\sigma, -i\sigma')$ nicht $K^{-1}(\sigma, \sigma')$ aus Gleichung (A.9) entspricht, was wie schon ausführlich diskutiert, an den allgemeineren Randbedingungen des zugrunde liegenden Funktionenraumes liegt. Unter Verwendung des Realzeitkernes (A.59) finden wir

$$\begin{aligned} iN^{-1}(-i\sigma, -i\sigma') &= \Theta(\sigma - \sigma') \frac{\sinh[\omega(\hbar\beta - \sigma)] \sinh[\omega\sigma']}{m\omega \sinh[\omega\hbar\beta]} \\ &+ \Theta(\sigma' - \sigma) \frac{\sinh[\omega(\hbar\beta - \sigma')] \sinh[\omega\sigma]}{m\omega \sinh[\omega\hbar\beta]}. \end{aligned} \quad (\text{A.76})$$

Die Zustandssumme (A.28) ergibt sich aus dem Imaginärzeitpropagator durch Integration über die gemeinsame Anfangs- und Endkoordinate,

$$Z[b] = \int dx \langle x|U^{(\text{E})}(\hbar\beta)|x\rangle. \quad (\text{A.77})$$

Unter Verwendung der beiden Relationen für den Propagator mit $x' = x'' = x$

$$\sinh[\omega\hbar\beta - \omega\sigma] + \sinh[\omega\sigma] = 2 \cosh\left[\frac{\omega\hbar\beta}{2} - \omega\sigma\right] \sinh\left[\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right], \quad (\text{A.78})$$

$$\cosh[\omega\hbar\beta] - 1 = 2 \sinh^2\left[\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right], \quad (\text{A.79})$$

ergibt sich der Propagator

$$\begin{aligned} \langle x|U^{(\text{E})}(\hbar\beta)|x\rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh[\omega\hbar\beta]}} \exp\left[\frac{1}{2\hbar} b(\sigma) \cdot iN^{-1}(-i\sigma, -i\sigma') \cdot b(\sigma')\right] \\ &\times \exp\left[\frac{1}{\hbar} \left(b(\sigma) \cdot \frac{2 \cosh\left[\frac{\omega\hbar\beta}{2} - \omega\sigma\right] \sinh\left[\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right]}{\sinh[\omega\hbar\beta]} x \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - m\omega \tanh\left[\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right] x^2\right)\right] \end{aligned} \quad (\text{A.80})$$

und somit finden wir nach Ausführen der gaußschen Integration über x in Gleichung (A.77) das Resultat für die Zustandssumme (A.2),

$$\begin{aligned} \frac{Z[b]}{Z[0]} &= \exp\left[\frac{1}{2\hbar} b(\sigma) \cdot \left(iN^{-1} + \frac{\cosh\left[\frac{\omega\hbar\beta}{2} - \omega\sigma\right] \cosh\left[\frac{\omega\hbar\beta}{2} - \omega\sigma'\right]}{m\omega \sinh[\omega\hbar\beta]}\right) \cdot b(\sigma')\right], \\ &= \exp\left[\frac{1}{2\hbar} b(\sigma) \cdot \frac{\cosh[\omega(\hbar\beta/2 - |\sigma - \sigma'|)]}{2m\omega \sinh(\omega\hbar\beta/2)} \cdot b(\sigma')\right], \end{aligned} \quad (\text{A.81})$$

$$= \exp\left[\frac{1}{2\hbar} b(\sigma) \cdot K^{-1}(|\sigma - \sigma'|) \cdot b(\sigma')\right] \quad (\text{A.82})$$

mit der Zustandssumme (A.32) für den freien harmonischen Oszillator ($b = 0$)

$$\begin{aligned} Z[0] &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh[\omega\hbar\beta]}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} m\omega \tanh \left[\frac{\omega\hbar\beta}{2} \right] x^2 \right], \\ &= \frac{1}{2 \sinh \left[\frac{\omega\hbar\beta}{2} \right]} \end{aligned} \quad (\text{A.83})$$

und dem Imaginärzeitkern $K^{-1}(\sigma, \sigma')$ aus Gleichung (A.9), wobei hier automatisch der für die Integration notwendige symmetrisierte Kern $K^{-1}(|\sigma - \sigma'|)$ für den erweiterten Definitionsbereich $\sigma - \sigma' \in [-\hbar\beta, \hbar\beta]$ entsteht. Sofern $b(\tau) = b$ konstant ist, erhalten wir die Zustandssumme

$$Z[b] = Z[0] \exp \left[\frac{\beta b^2}{2m\omega^2} \right]. \quad (\text{A.84})$$

Den Zusatzterm findet man auch direkt durch eine quadratische Ergänzung des harmonischen Potenzials.

Die Imaginärzeit-Erwartungswerte aus Abschnitt 1.4.12 werden durch

$$\langle x(\tau) \rangle = -\hbar \frac{\delta}{\delta b(\tau)} \frac{Z[b]}{Z[0]} = -K^{-1}(|\tau - \sigma|) \cdot b(\sigma) \quad (\text{A.85})$$

und entsprechend für die Zweipunkt-Korrelationsfunktion durch

$$\langle x(\tau)x(\tau') \rangle = \hbar^2 \frac{\delta}{\delta b(\tau)} \frac{\delta}{\delta b(\tau')} \frac{Z[b]}{Z[0]} = -\hbar K^{-1}(|\tau - \tau'|) \quad (\text{A.86})$$

reproduziert. Im Falle einer konstanten Kraft finden wir als Erwartungswert $\langle x \rangle = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle x(\tau) \rangle$ den Verschiebungsterm $b/(m\omega^2)$. Als Energieerwartungswert erhalten wir

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z[b]} \frac{\partial}{\partial \beta} Z[b] = \frac{\hbar\omega}{2} \coth \left[\frac{\omega\hbar\beta}{2} \right] - \frac{b^2}{2m\omega^2}. \quad (\text{A.87})$$

