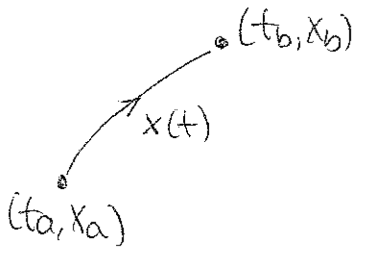
Feynman-Pfadintegral

* Nun werden wir eine andere Darstellung der Quantenmechanik lernen, nämlich die Pfadintegraldarstellung. Diese Darstellung macht die Verbindung zwischen klassischen Physik und Quantenphysik deutlicher. Wir werden hier das Formalismus einführen, und einige Beispiele sehen. Die Beispiele werden eigentlich sehr einfach sein, eigentlich aus QM-I (freies nichtrelativistisches Teilchen, harmonischer Oszillator). Obwohl für viele Probleme dieses Formalismus ziemlich schwer anzuwenden ist, ist das Pfadintegralformalismus sehr nützlich für Mehrteilchenphysik und Statistischephysik. Wegen Zeitmangel werden wir diese interessante Anwendungen hier nicht behandeln.

* Die klassische Wirkung

* Wir werden zuerst einige wichtige Begriffe der klassischen Mechanik auffrischen.
* Nehmen wir ein Teilchen, das zur Zeit t_a in x_a ist, und zur Zeit t_b in x_b. Der Pfad des Teilchens zwischen die 2 Punkten ist $x(t)$,



solch dass $x(t_a) = x_a$ und $x(t_b) = x_b$.
Man bestimmt den klassischen Pfad $\bar{x}(t)$ mit dem Prinzip der minimalen Wirkung.

* Wir definieren die Wirkung als:

$$S = \int_{t_a}^{t_b} dt \; L(x, \dot{x}, t)$$

wobei $L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x,t)$ die Lagrange-Funktion ist.

* Wir werden nun den Prinzip der minimalen Wirkung anwenden. Für so was werden wir die Ideen der Variationsrechnung benutzen.

* Sagen wir, dass der Pfad eine Verschiebung $\delta x(t)$ aus dem Pfad $\bar{x}(t)$ erfährt : $x(t) = \bar{x}(t) + \delta x(t)$, aber die Endpunkte bleiben erhalten, und daher $\delta x(t_a) = \delta x(t_b) = 0$.

Wir sind an der Variation der Wirkung

$$\delta S = S(\bar{x} + \delta x) - S(\bar{x})$$

interessiert. Wir wollen $\delta S = 0$ (in 1. Ordnung in δx)

* Dann:

$$S(x+\delta x) = \int_{t_a}^{t_b} dt \; L(\dot{x} + \delta\dot{x}, x + \delta x, t) \overset{\text{Taylor}}{=}$$

$$= \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ L(\dot{x}, x, t) + \delta\dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right\}$$

$$= S(x) + \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\delta\dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right]$$

Dann [wir benutzen hier partielle Integration]

$$\delta S = \underbrace{\delta x \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{t_a}^{t_b}}_{\Downarrow \; 0 \; \text{weil } \delta x(t_a) = \delta x(t_b) = 0} - \int_{t_a}^{t_b} \delta x \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} \right] dt$$

Dann $\delta S = 0$ wenn $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0$, also die Euler-Lagrange Gleichung die wir schon sehr gut kennen.

---

* QUANTENMECHANISCHE AMPLITUDEN

* Wir werden nun das gleiche Problem quantenmechanisch untersuchen. Nun werden alle Pfaden berücksichtigt, und nicht nur der Pfad mit der minimalen Wirkung. Die Pfaden $x(t)$ wirken mit verschiedenen Phasen, und zwar $\boxed{\text{Phase} = \text{Wirkung} / \hbar}$ $\hookrightarrow$ Wirkungsquant

* Also jeder Pfad wirkt mit einer Amplitude:

$$\Phi[x(t)] = \text{const} \times e^{iS[x(t)]/\hbar}$$

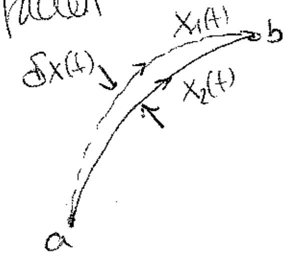
Die Gesamtamplidude um das Teilchen von (t_a, x_a) zu (t_b, x_b) zu gehen ist die Summe der Mitwirkungen aller Pfaden:

$$K(b,a) = \sum_{\substack{\text{über alle}\\ \text{Pfaden}\\ \text{von a zu b}}} \Phi[x(t)]$$

* Die Wahrscheinlichkeit um das Teilchen von (t_a, x_a) zu (t_b, x_b) zu gehen ist also

$$P(b,a) = |K(b,a)|^2$$

* Wie können wir nun diese Quantenmechanische Überlegung mit dem klassischen Prinzip der minimalen Wirkung verbinden? Ganz einfach. Der klassische Limes kommt wenn $S \gg \hbar$. Nehmen wir nun 2 Pfaden



* Die Verschiebung δx ist sehr klein in einer klassischen Skale, sodass die Änderung von S sehr klein in einer klassischen Skale ist, aber nicht in der $\hbar$-Skale. Deswegen mäßig kleine Änderungen in der Bahn ändern die Phase $S/\hbar$ gewaltig. Die Phase oszilliert ganz schnell zwischen 0 und 2π, und die entsprechend Cosinus- und Sinus-Funktionen schwanken gewaltig zwischen >0 und <0. Deswegen ist die totale Mitwirkung Null (eine Bahn kann eine positive Mitwirkung haben aber eine benachbare Bahn hat dieselbe Mitwirkung aber negativ).

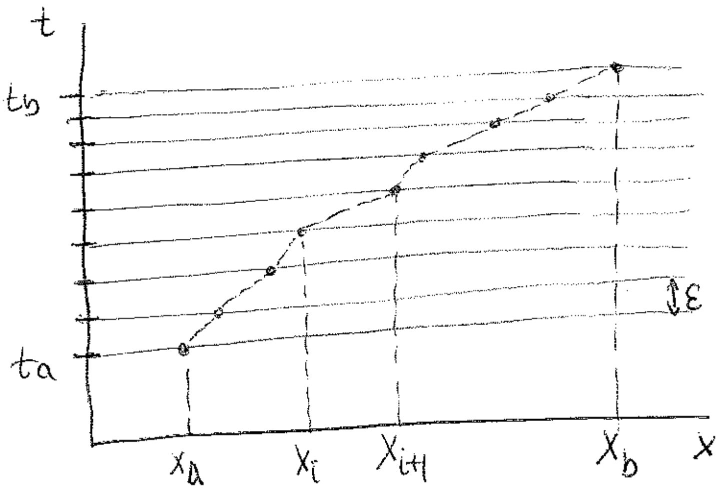
* Der klassische Pfad ist aber anders. Da S da ein Minimum ist, eine kleine Änderung $\delta x(t)$ macht keine Änderung der Wirkung.

* Daher, alle Mitwirkungen von Trajektorien in der Nähe von $\bar{x}(t)$ sind mehr oder weniger in Phase ($\sim \bar{S}/\hbar$ wobei $\bar{S} = S(\bar{x})$). Nur diese Pfaden in der Nähe von $\bar{x}$ müssen also betrachtet werden, und klassisch nur $\bar{x}(t)$ ist wichtig.

