4.2 Einfache Systeme [Sakurai 2.5 ; Münster 23.1.3]

Setze $t_0 \to 0$ auf Seite 45

$$\Rightarrow \quad K(y,t;x,0) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\varepsilon\hbar}\right)^{\frac{N}{2}} \int \left\{\prod_{i=2}^{N} dx_i\right\} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} \varepsilon\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2 - V(x_j)\right]\right\}_{\substack{x_1:=x \\ x_{N+1}:=y}}$$

(a) Freies Teilchen

(i) Exaktes Ergebnis:

$$K(y,t;x,0) = \langle y| e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}t} |x\rangle \qquad \hat{\mathbb{1}} = \int dk\, |k\rangle\langle k|$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, e^{-\frac{i\hbar k^2 t}{2m} + ik(y-x)}$$

wie auf Seite 45: $\int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{-az^2 \pm ibz} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{-\frac{b^2}{4a}}$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\; e^{-\frac{m(y-x)^2}{2i\hbar t}} \,.$$

(ii) Klassisches Ergebnis:

Keine Kräfte $\Rightarrow$ $v = \text{const} = \frac{y-x}{t}$ $\Rightarrow$ $S_{cl} = \int_0^t dt'\, \frac{mv^2}{2} = \frac{m(y-x)^2}{2t}$

$$\Rightarrow \quad e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} = e^{\frac{im(y-x)^2}{2\hbar t}} \qquad \text{OK!}$$

(iii) Pfadintegral:

$$\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\varepsilon\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2\right] = -\frac{m}{2i\varepsilon\hbar}\left[(y-x_N)^2 + (x_N-x_{N-1})^2 + \ldots + (x_3-x_2)^2 + (x_2-x)^2\right]$$

$$= -\frac{m}{2i\varepsilon\hbar}\left\{ (x_N\ x_{N-1}\ \cdots\ x_3\ x_2) \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ 0 & -1 & 2 & & \\ \vdots & & & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_N \\ x_{N-1} \\ \vdots \\ x_3 \\ x_2 \end{pmatrix} + (-y\ 0\ \ldots\ 0\ -x)\begin{pmatrix} x_N \\ x_{N-1} \\ \vdots \\ x_3 \\ x_2 \end{pmatrix} + (x_N\ x_{N-1}\ \cdots\ x_3\ x_2)\begin{pmatrix} -y \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -x \end{pmatrix} + y^2 + x^2 \right\}$$

Eine andere Vorgehensweise: (Skizze)

$$\exp\left(-\frac{m}{2i\varepsilon\hbar}(y-x_N)^2\right)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N+1}\, \delta(y-x_{N+1}) \exp\left(-\frac{m(x_{N+1}-x_N)^2}{2i\varepsilon\hbar}\right)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N+1}\, \delta(y-x-[x_{N+1}-x_N]-[x_N-x_{N-1}] \ldots - [x_2-x]) \exp(\ldots)$$

Schreibe $\delta(\ldots) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\, e^{i\omega(\ldots)}$.

Nehme $[x_{N+1}-x_N], [x_N-x_{N-1}], \ldots$ als neue Integrationsvariablen.

Diese sind abgekoppelt! Führe alle N durch.

Letztendlich bleibt noch $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}$ übrig, aber dieses wird auch ein Gaußsches Integral sein!

Gaußches Integral:

$A^T \stackrel{!}{=} A$; $\exists\, A^{-1}$; $(A^{-1}J)^T = A^{-1}$

$z = z' - A^{-1}J$

$z^T = z'^T - J^T A^{-1}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \prod_i \frac{dz_i}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[z^T A z + J^T z + z^T J\right]\right\}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i \frac{dz_i}{\sqrt{2\pi}} \left\{-\frac{1}{2}z'^T A z' - \frac{1}{2}\left[\cancel{-z'^T J} - \cancel{J^T z'} + J^T A^{-1} J + \cancel{J^T z'} - J^T A^{-1} J + \cancel{z'^T J} - J^T A^{-1} J\right]\right\}$$

$$\xrightarrow{\text{diagonalisiere } A} \quad = \exp\left\{+\frac{J^T A^{-1} J}{2}\right\} \prod_i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz_i''}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\lambda_i (z_i'')^2\right)$$

$$= \exp\left\{\frac{J^T A^{-1} J}{2}\right\} \prod_i \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} = \frac{1}{\sqrt{\det A}}\, e^{\frac{1}{2}J^T A^{-1} J} \,.$$

