

5.2 Kontinuumlimes [Feynman-Hibbs 8.5-8]

Kapitel 5.1:
$$L = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{1}{2} \dot{q}_j^2 - \frac{1}{2} \omega_0^2 q_j^2 - \frac{1}{2} \omega^2 (q_{j+1} - q_j)^2 \right\} \quad q_{N+1} := q_1; \quad q_j := \sqrt{m_j} (x_j - x_{j,0})$$

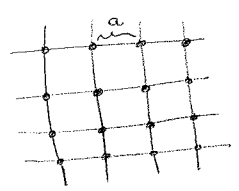
in Normalkoordinaten

$$\left(q_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N e^{\frac{2\pi i j k}{N}} Q_k \right) \quad \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{1}{2} \dot{Q}_k^* \dot{Q}_k - \frac{1}{2} \omega_k^2 Q_k^* Q_k \right\} \quad Q_k^* = Q_{N-k}; \quad Q_N \in \mathbb{R};$$

$$\omega_k^2 = \omega_0^2 + 4\omega^2 \sin^2 \frac{\pi k}{N}$$

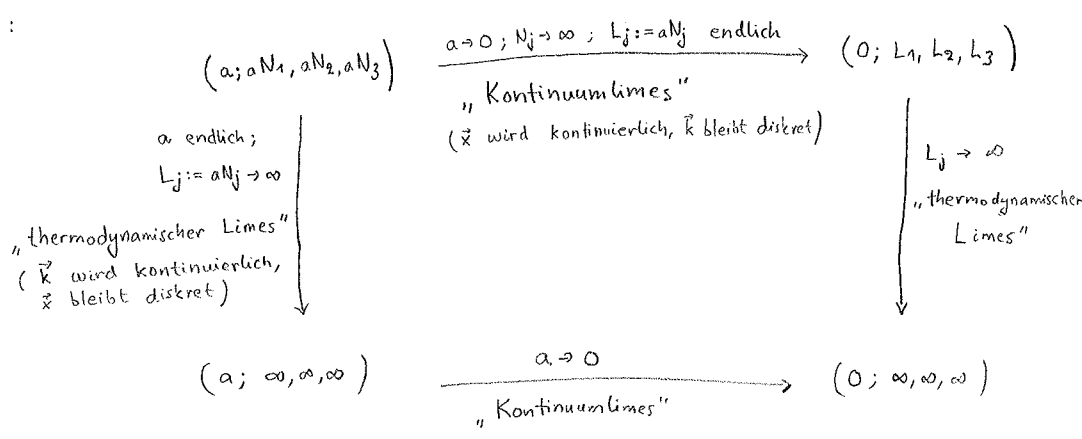
- Verallgemeinerungen :
- * drei Dimensionen statt einer Dimension;
 - * ggf. unendlich viele „Perlen“ ($N \rightarrow \infty$).
- Unverändert :
- * periodische Randbedingungen.
- Vereinfachung:
- * trotz dreier Dimensionen betrachte Auslenkungen nur in eine Richtung, d.h. q statt \vec{q} .
- Notation :
- * nummeriere „Perlen“ durch Ruhekoordinate $\vec{x} := \vec{x}_{j,0}$ statt Index j . Für ein kubisches Gitter:

$$\vec{x} = a (n_1, n_2, n_3) \quad ; \quad n_j = 1, \dots, N_j \quad ; \quad N = N_1 N_2 N_3$$
 Dabei ist a die „Gitterkonstante“.
 - * $q_j(t) =: q(\vec{x}, t)$ ist wieder ein „diskretisiertes Feld“.
 - * nächster Nachbar: $q(\vec{x} + a\vec{e}_j)$; $\vec{e}_j =$ Einheitsvektor.



$$\Rightarrow L = \frac{1}{2} \sum_{\vec{x}} \left\{ (\partial_t q)^2 - \omega_0^2 q^2 - \omega^2 \sum_{j=1}^3 [q(\vec{x} + a\vec{e}_j, t) - q(\vec{x}, t)]^2 \right\}$$

Grenzfälle :



Im Folgenden wird zuerst der Kontinuumlimes genommen, nachher der thermodynamische Limes. Man muss auch entscheiden, ob man zuerst einen Limes nimmt und nachher die Normalkoordinaten „erneut“ bestimmt, oder einen entsprechenden Limes direkt bei den „alten“ Normalkoordinaten betrachtet.