---

* PFADINTEGRAL

* Wie gesagt, wir müssen über alle Pfaden addieren. Die Anzahl von Pfaden ist natürlich unendlich. Das bringt uns zu der Idee von Pfadintegral.
* Wir spalten die Zeitintervall $[t_a, t_b]$ in kleinen Subintervallen $[t_i, t_{i+1}]$ solch dass



- $\epsilon = t_{i+1} - t_i$
- $N\epsilon = t_b - t_a$
- $t_0 = t_a$
- $t_N = t_b$

* Zu jeder Zeit t_i wählen wir ein Punkt x_i aus, solch dass $x_0 = x_a$ und $x_N = x_b$.
* Wir bauen einen Pfad wenn wir die Punkte miteinander verbinden.
* Für eine gewisse ϵ können wir die Summe über alle Pfade bauen. Wir müssen "nur" über alle Werte von $x_{i=1,\dots,N-1}$ integrieren:

$$K(b,a) \sim \int\int \cdots \int dx_1\, dx_2 \cdots dx_{N-1}\ \Phi[x(t)]$$

* Wenn $\epsilon \to 0$, dann werden wir alle mögliche Pfade addieren, also was wir machen wollten:

$$K(b,a) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{A} \iint \cdots \int e^{\frac{i}{\hbar} S[b,a]} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \cdots \frac{dx_{N-1}}{A}$$

wobei • A → notwendiger Normalisationsfaktor. Wir brauche diesen Faktor, weil sonst wird der Limes nicht konvergieren.

Wir werden später sehen, dass $\boxed{A = \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m}\right)^{1/2}}$

• $S[b,a] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t)\,dt$ → Linienintegral über dem Pfad $(x_0, x_1, x_2, \ldots, x_{N-2}, x_{N-1}, x_b)$

* Wir können die Integral von $K(b,a)$ in einer kompakten Notation zusammenfassen:

$$\boxed{K(b,a) = \int_a^b e^{iS[b,a]/\hbar}\, \mathcal{D}x(t)}$$ → Das ist ein <u>Pfadintegral</u>

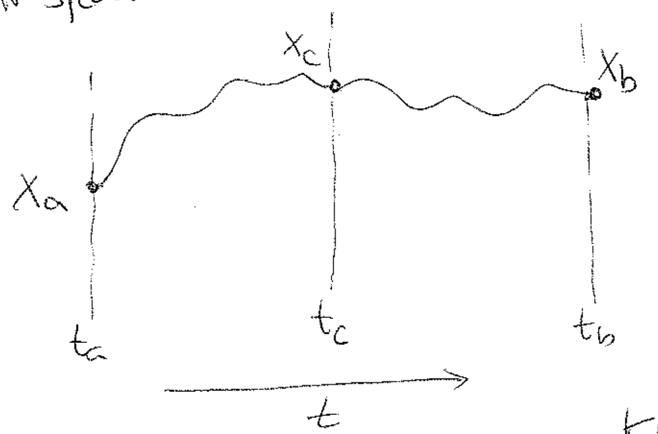
Wir nennen $K(b,a)$ <u>der Propagator</u> zwischen a und b.

* Nehmen wir nun eine Zeit t_c zwischen t_a und t_b. Aus der Definition von Wirkung ist es klar, dass

$$S[b,a] = S[b,c] + S[c,a]$$

und daher: $K(b,a) = \int_a^b \mathcal{D}x(t)\, e^{\frac{i}{\hbar}(S[b,c] + S[c,a])}$

Wir spalten nun den Pfad in 2 Teilen:



• Wir integrieren über alle Pfaden mit Endpunkte a und c, dann über alle Pfaden mit Endpunkte c und b, und dann wir integrieren über alle x_c

$$K(b,a) = \int dx_c \int_c^b \mathcal{D}x(t)\, e^{\frac{iS[b,c]}{\hbar}} K(c,a)$$

$$= \int dx_c\, K(b,c)\, K(c,a)$$

* Die Amplitude für sukzessive Ereignisse werden multipliziert.
* Wenn wir nun 2 Zeiten t_c und t_d haben, solch dass $t_a < t_d < t_c < t_b$ sind, dann genauso:

$$K(b,a) = \int\int dx_c\, dx_d\, K(b,c)\, K(c,d)\, K(d,a)$$

und für N Intervallen:

$$K(b,a) = \int \cdots \int dx_1 \ldots dx_{N-1}\, K(b,N-1)\, K(N-1,N-2) \ldots K(i+1,i) \ldots K(1,a)$$

solch dass $K(i+1,i) \sim e^{\frac{i}{\hbar} S(i+1,i)} = e^{\frac{i}{\hbar}\int dt\, L(\dot{x}, x, t)}$

* Wenn die Zeitintervalle $t_{i+1} - t_i = \epsilon \to 0$, dann

$$\boxed{K(i+1,i) \cong \frac{1}{A} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon L\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\epsilon}, \frac{x_{i+1}+x_i}{2}, \frac{t_{i+1}+t_i}{2}\right)\right]}$$

→ Propagator zwischen 2 Punkte $(x_i, t_i) \longrightarrow (x_{i+1}, \underset{t_i+\epsilon}{t_{i+1}})$

---

* SCHRÖDINGER-GLEICHUNG

* Bisher haben wir studiert, wie ist die Amplitude eines Teilchen, von einem Punkt a zu einem Punkt b zu gehen. Mehrmals sind wir nur an der Amplitude von einem Teilchen auf einem Ort und zu einer Zeit zu sein, ohne weitere Information über wie dieses Teilchen an diesem Punkt angekommen ist.
* Das bringt uns natürlich zu der bekannten Idee um **Wellenfunktion** $\psi(x,t)$ → die Amplitude zu finden ein Teilchen in x zur Zeit t, oder anders betrachtet die Amplitude, dass ein Teilchen ~~aus~~ irgendwelcher ursprüngliche Situation, zur Zeit an x angekommen ist.

* Daher $K(x_2,t_2 ; x_1 t_1) = \psi(x_2,t_2)$ ist eigentlich eine Wellenfunktion. Die Notation $K(x_2,t_2 ; x_1,t_1)$ ergibt natürlich mehr Information, dass das Teilchen vorher in (x_1,t_1) war. Aber vielleicht ist diese Information irrelevant, und deswegen nehmen wir typischerweise einfach $\psi(x_2,t_2)$.
* Aus der Zusammensetzung von Amplituden sukzessiver Ereignisse haben wir dass

$$\boxed{\psi(x_2,t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_2,t_2 ; x_3,t_3)\, \psi(x_3,t_3)\, dx_3}$$

Die physikalische Interpretation ist ziemlich klar. Die totale Amplitude um das Teilchen in x_2 zur Zeit t_2 zu finden, ist die Summe der Amplitude um das Teilchen in x_3 zur Zeit t_3 zu finden, mal die Amplitude um von x_3 zu x_2 zwischen t_3 und t_2 zu gehen.

* Die Name Propagator ist also wohl begründet.
* Nehmen wir nun einen infinitesimalen Zeitintervall ϵ (S. 117):

$$\psi(x,t+\epsilon) = \frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty} dy\, \exp\left[\frac{i\epsilon}{\hbar} L\left(\frac{x-y}{\epsilon}, \frac{x+y}{2}, t\right)\right] \psi(y,t)$$

Für ein Teilchen in 1D in einem Potential $V(x,t)$:

$$L(\dot{x},x,t) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x,t)$$

Daher:

$$\psi(x,t+\epsilon) = \frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty} dy\, \exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m(x-y)^2}{2\epsilon}\right] \exp\left[-\frac{i\epsilon}{\hbar} V\left(\frac{x+y}{2},t\right)\right] \psi(y,t)$$

* Juellen wir nun die Exponentialfunktion

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar}\ \frac{m(x-y)^2}{2\epsilon}\right]$$

Da ϵ sehr klein ist, wenn der Abstand $(x-y)$ ist nicht klein dann $(x-y)^2/\epsilon$ ~~ist~~ sehr groß, und daher schwankt die exp Funktion gewaltig. Daher wird das Integral sehr klein sein. Nur wenn $y-x=\eta$ sehr klein ist wird das Integral signifikant.

$$\psi(x,t+\epsilon) = \frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty} d\eta\ \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right]\exp\left[\frac{-i\epsilon}{\hbar}V\left(x+\frac{\eta}{2},t\right)\right]\psi(x+\eta,t)$$