Jetzt: $\quad \mu := \dfrac{m}{i\varepsilon\hbar} \quad \Rightarrow \quad A = (N-1)\times(N-1)\text{-Matrix} = \begin{pmatrix} 2\mu & -\mu & 0 & \cdots \\ -\mu & 2\mu & -\mu & \cdots \\ 0 & -\mu & 2\mu & \\ \vdots & & & \end{pmatrix} \; ; \; J = \mu \begin{pmatrix} -y \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -x \end{pmatrix}.$

Bestimmung der Determinante (Skizze):

$$\det_{N-1} = 2\mu \underbrace{\begin{vmatrix} 2\mu & -\mu & \cdots \\ -\mu & 2\mu & \\ \vdots & & \end{vmatrix}}_{(N-2)\times(N-2)} + \mu \underbrace{\begin{vmatrix} -\mu & -\mu & 0 & \cdots \\ 0 & 2\mu & -\mu & \\ 0 & -\mu & 2\mu & \\ \vdots & & & \end{vmatrix}}_{(N-2)\times(N-2)} = 2\mu \det_{N-2} - \mu^2 \det_{N-3}$$

Differenzengleichung: $\quad \det_{N-1} - 2\mu\det_{N-2} + \mu^2\det_{N-3} = 0$.

Ansatz: $\quad \det_N = r^N$.

Charakteristische Gleichung: $\quad r^2 - 2\mu r + \mu^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad r = \mu \pm \sqrt{\mu^2-\mu^2} = \mu$.

Zweite Lösung: $\quad \det_N = N\mu^N \quad$ (Check: $N - 2(N-1) + N-2 = 0$ ok!)

Allgemeine Lösung: $\quad \det_N = a\mu^N + bN\mu^N$.

Anfangsbedingungen: $\quad \begin{cases} \det_1 = 2\mu \\ \det_2 = 3\mu^2 \end{cases} \quad \begin{cases} a+b = 2 \\ a+2b = 3 \end{cases} \quad \Rightarrow \begin{cases} a = 1 \\ b = 1 \end{cases}$

$$\Rightarrow \quad \det_{N-1} = \mu^{N-1}(1+N-1) = N\mu^{N-1} = \frac{N}{\mu}\cdot\mu^N$$

$$\Rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{\det A}} = \sqrt{\frac{m}{i\varepsilon\hbar N}} \cdot \left(\frac{i\varepsilon\hbar}{m}\right)^{\frac{N}{2}}$$

Bestimmung der Inverse (Skizze):

EMTP I / Lineare Algebra: $\quad A^{-1} = \dfrac{\operatorname{adj}(A)}{\det(A)} = \dfrac{\operatorname{cof}(A)^T}{\det(A)}$.

$$\Rightarrow \quad (A^{-1})_{(\cdot\ )} = (A^{-1})_{(\ \cdot)} = \frac{\det_{N-2}}{\det_{N-1}} = \frac{\mu^{N-2}(1+N-2)}{N\mu^{N-1}} = \frac{1}{\mu}\left(1-\frac{1}{N}\right)$$

$$(A^{-1})_{(\ \cdot)} = (A^{-1})_{(\cdot\ )} = \frac{(-1)^N}{\det_{N-1}} \underbrace{\begin{vmatrix} -\mu & 0 & \cdots & \\ 2\mu & -\mu & & \\ \vdots & & -\mu & 0 \\ & & 2\mu & -\mu \end{vmatrix}}_{(N-2)\times(N-2)} = \frac{(-1)^N(-\mu)^{N-2}}{N\mu^{N-1}} = \frac{1}{\mu N}.$$