Extraktion der Energieeigenwerte aus dem Propagator

In der bekannten Operatorschreibweise erhalten wir für den Propagator

$$\langle x'' | e^{-iHT/\hbar} | x' \rangle = \sum_n \varphi_n^*(x'') \varphi_n(x') e^{-iE_n T/\hbar}, \quad (\text{A.88})$$

wobei $\varphi_n(x) = \langle x | n \rangle$ die Eigenfunktion von H mit Eigenwert E_n ist. Betrachten wir nun die Fouriertransformierte zu $G(T) = \int dx \langle x | e^{-iHT/\hbar} | x \rangle$,

$$\tilde{G}(E) = \int_0^{\infty} dT e^{iET/\hbar} G(T), \quad (\text{A.89})$$

$$= \sum_n \hbar \delta_+(E - E_n) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{i\hbar}{2\pi} \sum_n \frac{1}{E - E_n + i\epsilon}. \quad (\text{A.90})$$

Die Integration beschränkt sich wegen der Kausalität des Propagators auf den positiven Bereich. Damit besitzt die Funktion $\tilde{G}(E)$ Information über die Eigenwerte des Systems in Form von einfachen Polen. Für die spektrale Zustandsdichte der Energieeigenwerte $\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$ erhalten wir mit der Identität (1.74)

$$\rho(E) = -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Re}[\tilde{G}(E)] . \quad (\text{A.91})$$

Im euklidischen Fall finden wir so im Limes $\beta \rightarrow 0$ in einfacher Weise die Grundzustandsenergie,

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} G^{(E)}(\hbar\beta) = \lim_{\beta \rightarrow 0} \sum_n \int dx \varphi_n^*(x) \varphi_n(x) e^{-\beta E_n} = e^{-\beta E_0} . \quad (\text{A.92})$$

A.2 Ausreduktion der Anfangs- und Endkoordinate in der Realzeitdarstellung

Für die Zeitentwicklung der reduzierten Dichtematrix $\rho_R \equiv \rho_R(q_f, q'_f | t_f)$ erhalten wir wie in Abschnitt 1.4.15 aufgezeigt, die explizite Darstellung

$$\begin{aligned} \rho_R &= \int_{-\infty}^{\infty} dq_i dq'_i \rho_S(q_i, q'_i | t_i) \int_{q_i}^{q_f} \mathcal{D}q \int_{q'_i}^{q'_f} \mathcal{D}q' \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_S[q] - S_S[q']) \right] \quad (\text{A.93}) \\ &\times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} M\gamma(0) (q(t) \cdot q(t) - q'(t) \cdot q'(t)) \right] \\ &\times \exp \left[-i \frac{\hbar}{2} (q(t) \cdot N^{-1}(t, t') \cdot q(t') - q'(t) \cdot N^{-1}(t, t') \cdot q'(t')) \right] \\ &\times \prod_{\alpha=1}^N \left[\frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2\pi \hbar \sin[\omega_\alpha(t_f - t_i)]} \left(\frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2\pi \hbar \sinh[\omega_\alpha \hbar \beta]} \right)^{1/2} 2 \sinh[\omega_\alpha \hbar \beta / 2] \right] \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dx_{f,\alpha} dx_{i,\alpha} dx'_{i,\alpha} \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(c_\alpha q(t) \cdot \frac{x_{i,\alpha} \sin[\omega_\alpha(t_f - t)] + x_{f,\alpha} \sin[\omega_\alpha(t - t_i)]}{\sin[\omega_\alpha(t_f - t_i)]} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2 \sin[\omega_\alpha(t_f - t_i)]} \left\{ (x_{f,\alpha}^2 + x_{i,\alpha}^2) \cos[\omega_\alpha(t_f - t_i)] - 2x_{f,\alpha} x_{i,\alpha} \right\} \right) \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(c_\alpha q'(t) \cdot \frac{x'_{i,\alpha} \sin[\omega_\alpha(t_f - t)] + x_{f,\alpha} \sin[\omega_\alpha(t - t_i)]}{\sin[\omega_\alpha(t_f - t_i)]} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2 \sin[\omega_\alpha(t_f - t_i)]} \left\{ (x_{f,\alpha}^2 + x'_{i,\alpha}{}^2) \cos[\omega_\alpha(t_f - t_i)] - 2x_{f,\alpha} x'_{i,\alpha} \right\} \right) \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left(\frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2 \sinh[\omega_\alpha \hbar \beta]} \left\{ (x_{i,\alpha}^2 + x'_{i,\alpha}{}^2) \cosh[\omega_\alpha \hbar \beta] - 2x_{i,\alpha} x'_{i,\alpha} \right\} \right) \right] . \end{aligned}$$

Der inverse Integralkern $N^{-1}(t, t')$ wurde in Gleichung (1.550) definiert und besitzt die explizit symmetrische Form $N^{-1}(t, t') = N^{-1}(t', t)$ mit der folgenden Darstellung

$$N^{-1}(t, t') = \Theta(t - t') \sum_{\alpha=1}^N c_{\alpha}^2 \frac{\sin[\omega_{\alpha}(t_f - t)] \sin[\omega_{\alpha}(t' - t_i)]}{m_{\alpha}\omega_{\alpha} \sin[\omega_{\alpha}(t_f - t_i)]} \quad (\text{A.94})$$

$$+ \Theta(t' - t) \sum_{\alpha=1}^N c_{\alpha}^2 \frac{\sin[\omega_{\alpha}(t_f - t')] \sin[\omega_{\alpha}(t - t_i)]}{m_{\alpha}\omega_{\alpha} \sin[\omega_{\alpha}(t_f - t_i)]}.$$

Aufgrund dieser Symmetrie kann das Doppelintegral in Gleichung (A.93) auch als zeitgeordnetes Integral dargestellt werden, wodurch zusätzlich ein Faktor 2 entsteht. Der Term $M\gamma(0)$ wird über Gleichung (1.30) definiert und ist identisch zu der Summe $\sum_{\alpha} c_{\alpha}^2 / (2m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2)$. Die Notation

$$a(t) \cdot b(t) = \int_{t_i}^{t_f} dt a(t)b(t) \quad (\text{A.95})$$

entspricht dabei der Konvention, welche in Kapitel 1.4.6 eingeführt wurde.