$a \rightarrow 0$

(i) im „Koordinatenraum“

Wie bei Herleitung des Pfadintegrals: $\frac{q(\vec{x}+a\vec{e}_j, t) - q(\vec{x}, t)}{a} \approx \partial_j q + O(a)$

Bezeichne auch: $q(\vec{x}, t) =: a^{3/2} \phi(\vec{x}, t)$
 $\omega^2 a^2 =: c^2$ (Einheiten von c : $\frac{m}{s}$)

$$\Leftrightarrow L = \frac{1}{2} \sum_{\vec{x}} a^3 \left\{ (\partial_t \phi)^2 - c^2 \sum_j (\partial_j \phi)^2 - \omega_0^2 \phi^2 + O(a) \right\}$$

$$\stackrel{\text{Einstein-Konvention}}{=} \frac{1}{2} \int_V d^3\vec{x} \left\{ \partial_t \phi \partial_t \phi - c^2 \partial_j \phi \partial_j \phi - \omega_0^2 \phi^2 \right\} ; V = L_1 L_2 L_3$$

$$=: \int_V d^3\vec{x} \mathcal{L} ; \mathcal{L} = \frac{1}{2} \left\{ \partial_t \phi \partial_t \phi - c^2 \partial_j \phi \partial_j \phi - \omega_0^2 \phi^2 \right\}$$

heißt „Lagrange-Dichte“.

(ii) Übergang zu Normalkoordinaten („Impulsraum“)

Normale Fourier-Reihe: $f(x+L_1) = f(x)$ d.h. f periodisch
 $\Leftrightarrow f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i \frac{2\pi n x}{L_1}} ; c_n = \frac{1}{L_1} \int_P dx f(x) e^{-i \frac{2\pi n x}{L_1}}$

Jetzt dasselbe bzgl. x, y, z .

Bezeichne $\vec{k} := 2\pi \left(\frac{n_1}{L_1}, \frac{n_2}{L_2}, \frac{n_3}{L_3} \right), n_i \in \mathbb{Z}$ (vgl. Seite 10!)
 $\Leftrightarrow \phi(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{k}} \tilde{\phi}(\vec{k}, t) e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}} ; \tilde{\phi}(\vec{k}, t) = \frac{1}{V} \int d^3\vec{x} \phi(\vec{x}, t) e^{-i \vec{k} \cdot \vec{x}}$
 $\phi(\vec{x}, t) \in \mathbb{R} \Rightarrow \tilde{\phi}^*(\vec{k}, t) = \tilde{\phi}(-\vec{k}, t)$

Einsatz in L :

$$L = \frac{1}{2} \int_V d^3\vec{x} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} e^{i(\vec{k}+\vec{q}) \cdot \vec{x}} \left\{ \partial_t \tilde{\phi}(\vec{k}, t) \partial_t \tilde{\phi}(\vec{q}, t) + [c^2 \vec{k} \cdot \vec{q} - \omega_0^2] \tilde{\phi}(\vec{k}, t) \tilde{\phi}(\vec{q}, t) \right\}$$

$$= \frac{V}{2} \sum_{\vec{k}} \left\{ \partial_t \tilde{\phi}(\vec{k}, t) \partial_t \tilde{\phi}^*(\vec{k}, t) - (c^2 \vec{k}^2 + \omega_0^2) \tilde{\phi}(\vec{k}, t) \tilde{\phi}^*(\vec{k}, t) \right\}$$

\Rightarrow wieder eine Summe von (jetzt unendlich vielen) entkoppelten harmonischen Oszillatoren!

(iii) direkt mit Normalkoordinaten (Seite 67)

* Kreisfrequenz: $\omega_k^2 = \omega_0^2 + 4\omega^2 \sin^2 \frac{\pi k}{N} \xrightarrow[\omega \rightarrow \frac{c}{a}]{k \rightarrow \vec{n}} \omega_0^2 + \sum_{j=1}^3 c^2 \left(\frac{2}{a} \sin \frac{\pi n_j}{N_j} \right)^2$

Hier: $\frac{2}{a} \sin \frac{\pi n_j}{N_j} = \frac{2}{a} \sin \frac{a \pi n_j}{L_j} = \frac{2}{a} \sin \left(\frac{a}{2} \cdot \frac{2\pi n_j}{L_j} \right) = \frac{2}{a} \sin \frac{ak_j}{2}$