Alles zusammen:

$$K(y,t;x,0) = \overbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cdot\left(\frac{m}{i\varepsilon\hbar}\right)^{\frac{N}{2}}}^{\text{Vorfaktor (ohne } \prod_{i=2}^{N}\frac{1}{\sqrt{2\pi}})} \cdot \overbrace{\sqrt{\frac{m}{i\varepsilon\hbar N}}\cdot\left(\frac{i\varepsilon\hbar}{m}\right)^{\frac{N}{2}}}^{\frac{1}{\sqrt{\det A}}} \exp\left\{\overbrace{\frac{\mu^2}{2}\left[\frac{y^2+x^2}{\mu}\left(1-\frac{1}{N}\right) + \frac{2yx}{\mu N}\right]}^{\frac{1}{2}J^TA^{-1}J} - \overbrace{\frac{(y^2+x^2)\mu}{2}}^{\text{Seite 47}}\right\}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\varepsilon\hbar N}} \cdot \exp\left\{-\frac{m(y-x)^2}{2i\varepsilon\hbar N}\right\} \overset{\varepsilon N = t}{=} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \exp\left\{\frac{im(y-x)^2}{2\hbar t}\right\}$$

Richtig* aber hoffnungslos kompliziert!
Trotzdem darf man nicht aufgeben ...

---

* Das Ergebnis ist exakt richtig auch <u>ohne</u> Limes $N\to\infty$ bzw. $\varepsilon\to 0$; wenn $V(x)\neq 0$ ist dies nicht mehr der Fall.

(b) Harmonischer Oszillator

Diesmal wird nicht das „exakte" diskretisierte Pfadintegral sondern die „symbolische" Kontinuumversion (Seite 45) als Ausgangspunkt gewählt:

$$K(y,t;x,0) = \int_{x(0)=x}^{x(t)=y} \mathcal{D}x(t)\, \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \left[\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)\right]\right\} .$$

Dabei muss man sich daran erinnern, dass die „Normierung" des Integrationsmaßes nicht unbedingt wohldefiniert ist.

Schreibe (vgl. Seite 46): $\quad x(t') = x_{cl}(t') + \delta x(t') \quad ; \quad \begin{array}{l} x_{cl}(0) = x \; ; \; x_{cl}(t) = y \\ \delta x(0) = 0 \; ; \; \delta x(t) = 0 \end{array}$

Die Wirkung: $\quad S = \frac{m}{2}\int_0^t dt' \left[\dot{x}(t')\dot{x}(t') - \omega^2 x(t')x(t')\right]$

$$= S_{cl} + m\int_0^t dt' \left[\dot{x}_{cl}\,\delta\dot{x} - \omega^2 x_{cl}\,\delta x\right] + \frac{m}{2}\int_0^t dt' \left[\delta\dot{x}\delta\dot{x} - \omega^2 \delta x \delta x\right]$$

partielle Integration & $\delta x(0) = \delta x(t) = 0$

$$\overset{\curvearrowright}{=} S_{cl} + m\int_0^t dt' \underbrace{\left[-\ddot{x}_{cl} - \omega^2 x_{cl}\right]}_{\substack{0! \\ \text{(Bewegungsgleichung)}}} \delta x + \frac{m}{2}\int_0^t dt'\, \delta x \underbrace{\left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2\right)}_{\substack{\neq 0 \;! \\ \text{(keine klassische Bahn)}}} \delta x$$

Die klassische Wirkung:

$$x_{cl} = A\cos\omega t' + B\sin\omega t'$$

$$x_{cl}(0) = x \quad \Rightarrow \quad A = x$$

$$x_{cl}(t) = y \quad \Rightarrow \quad x\cos\omega t + B\sin\omega t = y \quad \Rightarrow \quad B = \frac{y - x\cos\omega t}{\sin\omega t}$$

$$S_{cl} = \frac{m}{2}\int_0^t dt' \left[\dot{x}_{cl}\dot{x}_{cl} - \omega^2 x_{cl}x_{cl}\right] \overset{!}{=} \frac{m}{2}\left[x_{cl}\dot{x}_{cl}\right]_0^t$$

partielle Integration

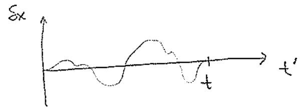
$$= \frac{m\omega}{2}\left\{\left(x\cos\omega t + \frac{y - x\cos\omega t}{\sin\omega t}\cdot\sin\omega t\right)\left(-x\sin\omega t + \frac{y - x\cos\omega t}{\sin\omega t}\cos\omega t\right) - x\cdot\frac{y - x\cos\omega t}{\sin\omega t}\right\}$$

$$= \frac{m\omega}{2\sin\omega t}\left\{y\left(-x\sin^2\omega t - x\cos^2\omega t + y\cos\omega t\right) - xy + x^2\cos\omega t\right\}$$

$$= \frac{m\omega}{2\sin\omega t}\left\{(x^2+y^2)\cos\omega t - 2xy\right\}$$

(Check: $\omega \to 0$ $\Rightarrow \frac{m}{2t}(x-y)^2$ ok!)