Der Ausdruck (A.93) für ρ_{R} reduziert sich nun erheblich, wenn wir die drei gaußschen Integrationen über die gemeinsame Endkoordinate $x_{f,\alpha}$ und über die beiden Anfangskoordinaten $x_{i,\alpha}$ und $x'_{i,\alpha}$ durchführen. Da sich der im Exponenten quadratische Anteil von $x_{f,\alpha}$ im obigen Ausdruck identisch weghebt, erhalten wir nach der Integration eine Delta-Funktion der Gestalt

$$\frac{m_{\alpha}\omega_{\alpha}}{2\pi\hbar \sin[\omega_{\alpha}(t_f - t_i)]} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{f,\alpha} \quad (\text{A.96})$$

$$\times \exp \left[i x_{f,\alpha} \left(\frac{c_{\alpha} \sin[\omega_{\alpha}(t - t_i)]}{\hbar \sin[\omega_{\alpha}(t_f - t_i)]} \cdot [q(t) - q'(t)] - \frac{m_{\alpha}\omega_{\alpha}}{\hbar \sin[\omega_{\alpha}(t_f - t_i)]} [x_{i,\alpha} - x'_{i,\alpha}] \right) \right]$$

$$= \delta \left(x_{i,\alpha} - x'_{i,\alpha} - \frac{c_{\alpha} \sin[\omega_{\alpha}(t - t_i)]}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \cdot [q(t) - q'(t)] \right).$$

Für den Fall $q(t) \equiv q'(t)$ erhalten wir damit gerade die Bedingung für das Produkt über den Vorwärts- und Rückwärtspropagator bei Ankopplung einer identischen Störung $q(t)$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_{f,\alpha} \langle x_{i,\alpha} | U(t_f, t_i) | x_{f,\alpha} \rangle \langle x_{f,\alpha} | U^{-1}(t_f, t_i) | x'_{i,\alpha} \rangle = \delta(x_{i,\alpha} - x'_{i,\alpha}). \quad (\text{A.97})$$

Wegen der Abhängigkeit der Deltafunktion von $x_{i,\alpha} - x'_{i,\alpha}$ bietet sich eine Variablentransformation auf Schwerpunkts- und Relativkoordinaten mit

$$r_{i,\alpha} = (x_{i,\alpha} + x'_{i,\alpha})/2, \quad (\text{A.98})$$

$$y_{i,\alpha} = (x_{i,\alpha} - x'_{i,\alpha}) \quad (\text{A.99})$$

an. Die Funktionaldeterminante dieser Transformation liefert eine Eins. Die Integration über das Set $\{y_{i,\alpha}\}$ wird trivial durch die Einschränkung der Deltafunktionen aus Gleichung (A.96). Mit dem funktionalen Zusammenhang

$$x_{i,\alpha} = r_{i,\alpha} + y_{i,\alpha}/2, \quad (\text{A.100})$$

$$x'_{i,\alpha} = r_{i,\alpha} - y_{i,\alpha}/2, \quad (\text{A.101})$$

$$x_{i,\alpha} x'_{i,\alpha} = r_{i,\alpha}^2 - y_{i,\alpha}^2/4 \quad (\text{A.102})$$

$$x_{i,\alpha}^2 + x'_{i,\alpha}{}^2 = 2r_{i,\alpha}^2 + y_{i,\alpha}^2/2 \quad (\text{A.103})$$

$$x_{i,\alpha}^2 - x'_{i,\alpha}{}^2 = 2r_{i,\alpha} y_{i,\alpha} \quad (\text{A.104})$$

lässt sich der Ausdruck für ρ_R leicht umschreiben, wobei wir nun ebenfalls die Systemkoordinate $q(t)$ und $q'(t)$ durch die Schwerpunktskoordinate $r(t) = [q(t) + q'(t)]/2$ und die Relativkoordinate $y(t) = q(t) - q'(t)$ ersetzen. Wir erhalten dadurch den Ausdruck

$$\begin{aligned} \rho_R &= \int_{-\infty}^{\infty} dq_i dq'_i \rho_S(q_i, q'_i | t_i) \quad (\text{A.105}) \\ &\times \int \mathcal{D}r \mathcal{D}y \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_S[r + y/2] - S_S[r - y/2] \right) \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} 2M\gamma(0) r(t) \cdot y(t) \right] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} y(t) \cdot N^{-1}(t, t') \cdot r(t') \right] \\ &\times \prod_{\alpha=1}^N \left[\left(\frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2\pi \hbar \sinh[\omega_\alpha \hbar \beta]} \right)^{1/2} 2 \sinh[\omega_\alpha \hbar \beta / 2] \int_{-\infty}^{\infty} dr_{i,\alpha} dy_{i,\alpha} \right. \\ &\times \delta \left(y_{i,\alpha} - \frac{c_\alpha \sin[\omega_\alpha (t - t_i)]}{m_\alpha \omega_\alpha} \cdot y(t) \right) \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{c_\alpha \sin[\omega_\alpha (t_f - t)]}{\sin[\omega_\alpha (t_f - t_i)]} \cdot \left(y(t) r_{i,\alpha} + r(t) y_{i,\alpha} \right) \right] \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} m_\alpha \omega_\alpha \cot[\omega_\alpha (t_f - t_i)] r_{i,\alpha} y_{i,\alpha} \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left(m_\alpha \omega_\alpha \coth[\omega_\alpha \hbar \beta] \left\{ r_{i,\alpha}^2 + \frac{y_{i,\alpha}^2}{4} \right\} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{m_\alpha \omega_\alpha}{\sinh[\omega_\alpha \hbar \beta]} \left\{ r_{i,\alpha}^2 - \frac{y_{i,\alpha}^2}{4} \right\} \right) \right]. \end{aligned}$$