Die Phase $\frac{m\eta^2}{2\hbar\epsilon}$ ändert sich in einem Radian wenn $\eta\sim\sqrt{\frac{\epsilon\hbar}{m}}$

Nur Werte von η dieser Größenordnung werden eine Rolle spielen. Da wir bis zu $\mathcal{O}(\epsilon)$ interessiert sind, dann sollten wir bis zu $\mathcal{O}(\eta^2)$ entwickeln:

bis zur Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon,\eta^2)$

$$\psi(x,t+\epsilon)\cong\psi(x)+\epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=$$

$$\cong\frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty}d\eta\ e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}}\left[1-\frac{i\epsilon}{\hbar}V(x,t)\right]\left[\psi(x,t)+\eta\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\eta^2}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right]\simeq$$

Eigenschaften der gaußsche Integralen

$$\cong\left[\frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty}d\eta\ e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}}\right]\left[\psi(x,t)-\frac{i\epsilon}{\hbar}V(x,t)\right]$$

$$+\underbrace{\cancel{\left[\frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty}d\eta\ \eta\ e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}}\right]}}_{\to 0}\frac{\partial\psi}{\partial x}+\left[\frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty}d\eta\ \eta^2\ e^{\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}}\right]\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=$$

$$=\left[\frac{1}{A}\left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{1/2}\right]\left[\psi(x,t)-\frac{i\epsilon}{\hbar}V(x,t)\right]+\left[i\frac{\hbar\epsilon}{m}\frac{1}{A}\left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{1/2}\right]\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

* In 0-te Ordnung:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{A}\left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{1/2}\psi(x,t)$$

und daher $\boxed{A = \left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{1/2}}$, als wir auf S. 116 schon postuliert haben.

* Dann:

$$\epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-i\epsilon}{\hbar}V(x,t) - \frac{\hbar\epsilon}{2im}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

Also $\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x,t)\psi}$

* Wir sind also an der Schrödinger-Gleichung (in 1D) angekommen!

---

* PROPAGATOR IN FREIEN RAUM

* Wir werden nun den Pfadintegralformalismus für die Beschreibung eines einfachen Problems anwenden, nämlich die Bewegung eines freien Teilchen in einer Dimension (einfacher geht's nicht!)

* Die Lagrange-Funktion ist also

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2$$

und daher:

$$K(b,a) = \lim_{\epsilon\to 0}\left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{-N/2}\int\dots\int dx_1\dots dx_{N-1}\,\exp\left[\frac{i\epsilon}{\hbar}\frac{m}{2}\left(\frac{x_N-x_{N-1}}{\epsilon}\right)^2\right]\times$$

$$\times\exp\left[\frac{i\epsilon}{\hbar}\frac{m}{2}\left(\frac{x_{N-1}-x_{N-2}}{\epsilon}\right)^2\right]\dots\exp\left[\frac{i\epsilon}{\hbar}\frac{m}{2}\left(\frac{x_1-x_0}{\epsilon}\right)^2\right] =$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0}\left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{-\frac{N}{2}}\int\cdots\int dx_1\ldots dx_{N-1}\, \exp\left[\frac{im}{2\hbar\epsilon}\sum_{i=1}^{N}(x_i-x_{i-1})^2\right]$$

* Hier werden wir einfache <u>Gaußsche Integralen</u> haben:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-p^2x^2\pm qx} = \frac{\sqrt{\pi}}{p}e^{q^2/4p^2}$$

* Rechnen wir zuerst:

$$\left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{-\frac{2}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\, \exp\left[\frac{-m}{2i\hbar\epsilon}\left[(x_2-x_1)^2+(x_1-x_0)^2\right]\right]$$

$$= \left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{-2/2}\underbrace{\left[\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\, \exp\left[\frac{-m}{2i\hbar\epsilon}\left(2x_1^2-2(x_2+x_0)x_1\right)\right]\right]}_{\sqrt{\frac{\pi i\hbar\epsilon}{m}}\exp\left[\frac{m}{4i\hbar\epsilon}(x_0+x_2)^2\right]}\exp\left[\frac{-m}{2i\hbar\epsilon}(x_2^2+x_0^2)\right]$$

$$= \left(\frac{2\pi i\hbar(2\epsilon)}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{-m}{2i\hbar(2\epsilon)}(x_2-x_0)^2\right]$$

* Nun wir multiplizieren das mal $\left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{-1/2}\exp\left(\frac{-m}{2i\hbar\epsilon}(x_3-x_2)^2\right)$ und wir integrieren nach x_2. Die Rechnung ist wie vorher und und wir bekommen:

$$\left(\frac{2\pi i\hbar}{m}(3\epsilon)\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{-m}{2i\hbar(3\epsilon)}(x_3-x_0)^2\right]$$

usw. Nach N-1 Schritte:

$$\left(\frac{2\pi i\hbar}{m}(N\epsilon)\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{-m}{2i\hbar(N\epsilon)}(x_N-x_0)^2\right]$$

Da $N\epsilon = t_b - t_a$

$x_N - x_0 = x_b - x_a$

dann:

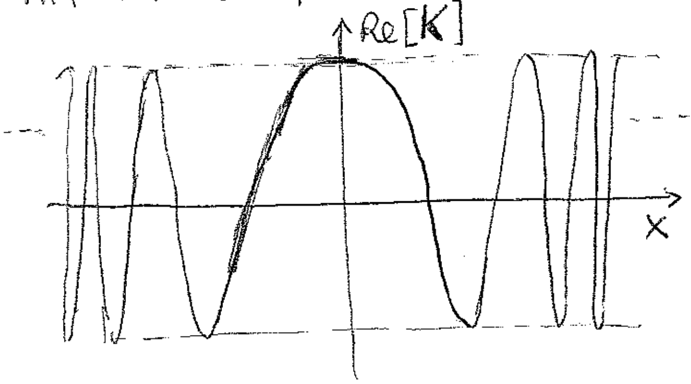
$$\boxed{K(b,a) = \left[\frac{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}{m}\right]^{-1/2} \exp\left[\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\right]} \rightarrow \text{Propagator eines freien Teilchens}$$

* Die Analyse dieses Propagators wird uns erlauben, interessante und tiefe Vernetzungen zwischen der klassischen Physik und schon bekannten Ideen der Quantenmechanik zu entdecken.

* Sei $(x_a, t_a) = (0,0)$; $(x_b, t_b) = (x,t)$; dann:

$$K(x,t;0,0) = \left(\frac{2\pi i \hbar t}{m}\right)^{-1/2} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right)$$

Nehmen wir zuerst eine gewisse Zeit t, und gucken wir uns K als Funktion von x an. Der reelle Teil von $K(x)$ sieht so aus:



* Je größer ist x, desto schneller die Schwankungen.
* Wenn x groß ist, dann ist der Abstand zwischen Nullstellen quasi-konstant (mindestens für wenige Schwankungen).

$\Rightarrow$ Die Amplitude verhaltet sich ungefähr wie eine Sinus-Funktion mit einer (langsam) variablen Wellenlänge λ. Es ist sehr interessant, diese Wellenlänge zu untersuchen, weil die eine "alte Freundin" von uns ist.

* Die Wellenlänge erfüllt:

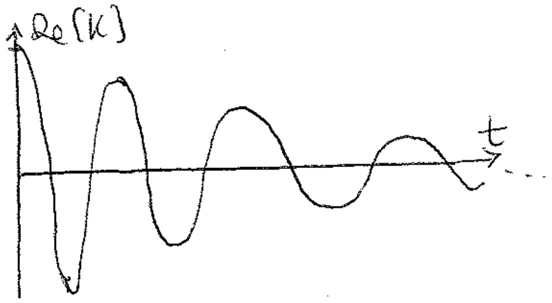
$$2\pi = \frac{m}{2\hbar t}(x+\lambda)^2 - \frac{m}{2\hbar t}x = \frac{mx\lambda}{\hbar t} + \frac{m\lambda^2}{2\hbar t} \overset{x \gg \lambda}{\simeq} \lambda \frac{m}{\hbar}(x/t)$$

Dann $\quad \lambda = \dfrac{2\pi\hbar}{m(x/t)}$

* Klassisch betrachtet ein Teilchen, das in einer Zeit von 0 bis X geht, hat also eine Geschwindigkeit X/t, und daher ein Impuls $m(X/t) = p$.