Folglich: $\lim_{a \rightarrow 0} \frac{2}{a} \sin \frac{\pi n_j}{N_j} = k_j ; \omega_k^2 \rightarrow \omega_0^2 + c^2 \vec{k}^2$

* Feldnormierung: „Damals“: $q_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N \exp\{i \dots\} Q_k \xrightarrow{\text{Dimensionen}} \frac{1}{\sqrt{N_1 N_2 N_3}} \sum_{\vec{n}} \exp\{i \dots\} Q_{\vec{n}}$

Jetzt: $q_j = a^{3/2} \phi = a^{3/2} \sum_{\vec{k}} \exp\{i \dots\} \tilde{\phi}$

$\Leftrightarrow Q_{\vec{n}} \leftrightarrow \sqrt{N_1 N_2 N_3} a^{3/2} \tilde{\phi} = V^{3/2} \tilde{\phi}$

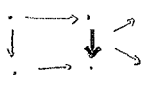
$\Leftrightarrow \sum_{\vec{n}} \frac{1}{2} \dot{Q}_{\vec{n}}^* \dot{Q}_{\vec{n}} \leftrightarrow \frac{V}{2} \sum_{\vec{k}} \dot{\tilde{\phi}}^* \dot{\tilde{\phi}}$ OK!

Thermodynamischer Limes

(i) im Koordinatenraum

Setze einfach $V \rightarrow \infty$:

$$L = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \mathcal{L} \quad ; \quad \mathcal{L} = \frac{1}{2} \left\{ \partial_t \phi \partial_t \phi - c^2 \partial_j \phi \partial_j \phi - \omega_0^2 \phi^2 \right\}$$



(ii) im Impulsraum

Solange das Volumen endlich ist, sind Wellenvektoren

quantisiert: $\vec{k} = 2\pi \left(\frac{n_1}{L_1}, \frac{n_2}{L_2}, \frac{n_3}{L_3} \right) \quad ; \quad n_i \in \mathbb{Z}$

Bei $L_i \rightarrow \infty$ wird die Quantisierung dicht, und

$$\sum_{\vec{k}} f(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z}{(2\pi)^3} f(\vec{k}) \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} f(\vec{k})$$

Man definiere $\tilde{\phi} := \frac{\phi}{V}$, so dass die Fourier-Transformationen auf Seite 68 als

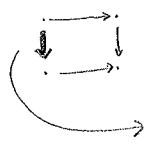
$$\phi = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \tilde{\phi} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\phi} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad ; \quad \tilde{\phi} = \int d^3\vec{x} \phi e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

ausgedrückt werden können. Folglich gilt

$$L = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}} \left\{ |\partial_t \tilde{\phi}(\vec{k}, t)|^2 - (c^2 \vec{k}^2 + \omega_0^2) |\tilde{\phi}(\vec{k}, t)|^2 \right\}$$

$$\xrightarrow{V \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \left\{ |\partial_t \tilde{\phi}|^2 - (c^2 \vec{k}^2 + \omega_0^2) |\tilde{\phi}|^2 \right\}$$

(iii) bei $a \neq 0$



Im Koordinatenraum wieder trivial, aber was passiert im Impulsraum? Ausgangspunkt (Seite 67 mit $\vec{k} \rightarrow \vec{n}$):

$$L = \sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} \sum_{n_3=1}^{N_3} \left\{ \frac{1}{2} \dot{Q}_{\vec{n}}^* \dot{Q}_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \omega_{\vec{n}}^2 Q_{\vec{n}}^* Q_{\vec{n}} \right\}$$

$$\omega_{\vec{n}}^2 = \omega_0^2 + \sum_{j=1}^3 \left(2\omega \sin \frac{\pi n_j}{N_j} \right)^2 \quad ; \quad \omega^2 a^2 = c^2$$