Die Integration über die Koordinate $y_{i,\alpha}$ liefert nun wegen der Einschränkung durch die Delta-Funktion aus Gleichung (A.96) die Form

$$\begin{aligned} \rho_R &= \int_{-\infty}^{\infty} dq_i dq'_i \rho_S(q_i, q'_i | t_i) \quad (\text{A.106}) \\ &\times \int \mathcal{D}r \mathcal{D}y \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_S[r + y/2] - S_S[r - y/2] \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} 2M\gamma(0) r(t) \cdot y(t) \right] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} y(t) \cdot N^{-1}(t, t') \cdot r(t') \right] \\
& \times \prod_{\alpha=1}^N \left[\left(\frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2\pi\hbar \sinh[\omega_\alpha \hbar\beta/2]} \right)^{1/2} 2 \sinh[\omega_\alpha \hbar\beta/2] \int_{-\infty}^{\infty} dr_{i,\alpha} \right. \\
& \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{c_\alpha \sin[\omega_\alpha(t_f - t)]}{\sin[\omega_\alpha(t_f - t_i)]} \cdot y(t) r_{i,\alpha} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + r(t) \cdot \frac{c_\alpha^2 \sin[\omega_\alpha(t_f - t)] \sin[\omega_\alpha(t' - t_i)]}{m_\alpha \omega_\alpha \sin[\omega_\alpha(t_f - t_i)]} \cdot y(t') \right) \right] \\
& \times \exp \left[+\frac{i}{\hbar} \left(c_\alpha \cot[\omega_\alpha(t_f - t_i)] r_{i,\alpha} \sin[\omega_\alpha(t - t_i)] \cdot y(t) \right) \right] \\
& \times \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left(m_\alpha \omega_\alpha \tanh[\omega_\alpha \hbar\beta/2] r_{i,\alpha}^2 \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + y(t) \cdot \frac{c_\alpha^2 \coth[\omega_\alpha \hbar\beta/2] \sin[\omega_\alpha(t - t_i)] \sin[\omega_\alpha(t' - t_i)]}{4m_\alpha \omega_\alpha} \cdot y(t') \right) \right] \Big].
\end{aligned}$$

Betrachten wir zuerst Terme der Gestalt $r(t) \cdot [\dots] \cdot y(t')$. Wir erhalten, da $N^{-1}(t, t')$ symmetrisch ist und somit die Integration vertauscht werden kann,

$$\exp \left[-\frac{i}{\hbar} r(t) \cdot \left(N^{-1}(t, t') - \sum_{\alpha} \frac{c_\alpha^2 \sin[\omega_\alpha(t_f - t)] \sin[\omega_\alpha(t' - t_i)]}{m_\alpha \omega_\alpha \sin[\omega_\alpha(t_f - t_i)]} \right) \cdot y(t') \right]. \quad (\text{A.107})$$

Mit der Definition (A.94) für den symmetrischen Kern $N^{-1}(t, t')$ finden wir nun das überraschende Ergebnis für Gleichung (A.107),

$$\exp \left[\frac{i}{\hbar} y(t) \cdot N_{\text{R}}^{-1}(t, t') \cdot r(t') \right], \quad (\text{A.108})$$

wobei nun die Kopplung durch eine retardierte Funktion der Gestalt

$$N_{\text{R}}^{-1}(t, t') = \Theta(t - t') \sum_{\alpha=1}^N c_\alpha^2 \left[\frac{\sin[\omega_\alpha(t_f - t)] \sin[\omega_\alpha(t' - t_i)]}{m_\alpha \omega_\alpha \sin[\omega_\alpha(t_f - t_i)]} \right. \quad (\text{A.109}) \\
\left. - \frac{\sin[\omega_\alpha(t_f - t')] \sin[\omega_\alpha(t - t_i)]}{m_\alpha \omega_\alpha \sin[\omega_\alpha(t_f - t_i)]} \right],$$

$$= \Theta(t - t') \sum_{\alpha=1}^N \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha} \sin[\omega_\alpha(t - t')], \quad (\text{A.110})$$

stattfindet. Man beachte, dass wir in Gleichung (A.108) die Integrationsreihenfolge von r und y wieder in die ursprüngliche Form getauscht haben.

Dies ist die Signatur von Dissipation; da bei Dissipation die Invarianz unter der Zeitspiegelung $t \rightarrow -t$ gebrochen wird, muss dies in der Ausintegration der Badfreiheitsgrade zutage kommen. Das Gesamtsystem aus System

und Bad zeigt keine Dissipation, wohl aber die effektive Beschreibung des an das Bad gekoppelte Systems.

Nun können wir die letzte gaußsche Integration über $r_{i,\alpha}$ durchführen. Der in $r_{i,\alpha}$ lineare Term vereinfacht sich, wodurch wir das folgende gaußsche Integral erhalten,

$$\begin{aligned} & \prod_{\alpha=1}^N \left[\left(\frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2\pi \hbar \sinh[\omega_\alpha \hbar \beta / 2]} \right)^{1/2} 2 \sinh[\omega_\alpha \hbar \beta / 2] \int_{-\infty}^{\infty} dr_{i,\alpha} \right. \\ & \quad \times \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{2m_\alpha \omega_\alpha \tanh[\omega_\alpha \hbar \beta / 2]}{\hbar} \right) r_{i,\alpha}^2 + \frac{ic_\alpha}{\hbar} \cos[\omega_\alpha(t - t_i)] \cdot y(t) r_{i,\alpha} \right] \\ & = \prod_{\alpha=1}^N \exp \left[-\frac{1}{\hbar} y(t) \cdot \frac{c_\alpha^2 \coth[\omega_\alpha \hbar \beta / 2]}{4m_\alpha \omega_\alpha} \cos[\omega_\alpha(t - t')] \cdot y(t') \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.111})$$

Durch diese letzte Integration heben sich alle noch vorhandenen Vorfaktoren gerade weg.