Also, die Wellenlänge, die die Variation der quantenmechanische Amplitude beschreibt ist $\boxed{\lambda = \frac{h}{p}}$ → und das ist natürlich nichts anders als die wohl bekannte de Broglie-Wellenlänge!!

* Nun nehmen wir einen gewissen Ort X, und fassen wir K als Funktion der Zeit t. Der reelle Teil von K(t) sieht so aus:



* Die Frequenz und Amplitude der Schwankungen ändert sich mit t.
* Für große t sind die Schwankungen quasi-periodisch.

* Wenn wir die Änderung der Amplitude der Schwankungen vernachlässigen, dann die Periode der Schwankungen (T) erfüllt:

$$2\pi = \frac{mX^2}{2\hbar t} - \frac{mX^2}{2\hbar(t+T)} \simeq \frac{mX^2}{2\hbar t^2}\left(\frac{T}{1+T/t}\right) \overset{t \gg T}{\simeq} \frac{m}{2\hbar}\left(\frac{X}{t}\right)^2 T$$

Sei $T = \frac{2\pi}{\omega}$, wobei ω = Kreisfrequenz. Dann

$$\omega \simeq \frac{m}{2\hbar}\left(X/t\right)^2 \longrightarrow \hbar\omega = \frac{1}{2} m \left(X/t\right)^2 \Rightarrow$$ die kinetische Energie.

Also $\boxed{E = \hbar\omega}$ → Wir haben also die wohl bekannte Verbindung zwischen Energie und Zeitabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsamplitude.

* Die klassische Ideen von Impuls und Energie sind also ganz einfach zu erweitern bis in die Quantenmechanik. Wenn die Amplitude geht wie e^{ikx} → das Teilchen hat Impuls $\hbar k$, und wenn die als $e^{-i\omega t}$ geht → das Teilchen hat Energie $\hbar\omega$.

* HARMONISCHER OSZILLATOR

* Wir haben gerade gesehen, dass für ein freies Teilchen:

$$K(b,a) \sim \exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_b-x_a)^2}{(t_b-t_a)}\right]$$

Für ein klassisches freies Teilchen: $L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 = \frac{m}{2}v^2$ Konstante Geschwindigkeit ($v = x/t$)

Dann die klassische Wirkung ist $S_{cl} = \int L\,dt = \frac{mv^2}{2}t = \frac{mx^2}{2t}$

Dann $$\boxed{K(b,a) \sim \exp\left[\frac{i}{\hbar}S_{cl}(b,a)\right]}$$

* Diese interessante Eigenschaft ist eigentlich immer erfüllt wenn $L(\dot{x},x,t)$ quadratisch in x und $\dot{x}$ ist. Das ist natürlich so für das freie Teilchen, aber auch so für den harmonischen Oszillator:

$$L = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)$$

Die klassische Wirkung ist der Form:

$$S_{cl}(b,a) = \frac{m\omega}{2\sin\omega(t_b-t_a)}\left[(x_a^2+x_b^2)\cos\omega(t_b-t_a) - 2x_a x_b\right]$$

[* Bemerkung: Für den harmonischen Oszillator $\ddot{x} = -\omega^2 x$, und

$$S = \int L\,dt = \frac{m}{2}\int dt\,(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) = \frac{m}{2}\int dt\left[\frac{d}{dt}(x\dot{x}) - \cancel{x\ddot{x}} - \cancel{\omega^2 x^2}\right] =$$

$$= \frac{m}{2}(\dot{x}_b x_b - \dot{x}_a x_a).$$

Andererseits: $x = A\cos\omega t + B\sin\omega t \to x\dot{x} = \frac{\omega}{2}\left[(B^2-A^2)\sin 2\omega t + 2AB\cos 2\omega t\right]$

Da $x_{a,b} = A\cos\omega t_{a,b} + B\sin\omega t_{a,b}$ $\to A = \frac{x_a\sin\omega t_b - x_b\sin\omega t_a}{\sin\omega(t_b-t_a)}$

$\to B = \frac{x_b\cos\omega t_a - x_a\cos\omega t_b}{\sin\omega(t_b-t_a)}$

Mit einigen Rechnungen kriegt man nun was da oben für $S_{cl}(b,a)$ steht.]

* Sei $\bar{x}(t)$ der klassische Pfad zwischen a und b.

Sei $x(t) = \bar{x}(t) + \eta(t)$ ein anderer Pfad:

$$S[x(t)] = S[\bar{x}(t) + \eta(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{m}{2}(\dot{\bar{x}}^2 + 2\dot{\bar{x}}\dot{\eta} + \dot{\eta}^2) - \frac{m\omega^2}{2}(\bar{x}^2 + 2\bar{x}\eta + \eta^2) \right\}$$

$$= S(\bar{x}(t)) + \underbrace{\int_{t_a}^{t_b} dt \{ \underbrace{m\dot{\bar{x}}\dot{\eta} - m\omega^2 \bar{x}\eta}_{m\left[\frac{d}{dt}[\eta\dot{\bar{x}}] - \eta\ddot{\bar{x}} - m\omega^2\bar{x}\eta\right]} \}}_{m[\eta\dot{\bar{x}}]_a^b = 0 \text{ weil } \eta_a = \eta_b = 0} + \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{m}{2}\dot{\eta}^2 - \frac{m\omega^2}{2}\eta^2\right]$$

$$- \eta\ddot{\bar{x}} - m\omega^2\bar{x}\eta \to 0$$

Dann

$$S[x(t)] = S_{cl}(b,a) + \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{m}{2}\dot{\eta}^2 - \frac{m\omega^2}{2}\eta^2 \right\}$$

Dann

$$K(b,a) = \int \mathcal{D}x(t)\, e^{iS[x(t)]/\hbar} = e^{iS_{cl}(b,a)/\hbar} \int \mathcal{D}x(t)\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{m\dot{\eta}^2}{2} - \frac{m\omega^2}{2}\eta^2\right]}$$

Das Integral über die Pfaden hängt nicht von S_{cl}.
Wir können $\mathcal{D}x(t) = \mathcal{D}\eta(t)$, sodass $\eta(t_a) = \eta(t_b) = 0$

$$= e^{iS_{cl}(b,a)/\hbar} \underbrace{\int_0^0 \mathcal{D}\eta(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{m\dot{\eta}^2}{2} - \frac{m\omega^2}{2}\eta^2\right)\right]}_{\text{Das hier ist nur eine Funktion der Zeiten } t_a \text{ und } t_b \Rightarrow F(t_a,t_b)}$$

Also: $K(b,a) = F(t_a,t_b)\, e^{iS_{cl}(b,a)/\hbar}$

(**Bemerkung**: Eine ähnliche Form hatte der Propagator des freien Teilchens (S. 122))

* Die Evaluation von $F(t_a,t_b)$ sieht kompliziert aus, ist sie aber nicht. Es geht relativ einfach mit Hilfe der Fourier Reihen.

Sei, der Einfachkeit halber, $t_a=0$ und $t_b=T$. Alle Pfaden $\eta(t)$, die in $t=0$ in $x=0$ sind und noch mal in $t=T$ in $x=0$ sind, können als eine Sinus-Reihe mit Periode T geschrieben werden:

$$\eta(t)=\sum_n a_n \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right)$$

* Wir können nun die Pfade als Funktionen der Koeffizienten $\{a_n\}$ verstehen (anstatt Funktionen der Punkten $\eta_j=\eta(t_j)$).