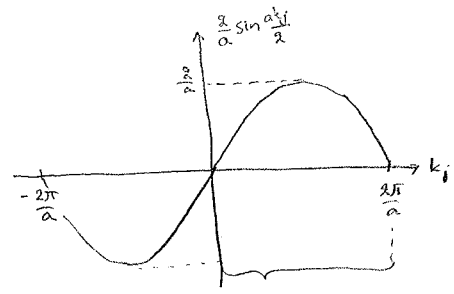
Bezeichne $k_j := \frac{2\pi n_j}{aN_j} \in \left(0, \frac{2\pi}{a} \right]$, wie auf Seite 68.
 $\left\{ \begin{array}{l} 1 \leq n_j \leq N_j \\ N_j \rightarrow \infty \end{array} \right.$

Es folgt:

$$\omega^2(\vec{k}) = \omega_0^2 + c^2 \sum_{j=1}^3 \left(\frac{2}{a} \sin \frac{ak_j}{2} \right)^2 \quad \text{und (wie im Punkt (iii) auf Seite 68)}$$

$$L = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi/a} \frac{dk_1}{2\pi} \int_0^{2\pi/a} \frac{dk_2}{2\pi} \int_0^{2\pi/a} \frac{dk_3}{2\pi} \left\{ |\partial_t \tilde{\phi}|^2 - \omega^2(\vec{k}) |\tilde{\phi}|^2 \right\}$$

"Dispersionsrelation"
(vgl. Aufgabe 10.3)



"Brillouin-Zone"
(vgl. Aufgabe 10.3)

Interpretation ($a \rightarrow 0$): Die physikalische Bedeutung der durchgeführten Analyse ist wie auf Seite 66 aber jetzt mit wirklich kontinuierlichen Funktionen: die Normalkoordinaten stellen kollektive aber abgekoppelte Freiheitsgrade dar. Im klassischen Limes geht es um ebene Wellen, mit Wellenvektor \vec{k} und Frequenz $\omega(\vec{k})$; in der Quantenmechanik um Teilchen (Phononen) mit Impuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ und Energie $E = \hbar \omega(\vec{k})$.

Die klassische Lösung nochmal in expliziter Form:

$$L = \frac{1}{2} \int_{\vec{k}} \left\{ |\dot{\tilde{\phi}}|^2 - \omega^2(\vec{k}) |\tilde{\phi}|^2 \right\} ; \quad \tilde{\phi}(-\vec{k}, t) = \tilde{\phi}^*(\vec{k}, t)$$

(thermodynamischer Limes, d.h. \vec{k} kontinuierlich)

Fixiere \vec{k} ;
 Schreibe $\tilde{\phi} = \text{Re}(\tilde{\phi}) + i \text{Im}(\tilde{\phi})$;
 $\text{Re}(\tilde{\phi})$ und $\text{Im}(\tilde{\phi})$ tauchen wie abgekoppelte harmonische Oszillatoren auf; beide besitzen Lösungen mit $\cos(\omega(\vec{k})t)$ und $\sin(\omega(\vec{k})t)$;
 ihre komplexe Summe kann als

$$\tilde{\phi}(\vec{k}, t) = \alpha(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k})t} + \beta(\vec{k}) e^{i\omega(\vec{k})t}$$

geschrieben werden ;
 $\tilde{\phi}(-\vec{k}, t) = \tilde{\phi}^*(\vec{k}, t)$ & $\omega(-\vec{k}) = \omega(\vec{k}) \Rightarrow \beta(\vec{k}) = \alpha^*(-\vec{k})$;

$$\phi(\vec{x}, t) = \int_{\vec{k}} \tilde{\phi}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \left\{ \alpha(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \alpha^*(-\vec{k}) e^{i\omega(\vec{k})t + i\vec{k} \cdot \vec{x}} \right\} ;$$

setze $\alpha(\vec{k}) =: \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{2\omega(\vec{k})}} a(\vec{k})$;
 substituierere $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ im zweiten Term ;

$$\phi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3 2\omega(\vec{k})} \left\{ a(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k} \cdot \vec{x}} + a^*(\vec{k}) e^{i\omega(\vec{k})t - i\vec{k} \cdot \vec{x}} \right\} .$$

Die Funktion $a(\vec{k}) = \text{Re}[a(\vec{k})] + i \text{Im}[a(\vec{k})]$ wird durch Anfangsbedingungen fixiert.
 Jeder Wellenvektor \vec{k} beschreibt eine ebene Welle.
 In der Quantenmechanik spielt dieselbe Lösung eine Rolle als Sattelpunkt (Pfadintegral, vgl. Kap. 4.5) aber vielleicht auch direkter (vgl. Seite 74).