Zusammenfassend erhalten wir für die Zeitentwicklung der reduzierten Dichtematrix

$$\begin{aligned} \rho_R &= \rho_R(q_f, q'_f | t_f) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_i dq'_i \rho_S(q_i, q'_i | t_i) \\ & \quad \times \int \mathcal{D}r \mathcal{D}y \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_S[r + y/2] - S_S[r - y/2] \right) \right] \\ & \quad \times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} 2M\gamma(0) r(t) \cdot y(t) \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} y(t) \cdot N_R^{-1}(t, t') \cdot r(t') \right] \\ & \quad \times \prod_{\alpha=1}^N \exp \left[-\frac{1}{\hbar} y(t) \cdot \frac{c_\alpha^2 \coth[\omega_\alpha \hbar \beta / 2]}{4m_\alpha \omega_\alpha} \cos[\omega_\alpha(t - t')] \cdot y(t') \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.112})$$

Das Produkt über α kann nun als Summe im Exponenten geschrieben werden und betrifft nun nur noch den Integralkern, so dass dieser nun wie gewohnt mit Hilfe der spektralen Dichte ausgedrückt werden kann,

$$\sum_{\alpha} \frac{c_\alpha^2 \coth[\omega_\alpha \hbar \beta / 2]}{4m_\alpha \omega_\alpha} \cos[\omega_\alpha(t - t')], \quad (\text{A.113})$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \coth \left[\frac{\omega \hbar \beta}{2} \right] \cos[\omega(t - t')] = \frac{1}{2} L'(t - t'). \quad (\text{A.114})$$

Im letzten Schritt haben wir die sogenannte Badkorrelationsfunktion $L = L' + iL''$ aus Gleichung (1.566) verwendet. Ebenso drücken wir auch $N_R^{-1}(t, t')$ durch die spektrale Dichte $J(\omega)$ bzw. der Funktion L aus,

$$N_R^{-1}(t, t') = \Theta(t - t') \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \sin[\omega(t - t')], \quad (\text{A.115})$$

$$= -2 \Theta(t - t') L''(t - t') , \quad (\text{A.116})$$

$$= M \partial_{t'} \gamma(t - t') + 2M \gamma(0) \delta(t - t') . \quad (\text{A.117})$$

Die letzte Zeile entspricht der Gleichung (1.29), wo wir den selben Rechenschritt durchgeführt haben, um die Geschwindigkeit \dot{q} der Systemkoordinate zu erhalten. Der symmetrische Realteil von $L(t - t')$ koppelt daher $y(t)$ mit $y(t')$, während der antisymmetrische Imaginärteil von $L(t - t')$ $y(t)$ mit $r(t')$ zu verschiedenen Zeiten koppelt. Wir finden nun die für die Tight-Binding Darstellung wichtige Form der reduzierten Dichtematrix

$$\begin{aligned} \rho_{\text{R}} = \rho_{\text{R}}(q_{\text{f}}, q'_{\text{f}} | t_{\text{f}}) &= \int_{-\infty}^{\infty} dq_i dq'_i \rho_{\text{S}}(q_i, q'_i | t_i) \\ &\times \int \mathcal{D}r \mathcal{D}y \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_{\text{S}}[r + y/2] - S_{\text{S}}[r - y/2] \right) \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} 2M \gamma(0) r(t) \cdot y(t) \right] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} y(t) \cdot 2 \Theta(t - t') L''(t - t') \cdot r(t') \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} y(t) \cdot L'(t - t') \cdot y(t') \right] . \end{aligned} \quad (\text{A.118})$$

Eine Diskussion der physikalischen Bedeutung der einzelnen Terme erfolgt in Abschnitt 1.4.15.

Durch partielle Integration formen wir nun noch analog zum klassischen Fall den Term in Gleichung (A.118) mithilfe der Darstellung (A.117) um, welcher $y(t)$ an $r(t')$ koppelt, also

$$\begin{aligned} y(t) \cdot N_{\text{R}}^{-1}(t, t') \cdot r(t') &= 2M \gamma(0) y(t) \cdot r(t) - M r(t_i) y(t) \cdot \gamma(t - t_i) \\ &\quad - M y(t) \cdot \gamma(t - t') \cdot \dot{r}(t') . \end{aligned} \quad (\text{A.119})$$

In Gleichung (1.30) wurde der klassische Dämpfungskern $\gamma(t - t')$ definiert. Da $\gamma(t - t')$ ebenfalls kausal ist, verschwindet der zweite Randterm der partiellen Integration. Der Term $2M \gamma(0) y(t) \cdot r(t)$ hebt sich nun in Gleichung (A.112) identisch weg. In den Koordinaten r, y erhalten wir somit die Darstellung

$$\begin{aligned} \rho_{\text{R}} &= \int_{-\infty}^{\infty} dq_i dq'_i \rho_{\text{S}}(q_i, q'_i | t_i) \\ &\times \int \mathcal{D}r \mathcal{D}y \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_{\text{S}}[r + y/2] - S_{\text{S}}[r - y/2] \right) \right] \\ &\times \exp \left[-i \frac{M}{\hbar} \left(r(t_i) y(t) \cdot \gamma(t - t_i) + y(t) \cdot \gamma(t - t') \cdot \dot{r}(t') \right) \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} y(t) \cdot L'(t, t') \cdot y(t') \right] . \end{aligned} \quad (\text{A.120})$$