Dann; anstatt $dx_1\cdots dx_{N}\Longrightarrow J\,da_1\cdots da_N$ wobei J die Jakobi-Determinante ist (eine Konstante).

* Dann $\displaystyle\int_0^T dt\,\dot{\eta}^2=\sum_{m,n}\frac{m\pi}{T}\frac{n\pi}{T}a_m a_n\int_0^T dt\cos\left(\frac{m\pi t}{T}\right)\cos\left(\frac{n\pi t}{T}\right)$

$$=\frac{T}{2}\sum_n\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 a_n^2$$

und genauso

$$\hookrightarrow \int_0^T dt\,\eta^2=\frac{T}{2}\sum_n a_n^2$$

· Dann:

$$F(T)=J\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\frac{da_1}{A}\cdots\frac{da_N}{A}\exp\left\{\sum_{n=1}^{N}\frac{imT}{2\hbar\cdot 2}\left[\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2-\omega^2\right]a_n^2\right\}$$

Die Gauß-Integralen sind einfach zu erledigen:

$$\int_{\infty}^{\infty}\frac{da_n}{A}\left\{\frac{im}{2\hbar}\left(\frac{n^2\pi^2}{T^2}-\omega^2\right)a_n^2\right\}=\left(\frac{n^2\pi^2}{T^2}-\omega^2\right)^{-1/2}$$

und damit

$$F(T) = \underbrace{J \underbrace{\prod_{n=1}^{N} \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2}\right)^{-1/2}}_{\omega\text{-unabhängig}}}_{\downarrow N\to\infty \atop \text{Konstante} \equiv C} \underbrace{\prod_{n=1}^{N} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2\pi^2}\right)^{-1/2}}_{\downarrow N\to\infty \atop \left(\frac{\sin\omega T}{\omega T}\right)^{-1/2}}$$

Dann $F(T) = C \left(\frac{\sin\omega T}{\omega T}\right)^{-1/2}$

C ist ω-unabhängig, also für $\omega = 0 \Rightarrow$ freies Teilchen

$$\Rightarrow F(T) = C = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2}$$

Also $F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin\omega T}\right)^{1/2}$

Der <u>vollständige Propagator</u> des harmonischen Oszillators ist also:

$$\boxed{K(b,a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin\omega T}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T}\left[(x_a^2 + x_b^2)\cos\omega T - 2x_a x_b\right]\right]}$$

* Stationäre Zustände

* Nun werden wir die Schrödinger-Darstellung der stationären Zustände und den Pfadintegral-Formalismus verknüpfen.

* Ich erinnere euch, dass für stationäre Zustände die Zeitentwicklung ganz einfach ist:

$$\psi_n(x,t) = e^{-iE_nt/\hbar}\phi_n(x) \qquad \text{wobei} \quad H\phi_n(x) = E_n\phi_n(x)$$

und die Eigenfunktionen erfüllen Orthonormalität:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi_m^*(x)\phi_n(x) = \delta_{m,n}$$

* Eine allgemeine Wellenfunktion $f(x)$ kann in dieser Basis geschrieben werden

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x) \qquad \text{wobei} \quad a_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi_n^*(x) f(x)$$

Daher:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x)\int_{-\infty}^{\infty} dy\, \phi_n^*(y) f(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[\sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x)\phi_n^*(y)\right] f(y)$$

Sei $f(x) = \psi(x,t_1)$ für eine gewisse Zeit t_1.

Dann:

$$\psi(x,t_2) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t_2-t_1)}\phi_n(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dy \underbrace{\left[\sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x)\phi_n^*(y)\, e^{-\frac{iE_n}{\hbar}(t_2-t_1)}\right]}_{K(x,t_2;\,y,t_1)} \psi(y,t_1)$$

Wir haben also die Beziehung zwischen den Propagator (S. 118) und die Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung:

$$\boxed{K(x_2,t_2;\,x_1,t_1) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{iE_n}{\hbar}(t_2-t_1)}\phi_n(x_2)\phi_n^*(x_1)}$$

für $t_2 > t_1$ und Null sonst.

* Diese Gleichung ist ziemlich interessant. Man kann damit z.B. die Eigenfunktionen und Eigenwerte des harmonischen Oszillators zurückbekommen. Prüfen wir das.

* Aus S. 127 kennen wir den Propagator des harmonischen Oszillators:

$$\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}\right)^{1/2}\exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T}\left[(x_1^2+x_2^2)\cos\omega T-2x_1x_2\right]\right]=\sum_{n=1}^{\infty}e^{-\frac{iE_nT}{\hbar}}\phi_n(x_2)\phi_n^*(x_1)$$

Wir können die linke Seite in Potenzen von $e^{-i\omega T}$ expandieren

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}e^{-(m\omega/2\hbar)(x_1^2+x_2^2)}\,e^{-i\omega T/2}\left[1+\frac{1}{2}e^{-2i\omega T}\right]\times$$

$$\times\left\{1+\frac{2m\omega}{\hbar}x_1x_2e^{-i\omega T}+\frac{4m^2\omega^2}{2\hbar^2}x_1^2x_2^2e^{-2i\omega T}-\frac{m\omega}{\hbar}(x_1^2+x_2^2)e^{-2i\omega T}+\dots\right\}$$

* Die niedrigste Ordnung ist:

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}e^{-(m\omega/2\hbar)(x_1^2+x_2^2)}\,e^{-i\omega T/2}=e^{-iE_0T/\hbar}\,\phi_0(x_2)\phi_0^*(x_1)$$

Dann
$$\left.\begin{array}{l}E_0=\hbar\omega/2\\ \phi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\end{array}\right\}\text{ Grundzustand des harmonischen Oszillators}$$

(Bemerkung: Wir haben $\phi_0(x)\in\mathbb{R}$ ausgewählt)

* Die nächste Ordnung ist:

$$e^{-i\omega T/2}\,e^{-i\omega T}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)(x_1^2+x_2^2)}\,\frac{2m\omega}{\hbar}x_1x_2=e^{-i\frac{E_1T}{\hbar}}\phi_1(x_2)\phi_1^*(x_1)$$

Dann $E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$ und $\phi_1(x)=\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x\,\phi_0(x)$

usw. Die Ergebnisse passen natürlich mit den Ergebnissen der direkte Lösung der Schrödinger-Gleichung überein.

* STÖRUNGSTHEORIE

* Wir haben gesehen, dass für ein Teilchen in 1D der Propagator ist der Form:

$$K(b,a) = \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x,t)\right)\right\}$$

Wir haben gerade gesehen, dass wenn $V(x)$ quadratisch in x ist, dann K ist exakt lösbar. Das Problem ist, daß für mehreren interessanten Fällen V nicht dieser Form ist.

* Wir werden nun sehen, was passiert wenn $\int_{t_a}^{t_b} V(x,t)\,dt \ll \hbar$.

Dann:

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt\, V(x,t)\right\} = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt\, V(x,t) + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\left[\int_{t_a}^{t_b} dt\, V(x,t)\right]^2 + \dots$$

Wenn wir diese Entwicklung in $K(b,a)$ einsetzen, dann bekommen wir die entsprechende Entwicklung für den Propagator:

$$K(b,a) = K_0(b,a) + K_1(b,a) + K_2(b,a) + \dots$$

wobei

$$K_0(b,a) = \int_a^b \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\frac{m}{2}\dot{x}^2\,dt\right]\mathcal{D}x(t) \longrightarrow \text{Propagator im freien Raum (S. 122)}$$

$$K_1(b,a) = -\frac{i}{\hbar}\int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt\,\frac{m}{2}\dot{x}^2\right]\int_{t_a}^{t_b} dt_c\, V[x(t_c),t_c]$$

$$K_2(b,a) = \frac{-1}{2\hbar^2}\int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt\,\frac{m}{2}\dot{x}^2\right]\int_{t_a}^{t_b} dt_c\, V[x(t_c),t_c]\int_{t_a}^{t_b} dt_d\, V(x(t_d),t_d)$$

usw.