Quantenfluktuationen: Die $\delta x(t')$ können durch eine Fourier-Reihe dargestellt werden:



$$\delta x(t') = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(\frac{n\pi t'}{t}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{m}{2}\int_0^t dt'\, \delta x\left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2\right)\delta x = \frac{m}{2}\sum_{n,n'=1}^{\infty} a_{n'}a_n \int_0^t dt' \sin\left(\frac{n'\pi t'}{t}\right)\left(\left(\frac{n\pi}{t}\right)^2 - \omega^2\right)\sin\left(\frac{n\pi t'}{t}\right)$$

$$= \frac{mt}{4}\sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 \left(\left(\frac{n\pi}{t}\right)^2 - \omega^2\right)$$

Pfadintegral:

$$K(y,t;x,0) = \int \mathcal{D}x \, e^{\frac{i}{\hbar}S} = e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} \int \mathcal{D}(\delta x)\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \, \delta x \left(-\frac{d^2}{dt'^2} - \omega^2\right)\delta x}$$

Integrationsmaß : $\mathcal{D}(\delta x) \overset{!}{=} \underbrace{J}_{\text{unbekannte Jacobi-Determinante}} \cdot \prod_{n=1}^{\infty} da_n$

$$\Rightarrow K(y,t;x,0) = e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} \cdot J \cdot \int \prod_{n=1}^{\infty} da_n \exp\left\{ \frac{imt}{4\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 \left[\left(\frac{n\pi}{t}\right)^2 - \omega^2\right]\right\}$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} \cdot J \cdot \prod_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} da_n \exp\left\{ \frac{imt}{4\hbar} \left[\left(\frac{n\pi}{t}\right)^2 - \omega^2\right] a_n^2 \right\}$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} \cdot J \cdot \prod_{n=1}^{\infty} \left\{ \sqrt{\frac{4\pi\hbar}{imt}} \left[\left(\frac{n\pi}{t}\right)^2 - \omega^2\right]^{-\frac{1}{2}} \right\}$$

Normierung:

Wie kann J bestimmt werden?
Sie ist rein „kinematisch", d.h. unabhängig von V

⇒ benutze den bekannten Vorfaktor eines freien Teilchens! (Seite 47; entspricht $\omega \to 0$)

$$\Rightarrow J \prod_{n=1}^{\infty} \left\{ \sqrt{\frac{4\pi\hbar}{imt}} \left[\left(\frac{n\pi}{t}\right)^2 - \omega^2\right]^{-\frac{1}{2}} \right\}$$

$$= \underbrace{J \prod_{n=1}^{\infty} \left\{ \sqrt{\frac{4\pi\hbar}{imt}} \left[\left(\frac{n\pi}{t}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}} \right\}}_{\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}} \times \underbrace{\prod_{n=1}^{\infty} \left\{ \left[1 - \left(\frac{\omega t}{n\pi}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}} \right\}}_{\left\{ \underbrace{\prod_{n=1}^{\infty} \left[1 - \left(\frac{\omega t}{n\pi}\right)^2\right]}_{\frac{\sin(\omega t)}{\omega t}\,!} \right\}^{-\frac{1}{2}}}$$

$\to 1$ im freien Limes $\omega \to 0$

(z.B. Arfken (5.210))

Endergebnis:

$$K(y,t;x,0) = \underbrace{\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega t)}}}_{\text{Quantenfluktuationen als Vorfaktor !}} \exp\left\{ \underbrace{\frac{im\omega}{2\hbar \sin\omega t} \left[(x^2+y^2)\cos\omega t - 2xy\right]}_{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} \right\}$$

„Mehler-Formel"

In dieser Formel ist z.B. das ganze Spektrum des harmonischen Oszillators enthalten! (vgl. Aufgabe 7.3)