Da der Term $L'(t)$ symmetrisch in t ist und $\gamma(t - t')$ für $t < t'$ identisch verschwindet, können wir die doppelte Zeitintegration in die zeitgeordnete Form

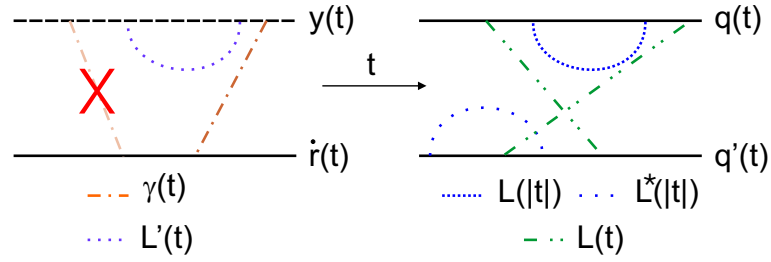


Abbildung A.1: Das linke Bild zeigt die Wechselwirkungen zwischen der klassischen Geschwindigkeit \dot{r} und der Quantenfluktuationskoordinate y , wobei $\dot{r}(t)$ an $y(t')$ nur für Zeiten $t' \geq t$ koppelt. Das rechte Bild zeigt entsprechend die nichtlokale Wechselwirkung zwischen den Pfaden q und q' .

$\int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^t dt'$ überführen, wodurch nur der Term $L'(t)$ in der obigen Gleichung einen Faktor 2 erhält.

Indem wir nun zu den ursprünglichen Koordinaten q und q' zurücktransformieren, finden wir alternativ aus Gleichung (A.118) die Darstellung

$$\begin{aligned} \rho_R &= \int_{-\infty}^{\infty} dq_i dq'_i \rho_S(q_i, q'_i | t_i) \\ &\times \int \mathcal{D}q \mathcal{D}q' \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_S[q] - S_S[q'] \right) \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} M \gamma(0) [q(t) \cdot q(t) - q'(t) \cdot q'(t)] \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \left(q(t) - q'(t) \right) \cdot \left(W(t-t') \cdot q(t') - W^*(t-t') \cdot q'(t') \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.121})$$

Mit $W(t-t')$ haben wir in der obigen Gleichung den komplexen Integralkern

$$W(t-t') = L'(t-t') + 2i \Theta(t-t') L''(t-t') \quad (\text{A.122})$$

eingeführt. Da die Pfadkopplung q an q und analog q' an q' in der letzten Zeile von Gleichung (A.121) nur an den symmetrischen Anteil des Integralkernes $W(t-t')$ koppelt, während die Pfadkopplung der Pfade q an q' nur über den hermiteschen Anteil von $W(t-t')$ stattfindet, können wir diese 4 Faktoren in die geschickte Form

$$\exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \left(q(t) - q'(t) \right) \cdot \left(W(t-t') \cdot q(t') - W^*(t-t') \cdot q'(t') \right) \right] \quad (\text{A.123})$$

$$\begin{aligned} &= \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \left(q(t) \cdot W_s(t-t') \cdot q(t') + q'(t) \cdot W_s^*(t-t') \cdot q'(t') \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2 q'(t) \cdot W_h(t-t') \cdot q(t') \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.124})$$

bringen. Dabei haben wir den symmetrischen Anteil

$$W_s(t-t') = W_s(t'-t) = \frac{W(t-t') + W(t'-t)}{2} = L(|t-t'|) \quad (\text{A.125})$$

und den hermiteschen Anteil

$$W_h(t-t') = W_h^*(t'-t) = \frac{W(t-t') + W^*(t'-t)}{2} = L(t-t') \quad (\text{A.126})$$

von $W(t-t')$ verwendet, wobei sich $L(t-t') = L'(t-t') + iL''(t-t')$ aus einem oben definierten Realteil L' und einem Imaginäranteil L'' zusammensetzt und somit die Standardform aus Gleichung (1.566),

$$L(t-t') = \frac{1}{\pi} \int d\omega J(\omega) \left(\coth \left[\frac{\omega \hbar \beta}{2} \right] \cos[\omega(t-t')] - i \sin[\omega(t-t')] \right) \quad (\text{A.127})$$

annimmt.

Für Zeiten $t < t'$ koppelt in Gleichung (A.121) nur der symmetrische Anteil $L'(t-t')$. Diesen Anteil können wir dem Bereich $t > t'$ zuschreiben, wodurch wir für die Kopplung $W(t-t')$ gerade $2L(t-t')$ erhalten, da auf die Theta-Funktion in diesem Bereich verzichtet werden kann. Indem wir also eine zeitgeordnete Integration $\int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^t dt'$ verwenden, finden wir die in der Literatur übliche Standardform [1],

$$\begin{aligned} \rho_R &= \int_{-\infty}^{\infty} dq_i dq'_i \rho_S(q_i, q'_i | t_i) \quad (\text{A.128}) \\ &\times \int \mathcal{D}q \mathcal{D}q' \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_S[q] - S_S[q'] \right) \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} M \gamma(0) \left(q(t) \cdot q(t) - q'(t) \cdot q'(t) \right) \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^t dt' \left(q(t) - q'(t) \right) \left(L(t, t') q(t') - L^*(t, t') q'(t') \right) \right]. \end{aligned}$$

Die explizite Form des sogenannten Feynman-Vernon Propagator J_{FV} , welcher die effektive Zeitentwicklung der reduzierten Dichtematrix ρ_R durch die Gleichung

$$\rho_R(q_f, q'_f | t_f) = \int dq_i dq'_i \rho_S(q_i, q'_i | t_i) J_{FV}(q_f, q'_f, t_f | q_i, q'_i, t_i) \quad (\text{A.129})$$

beschreibt, wird durch Gleichung (A.118), (A.121) und (A.128) definiert.