* Studieren wir erstmals den Propagator K_1. Wir können K_1 in

der folgenden Form schreiben:

$$K_1(b,a) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt_c \; F(t_c)$$

wobei

$$F(t_c) = \int_a^b \mathcal{D}x(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt \; \frac{m}{2}\dot{x}^2\right] V[x_c, t_c] \qquad \text{wobei } x_c = x(t_c)$$

Zerlegung S. 116

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx_c \int_c^b \mathcal{D}x(t) \int_a^c \mathcal{D}x(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_c}^{t_b} dt \frac{m}{2}\dot{x}^2\right] V[x_c, t_c] \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_c} dt \frac{m}{2}\dot{x}^2\right]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx_c \; K_0(b,c)\, V(c)\, K_0(c,a)$$

* Die Bedeutung dieses Ausdruckes ist ganz einfach zu verstehen.
  * Das Teilchen fängt in a an, und bewegt sich frei bis nach c.
  * In c streut das Teilchen auf das Potential ($V(c)$).
  * Nachher und bis nach b ist das Teilchen noch mal frei.
  * Die Amplitude für die Streuung zur Zeit t_c ist $F(t_c)$.
* Die Amplitude für die Streuung zur Zeit t_c ist $F(t_c)$. Wenn wir über alle $t_a < t_c < t_b$ integrieren, dann bekommen wir $K_1(b,a)$.

* Genauso kann man zeigen, dass:

$$K_2(b,a) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int d\tau_c \int d\tau_d \; K_0(b,d)\, V(d)\, K_0(d,c)\, V_0(c)\, K_0(c,a)$$

$$\downarrow$$

$$d\tau = dx\,dt$$

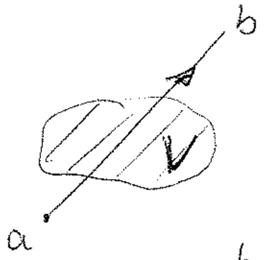
[Bemerkung: hier t_d geht immer noch von t_a bis t_b aber t_c geht von t_d bis t_b. Das erklärt warum der Vorfaktor 1/2 verschwunden ist]

Also:
* Freie Bewegung von a bis c
* Streuung in c
* Freie Bewegung von c bis d
* Streuung in d
* Freie Bewegung von d bis b

usw.

* Mit dieser Interpretation können wir $K(b,a)$ als eine Summe von Alternativen darstellen:

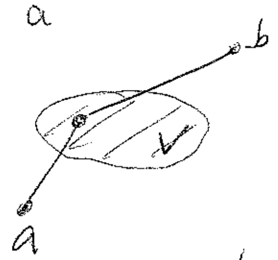
① Das Teilchen ist nicht gestreut



$\Longrightarrow K_0(b,a)$

$+$

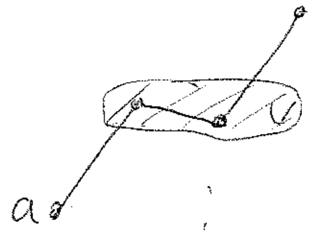
② Das Teilchen ist einmal gestreut



$\Longrightarrow K_1(b,a)$

$+$

③ Das Teilchen ist zweimal gestreut



$\Longrightarrow K_2(b,a)$

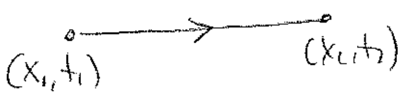
$+$

⋮

SUMME: $K(b,a)$

* Diese Diagramme sind eine Art Feynman-Diagramme. Wir können ziemlich einfach die Amplitude eines Streuungsprozesses wenn wir 2 einfache Feynman-Regeln folgen:

* Jede Linie



$\Longrightarrow$ Freier Propagator $K_0(x_2,t_2\,;\,x_1,t_1)$

* Jede Ecke

$\Longrightarrow$ Faktor $-\frac{i}{\hbar}V(x,t)$ und Integration über x und t.

* Quellen wir nun den Kernel $K(b,a)$ noch mal:

$$K(b,a) = K_0(b,a) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(b,c)\,V(c)\,K_0(c,a)\,d\tau_c$$
$$+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \iint d\tau_c\, d\tau_d\, K_0(b,c)V(c)K_0(c,d)V(d)K_0(d,a) + \dots$$
$$= K_0(b,a) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(b,c)V(c)\left[K_0(c,a) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(c,d)V(d)K_0(d,a)\,\tau_d + \dots\right]\tau_c$$

Also

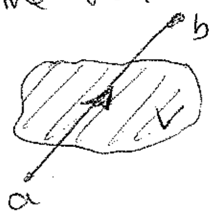
$$\boxed{K(b,a) = K_0(b,a) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(b,c)\,V(c)\,K(c,a)\,d\tau_c}$$

Das ist im Prinzip exakt, aber das ist nicht eine Lösung sondern eine integrale Gleichung für ~~den~~ Propagator K, wenn wir K_0 kennen.

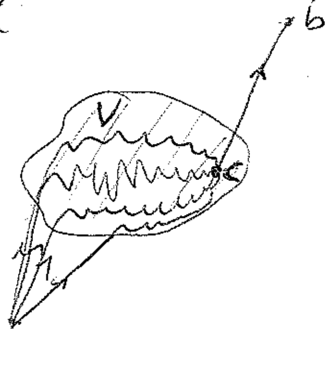
[Bemerkung: Wir haben nur den Fall von schwachen Potentialen V studiert. Wir können ähnlicherweise die Störungstheorie machen, wenn $V = U + \tilde{U}$, wobei $\tilde{U}$ ist klein aber U nicht, aber wobei der Kernel K_U für das Potential U "einfach" zu rechnen ist. Wie schon erwähnt, das ist besonders der Fall von quadratischen Potentialen. Zum Beispiel wir könnten Störungen über den harmonischen-Oszillator-Potential so betrachten. In den Fall würden wir da oben, K_U anstatt K_0 haben.]

* Die totale Amplitude ist also die Summe von 2 Alternativen

(i) Keine Streuung (K_0)



(i) Eine oder mehrere Streuungen bis nach c. Danach keine Streuung mehr.



* Auf S. 118 haben wir gesehen, daß

$$\psi(b) = \int K(b,a)\,\psi(a)\,dx_a$$

Daher, aus der Gleichung für $K(b,a)$ auf S. 133:

$$\boxed{\psi(b) = \psi_0(b) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(b,c)\,V(c)\,\psi(c)\,d\tau_c}$$

wobei $\psi_0(b)$ wäre die Lösung ohne Potential

* Wir haben etwas ähnliches schon mal gesehen, und zwar auf S. 25 in unserer Diskussion der Streutheorie (!!)

* Wir können nun diese Integral-Gleichung entwickeln:

$$\psi(b) = \psi_0(b) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(b,c)\,V(c)\,\psi_0(c)\,d\tau_c$$
$$+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \iint K_0(b,c)\,V(c)\,K_0(c,d)\,V(d)\,\psi_0(d)\,d\tau_c\,d\tau_d + \ldots$$

Das ist nicht mehr als die Born'sche-Reihe von S. 28, und die erste Zeile ist die 1. Born'sche-Näherung!

---

* PFADINTEGRALE UND STATISTISCHE MECHANIK

* Wir haben schon erwähnt, dass Pfadintegralen sehr nützlich für die statistische Mechanik sein können. Quellen wir ganz kurz warum.
* In statistischer Mechanik ist die Idee von Zustandssumme entscheidend. Wir werden nun sehen, dass Pfadintegralen sehr nützlich für die Berechnung von Zustandssummen sind.
* Wir starten mit der (kanonischen) Definition von Zustandssummen

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

wobei $\beta = 1/k_BT$ ($T \equiv$ Temperatur) und E_n sind die Energieniveaus des Systems.

* Sei H der Hamilton-Operator, und $|n\rangle$ die Eigenzustände von H mit Eigenenergie E_n. Dann

$$\int dx\, |x\rangle\langle x| = \mathbb{1} \qquad |x\rangle \equiv \text{Ortszustände}$$

$$Z = \sum_n \langle n|e^{-\beta H}|n\rangle =$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$$

$$= \int dx \sum_n \langle n|x\rangle\langle x|e^{-\beta H}|n\rangle = \int dx \sum_n \langle x|e^{-\beta H}|n\rangle\langle n|x\rangle =$$

$$= \int dx\, \langle x|e^{-\beta H}|x\rangle$$

* Was hat das mit Pfadintegralen zu tun? Gucken wir das.
* Wir können den Propagator $K(x_2,t_2;x_1,t_1)$ als ~~eine~~ Matrix-Element der folgenden Form verstehen:

$$K(x_2,t_2;x_1,t_1) = \underset{\text{Endzustand}}{\langle x_2|}\,\underbrace{e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar}}_{\text{Entwicklungsoperator}}\,\underset{\text{Ursprungzustand}}{|x_1\rangle}$$

Sei $t_2 - t_1 = t \longrightarrow -i\tau = -i\hbar\beta$ ("Zeitintervall" $\hat{=} -i\hbar\beta$) → Imaginäre Zeit

$x_2 = x_1 = x$ (geschlossene Pfaden!)

Dann $K(x, -i\hbar\beta; x, 0) = \langle x|e^{-\beta H}|x\rangle$

Da $K(b,a) = \int_a^b e^{iS(b,a)/\hbar}\, \mathcal{D}x(t)$

und $S(b,a) = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x},x,t)\,dt = \int_{t_a}^{t_b}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x)\right]dt$

$$\xrightarrow{t \Rightarrow -i\tau} \int_0^{\hbar\beta}(i\,d\tau)\left[-\frac{m}{2}\left(\frac{\partial x}{\partial\tau}\right)^2 - V(x)\right] = -i\int_0^{\hbar\beta} d\tau\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\partial x}{\partial \tau}\right)^2 + V(x)\right]$$

Dann
$$\boxed{Z = \int \mathcal{D}x(t)\,\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta} d\tau\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\partial x}{\partial\tau}\right)^2 + V(x)\right]\right\}}$$

wobei $x(\hbar\beta) = x(0)$

* Wir haben also die Zustandssumme als ein Pfadintegral geschrieben. Dieser Ausdruck ist extrem wichtig in statistischer Physik (besonders nützlich wenn man z.B. Vielteilchensysteme untersucht). Wir werden hier nicht alle Anwendungen untersuchen, sondern nur ein Beispiel.

* Quellen wir den Harmonischen Oszillator.

Aus S. 124:

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega(t_b-t_a)}}\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega(t_b-t_a)}\left[(x_a^2+x_b^2)\cos\omega(t_b-t_a)-2x_bx_a\right]\right\}$$

Sei $\left.\begin{matrix} x_b=x_a=x \\ t_b-t_a=-i\hbar\beta \end{matrix}\right\}$ dann:

$$\langle x|e^{-\beta H}|x\rangle=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh\beta\hbar\omega}}\exp\left\{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}\left(\frac{2\cosh\beta\hbar\omega-2}{\sinh\beta\hbar\omega}\right)\right\}$$

Also

$$Z=\int dx\,\langle x|e^{-\beta x}|x\rangle\overset{\text{gaußsche Integrale}}{=}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh\beta\hbar\omega}}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m\omega}\,\frac{\sinh\beta\hbar\omega}{2\cosh\beta\hbar\omega-2}}$$

$$=\frac{1}{2\sinh\beta\hbar\omega/2}=\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}=\sum_{n=0}^{\infty}e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega}$$

und das ist natürlich die Zustandssumme des harmonischen Oszillators (da $E_n=(n+1/2)\hbar\omega$).

* Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)-Methode

* Gucken wir nun eine interessante (und wichtige) Methode, die sogen. WKB- oder Semiklassische-Methode. Wie wir bald sehen werden, ist diese Methode direkt mit den Pfadintegralen verknüpft.

* Nehmen wir ein Teilchen mit Energie E ~~auf~~ einer Dimension, das sich in einem konstanten Potential V bewegt. Die Eigenfunktionen sind also

$$\psi(x) = \psi(0)\, e^{\pm ipx/\hbar} \qquad \text{wobei } p = \sqrt{2m(E-V)}$$

und $\mp$ bedeutet linke- oder rechts-gehenden Ebenewellen. Die allgemeine Lösung ist eine Kombination der beiden. Die reelle (oder imaginäre) Teile von ψ schwanken im Raum mit einer Wellenlänge $\lambda = 2\pi\hbar/p$ (also die de Broglie-Wellenlänge).

* Ok. Nehmen wir nun, dass V nicht konstant ist, aber es ändert sich ganz langsam (was heißt das, werden wir sofort sehen). Dann auf einem kleinen Raumbereich V(x) ist fast konstant, und ψ verhaltet sich wie eine Ebenewelle mit einer "lokalen" Wellenlänge

$$\lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)} \qquad \text{wobei } p(x) = \sqrt{2m(E-V(x))}$$

Da $\lambda = \lambda(x)$, die akkumulierte Phasenverschiebung zwischen $x = x_0$ und x wird von einem Integral gegeben:

$$\psi(x) = \psi(x_0) \exp\left\{\pm \frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p(x')\,dx'\right\}$$

$$\boxed{\psi(x) = \psi(x_0) \exp\left\{\pm \frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} \sqrt{2m[E-V(x')]}\,dx'\right\}}$$

* Diese Formel ist nur korrekt wenn $\lambda(x)$ sich nur sehr langsam mit x ändert $\left|\frac{\delta\lambda}{\lambda}\right| = \left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1$

* Diese intuitive Idee läßt sich ein bisschen rigoröser herleiten. Machen wir das.

Nehmen wir die Schrödinger-gleichung:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\right)\psi(x) = \left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2}p^2(x)\right]\psi(x) = 0$$

Nehmen wir $\psi(x) = e^{i\phi(x)/\hbar}$ (wobei $\phi(x)$ nicht unbedingt reell ist)

Dann:

$$\boxed{-\left(\frac{\phi'}{\hbar}\right)^2 + \frac{i\phi''}{\hbar} + \frac{p^2(x)}{\hbar^2} = 0}$$

* Wir expandieren nun ϕ als eine Potenzreihe um $\hbar$:

$$\phi = \phi_0 + \hbar\phi_1 + \hbar^2\phi_2 + \dots$$

Die Logik hinter dieser Reihe ist einfach zu verstehen. Wenn $\hbar \to 0$ dann $\lambda = 2\pi\hbar/p \to 0$, und daher für alle Potentialen V ist unsere Näherung von S. 137 besser und besser. Im Gegenteil, Korrekturen zu der Näherung von S. 137 kommen aus der Tatsache, daß $\hbar \neq 0$.

* Die WKB-Näherung (oder semiklassische Näherung) kommt wenn man nur die erste 2 Glieder der Reihe behaltet.

* Machen wir also bis zum Ordnung $O(\hbar^0)$:

$$\frac{-(\phi_0')^2 + p^2(x)}{\hbar^2} + \frac{i\phi_0'' - 2\phi_1'\phi_0'}{\hbar} = 0$$

* Nehmen wir zuerst Glieder mit $\hbar^{-2}$; dann:

$$\phi_0' = \pm p(x) \longrightarrow \phi_0(x) = \pm \int^x p(x')\,dx'$$

und daher:

$$\psi(x) = \psi(x_0)\, \exp\left\{ \pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x} p(x')\,dx' \right\}$$

also was wir auf S. 137 schon bekommen haben.