Literaturverzeichnis

- [1] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, Series in Modern Condensed Matter Physics, (World Scientific, Singapore, second edition, 1999).
- [2] R. Görlich, U. Weiss, *Specific heat of the dissipative two-state system*, (Phys. Rev. B **38**, 5245, 1988).
- [3] A. Schmid, *On a Quasiclassical Langevin Equation*, (J. Low Temp. Phys. **49**, 1982).
- [4] J. Peguiron, *Quantum Ratchets*, (Dissertation, Casimir PhD Series, 2005).
- [5] U. Weiss, H. Grabert, P. Hänggi, P. Riseborough, *Incoherent Tunneling in a Double-Well*, (Phys. Rev. B **35**, 9535, 1987).
- [6] H. Baur, A. Fubini, U. Weiss, *Nonequilibrium transfer and decoherence in quantum impurity problems*, (Phys. Rev. B **70**, 024302, 2004).
- [7] private Aufzeichnung von Prof. U. Weiss.
- [8] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, (Phys. Rev. Lett. **46**, 211, 1981).
- [9] G.-L. Ingold, in *Lecture Notes in Physics*, (Springer-Verlag Heidelberg, Vol. 611,2002).
- [10] W. T. Strunz, G. Alber, F. Haake, *Dekohärenz in offenen Quantensystemen*, (Physik Journal, 11/2002).
- [11] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, 4. Ed., (Oxford University Press, 2002).
- [12] J. W. Negele, H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems*, (Perseus Books, 1998).
- [13] M. Chaichian, A. Demichev, *Path Integrals in Physics, Vol. I and II*, (Institute of Physics Publishing, 2001).

-
- [14] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets*, (World Scientific, 2004).
- [15] L. S. Schulman, *Techniques and Applications to Path Integration*, (John Wiley & Sons, 1981).
- [16] B. Felsager, *Geometry, Particles, and Fields*, (Springer-Verlag, 1997).
- [17] R. P. Feynman, F. L. Vernon, *The Theory of a General Quantum System Interacting with a Linear Dissipative System*, (Ann. Phys. **24**, 118-173, 1963).
- [18] L. S. Brown, *Quantum Field Theory*, (Cambridge University Press, 1992).
- [19] J. C. Collins, *Renormalization*, (Cambridge University Press, 1984).
- [20] S. Pokorski, *Gauge Field Theory*, (Cambridge University Press, 1987).
- [21] M. Le Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory*, (Oxford University Press, 1991).
- [22] F. Schwabl, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene*, (Springer-Verlag, 1997).
- [23] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, (Pergamon, New York, 1965).
- [24] S. Flügge, *Rechenmethoden der Quantentheorie*, (Springer, Berlin, 1999).
- [25] N. Rosen, P. M. Morse, , (Phys. Rev. **42**, 210, 1932).
- [26] P. Di Francesco, P. Mathieu, D. Sénéchal, *Conformal Field Theory*, (Springer-Verlag, 1996).
- [27] E. Abdallah, M. C. B. Abdallah, K. D. Rothe, *Non-perturbative methods in 2 dimensional Quantum Field Theory*, (World Scientific, 1991).
- [28] A. O. Gogolin, *Bosonisation and Strongly Correlated Systems*, (Cambridge University Press, 1998).
- [29] A. M. Tsvelik, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*, (Cambridge University Press, 1995).
- [30] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems*, (Addison-Wesley, 1991).

- [31] J. von Delft, H. Schoeller, *Bosonization for Beginners – Refermionization for Experts*, (Ann. Physik **4**, 1998).
- [32] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension*, (Oxford Science Publications, 2004).
- [33] L. P. Lebedev, I. I. Vorovich, G. M. L. Gladwell, *Functional Analysis*, (Kluwer Academic Publishers, 2002).
- [34] W.-H. Steeb, *Hilbert spaces, generalized functions and quantum mechanics*, (BI-Wiss.-Verlag, 1991).
- [35] N. M. Temme, *An Introduction to the Classical Functions of Mathematical Physics*, (John Wiley & Sons, 1996).
- [36] R. Courant, D. Hilbert, *Methoden der mathematischen Physik*, (Springer-Verlag, 4. Auflage, 1991).
- [37] K. B. Oldham, J. Spanier, *The Fractional Calculus*, (Academic Press, 1974).
- [38] T. J. Osler, *Leibnitz Rule for Fractional Derivatives generalized and an Application to infinite Series*, (J. Appl. Math., 18, No. 3, 1970).
T. J. Osler, *A further extension of the Leibnitz Rule to Fractional Derivatives and its Relation to the Parseval's Formula*, (J. Math. Anal., **3**, No. 1, 1972).
T. J. Osler, *The Integral analog of the Leibnitz Rule*, (Math. of Comp., **26**, No. 120, 1972).
- [39] B. R. West, M. Bologna, P. Grigolini, *Physics of Fractal Operators*, (Springer, 2003).
- [40] K. S. Miller, B. Ross, *An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations*, (John Wiley & Sons, Inc., 1994).
- [41] J. K. Patel, C. H. Kapadia, C. B. Owen, *Handbook of Statistical Distributions*, (Dekker, 1976).
- [42] A. Papoulis, *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes*, (McGraw-Hill Series in Electrical Engineering, 3rd edition, 1991).
- [43] P. J. Smith, *A Recursive Formulation of the Old Problem of Obtaining Moments From Cumulants and Vice Versa*, (Am. Stat. **49**, No.2, 217-218, 1995).

-
- [44] H. Risken, *The Fokker-Plank Equation, 3rd Printing*, (Springer-Verlag, 1998).
- [45] P. Fendley, F. Lesage, H. Saleur, *Solving 1D Plasmas and 2D Boundary Problems Using Jack Polynomials and Funktional Relations*, (J. Stat. Phys. **79**, 799-819, 1995).
- [46] P. Fendley, F. Lesage, H. Saleur, *A Unified Framework for the Kondo Problem and for an Impurity in a Luttinger Liquid*, (J. Stat. Phys. **85**, 211-249, 1996).
- [47] P. Fendley, A. W. W. Ludwig, H. Saleur, *Exact Nonequilibrium Transport through Point Contacts in Quantum Wires and Fractional Quantum Hall Devices*, (Phys. Rev. B **52**, 8934-8950, 1995).
- [48] M. P. A. Fisher, W. Zwerger, *Quantum Brownian motion in a periodic potential*, (Phys. Rev. B **32**, 6190-6206, 1985).
- [49] H. Saleur and U. Weiss, *Point Contact Tunneling in the Fractional Quantum Hall Effect*, (Phys. Rev. B **63**, 201302(R), 2001).
- [50] Th. Frankel, *The Geometry of Physics, An Introduction*, (Cambridge University Press, 1997).
- [51] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products*, (Academic Press, London, 1965).
- [52] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. G. Tricomi, *Higher Transcendental Functions*, (Vol. 1. McGraw-Hill, 1953).
- [53] M. Abramowitz, I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover Publications, 1972).
- [54] E. Zeidler *Teubner-Taschenbuch der Mathematik, Teil 1*, (Teubner, 1996).
- [55] E. Zeidler *Teubner-Taschenbuch der Mathematik, Teil 2*, (Teubner, 1996).
- [56] V. S. Vladimirov, *A Collection of Problems on the Equations of Mathematical Physics*, (Springer-Verlag, 1986).
- [57] J. W. Dettmann, *Applied Complex Variables*, (The Macmillian Company, 1965).

-
- [58] B. A. Fuchs, B. V. Shabat, *Functions of a Complex Variable*, (Pergamon Press, 1964).
- [59] B. R. Holstein, *The linear potential propagator*, (Am. J. Phys. **65**, 414-418, 1997).
- [60] L. S. Brown, Y. Zhang, *Path integral for the motion of a particle in a linear potential*, (Am. J. Phys. **62**, 806-808, 1994).
- [61] W. Witschel, *Ordered operator expansion by comparison*, (J. Phys. A. **8**, No. 2, 143-155, 1975).
- [62] W. Magnus, *On the exponential solution of differential equations for a linear operator*, (Comm. Pure & App. Math. **7**, 649-673, 1954).
- [63] W. T. Strunz, *The non-Markovian stochastic Schrödinger equation for open systems*, (Phys. Lett. A, **235**, 569-573, 1997).
- [64] W. T. Strunz, *Linear quantum state diffusion for non-Markovian open systems*, (Phys. Lett. A, **224**, 25-30, 1996).
- [65] W. T. Strunz, *Stochastic pure states for quantum Brownian motion*, (New J. Phys., **7**, 2005).
- [66] J. T. Stockburger, H. Grabert, *Exact c-Number Representation of Non-Markovian Quantum Dissipation*, (Phys. Rev. Lett., **88**, 170407-170411, 2002).
- [67] J. T. Stockburger, *Simulating spin-boson dynamics with stochastic Liouville-von Neumann equations*, (Chem. Phys. **296**, 159-169, 2004).
- [68] J. T. Stockburger, C. H. Mak, *A stochastic Liouvillian algorithm to simulate dissipative quantum dynamics with arbitrary precision* (J. Chem. Phys., **110**, 4983-4985, 1999).
- [69] H. M. Fried, *Green's Functions and Ordered Exponentials*, (Cambridge University Press, 2002).

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Holger Baur
Geburtstag	12. Juli 1972
Geburtsort	Kirchheim u. Teck

1992	Erlangung der allgemeinen Hochschulreife am Technischen Gymnasium in Kirchheim u. Teck
1992 - 1993	Studium Physik-Diplom an der Universität Stuttgart
1993 - 1994	Wehrdienst
1994 - 1997	Fortsetzung Studium Physik-Diplom an der Universität Stuttgart
1997 - 1998	Studienaufenthalt an der Universität Adelaide, Australien
1998 - 2000	Abschluß des Studiums mit Erlangung des Diplom-Zeugnisses 1.3.2000
2000 - 2006	Promotion am 2. Institut für Theoretische Physik bei Prof. Dr. U. Weiß

Danksagung

Zum Schluß möchte ich mich bei allen bedanken, die direkt oder indirekt zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Ich bedanke mich ganz besonders herzlich bei

- Herrn Prof. Dr. U. Weiß für die wissenschaftliche Betreuung dieser Arbeit und den stets menschlichen und angenehmen Umgang,
- Herrn Prof. Dr. Mahler für das Interesse an der vorliegenden Arbeit und die Übernahme des Mitberichts,
- Frau W. Meyer-Haake und Frau A. Steinhauser für ihre Hilfsbereitschaft und Freundlichkeit und Abwechslung, welche beide in den wissenschaftlichen Alltag brachten,
- Roman Bedau für manche Stunde hartes Rechnen im Dienste der Wissenschaft und für die reibungslose Übernahme der Systemadministration zusammen mit Peter Graf, dem ebenfalls mein Dank dafür gilt,
- allen Institutsmitgliedern für ihre Hilfsbereitschaft und die angenehme Arbeitsatmosphäre und nicht zuletzt auch für die interessanten Diskussionen ausserhalb den Fragestellungen der Physik,
- meiner Ehefrau Christine für die Geduld, welche sie für meine Promotion aufbrachte und meinen Kindern Benedikt und Lilli, welche mich jeden Tag auf das neue erfreuen,
- meinen Eltern für ihre immer noch anwährende Unterstützung.