* Suchen wir nun den $\hbar^{-1}$-Glied:

$$i\phi_0'' = 2\phi_1'\phi_0' \longrightarrow \frac{\phi_0''}{\phi_0'} = -2i\phi_1' \longrightarrow \ln \phi_0' = -2i\phi_1 + \underset{\text{Konstante}}{C}$$

Dann $\quad \phi_1 = i \ln(\phi_0')^{1/2} + \frac{c}{2i} = i \ln\sqrt{p} + \tilde{c}$

Also bis zum Ordnung $\mathcal{O}(\hbar^0)$:

$$\psi(x) = C\, e^{-\ln\sqrt{p(x)}}\, e^{\pm \frac{i}{\hbar}\int^x p(x')\,dx'}$$

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} \int^x p(x')\,dx' \right]$$

WKB-Näherung

$$\boxed{\psi(x) = \psi(x_0) \sqrt{\frac{p(x_0)}{p(x)}}\, \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x} p(x')\,dx' \right]}$$

* Wir werden nun sehen, dass es eine Verbindung zwischen WKB und Pfadintegralen gibt.

Der Einfachheit halber betrachten wir $V<0$ ($V \xrightarrow[|x|\to\infty]{} 0$) und Teilchen mit $E>0$ (also ohne Umkehrpunkte).

* Aus S. 128

$$K(xt;x'0) = \sum_n \phi_n(x)\phi_n^*(x')\, e^{-iE_n t/\hbar}$$

In unserem Fall haben wir ein Kontinuum von Zustände mit $E>0$. Da $V \xrightarrow[|x|\to\infty]{} 0$ in ∞: $p_\infty = \pm\sqrt{2mE}$. Wir benutzen p_∞ für die Parametrisierung der Eigenzustände (von nun an $p_\infty \equiv p$).

Dann:

$$K(xt;x'0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar}\, \phi_p(x)\phi_p^*(x')\, e^{-ip^2 t/2m\hbar}$$

(* Bemerkung: Im Prinzip sollte man dazu die gebundene Zustände addieren, aber die werden in dieser Diskussion keine Rolle spielen)

* Sei die Transform:

$$K(x,x',z) = \int_0^{\infty} dt\, K(x,t;x'0)\, e^{izt/\hbar} \qquad \text{wobei } z = E+i\epsilon$$

(Bemerkung: $\epsilon>0$ ist infinitesimal klein und nur da, um die Konvergenz für $t\to\infty$ zu sichern)

Dann, wenn wir die Zeit-Integral machen, bekommen wir

$$K(x,x',z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2m\,dp}{2\pi i}\; \frac{\phi_p(x)\phi_p^*(x')}{p^2-2mE-i\epsilon}$$

Ohne weitere Rechnungen, schreibe ich hier die Lösung:

$$K(x,x',z) + K(x',x,z)^* = \sqrt{\frac{m}{2E}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi_p(x)\phi_p^*(x')\left[\delta(p-\sqrt{2mE}) + \delta(p+\sqrt{2mE})\right]$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2E}}\left[\phi_{\sqrt{2mE}}(x)\,\phi^*_{\sqrt{2mE}}(x') + \phi_{-\sqrt{2mE}}(x)\,\phi^*_{-\sqrt{2mE}}(x')\right]$$

* gucken wir nun den klassischen Pfad

$$K_{cl}(x,x',z) = \int_0^{\infty} dt\, K_{cl}(x,t;x',0)\, e^{\frac{i}{\hbar}[E+i\epsilon]t}$$

E = klassisch

* Da es keine klassische Umkehrpunkte gibt, dann gibt es nur 2 Alternativen:
    * Wenn $x' < x$ → das Teilchen bewegt sich rechtswärts ($x' \to x$)
    * Wenn $x' > x$ → das Teilchen bewegt sich linkswärts ($x \leftarrow x'$)

Daher:

$$K_{cl}(x,x',E) = \overset{\text{Konstante}}{A'} \sum_{R,L} e^{\frac{i}{\hbar}[S_{cl}(x,t^*;x',0)]} e^{\frac{i}{\hbar}Et^*}$$

wobei $t^* = t^*(E)$ → Die Zeit von x' bis nach x zu gehen (wenn das Teilchen eine Energie E hat)

* Die klassische Wirkung ist

$$S_{cl}(x,t^*;x',0) = \int_0^{t^*}(T-V)\,dt = \int_0^{t^*}(2T-E)\,dt \overset{E \,\equiv\, \text{Konstant}}{=}$$

$$= -Et^* + \int_0^{t^*} 2T\,dt = -Et^* + \int_0^{t^*} dt\, p(x(t))\frac{dx}{dt} = -Et^* + \int_{x'}^{x} p(x'')\,dx''$$

Dann

$$K_{cl}(x,x',E) = A' \sum_{R,L} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{x'}^{x} p(x'')\,dx''\right]$$

$$= \Theta(x-x')\,A' \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{x'}^{x}\sqrt{2m(E-V(x''))}\,dx''\right\}$$

$$+ \Theta(x'-x)\,A' \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{x'}^{x}\sqrt{2m(E-V(x''))}\,dx''\right\}$$

Dann

$$K_{cl}(x,x',E) + K_{cl}^*(x',x,E) = A' \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{x'}^{x}\sqrt{2m(E-V(x''))}\,dx''\right\}$$

$$+ A' \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{x'}^{x}\sqrt{2m(E-V(x''))}\,dx''\right\}$$

Dann (aus S. 140):

$$\phi_{\pm\sqrt{2mE}}(x)\,\phi^*_{\pm\sqrt{2mE}}(x') \simeq \exp\left\{\pm\frac{i}{\hbar}\int_{x'}^{x}\sqrt{2m(E-V(x''))}\,dx''\right\}$$

und daher:

$$\boxed{\phi_\pm(x) = \phi(x_0)\exp\left\{\pm\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}dx''\sqrt{2m(E-V(x''))}\right\}}$$

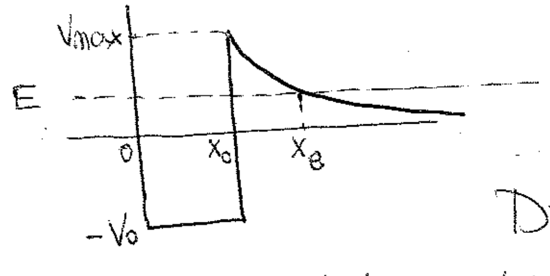
Wir haben damit die niedrigste Ordnung der WKB bekommen.

(Bemerkung: der $1/\sqrt{p(x)}$ kann auch hergeleitet werden, aber die Rechnung ist deutlich schwieriger.)

* Die semiklassische Näherung ist also mit den Pfadintegralen direkt verknüpft.

* Die WKB-Näherung ist sehr nützlich für viele Probleme. Hier werden wir nur einen interessanten Beispiel untersuchen, und zwar die Anwendung der WKB-Formel für die Berechnung von Tunnelamplituden.

Nehmen wir ein Teilchen in einem Kastenpotential der Form:



Das Teilchen ist im Bereich $(0,x_0)$. Wie ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen den inneren Bereich $(0,x_0)$ verlässt? Die Energie des Teilchens $E < V_{max}$, also wenn das Teilchen $(0,x_0)$ verlässt, das muss via Tunneling passieren. Aus der WKB-Formel (in niedrigster Ordnung):

$$\psi(x_e) = \psi(x_0)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x_e} i\sqrt{2m(V(x)-E)}\,dx\right\} = \psi(x_0)\,e^{-\gamma/2}$$

* Nun, machen wir die folgende semiklassische Rechnung. Innerhalb von $[0, x_0)$ hat das Teilchen eine kinetische Energie $T = E - V = E + V_0 = \frac{1}{2} m v^2 \rightarrow v = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{m}$. Das Teilchen stößt also mit der Wand $x = x_0$ mit Frequenz $f = \frac{v}{2x_0}$.

In jedem Stoß, ist die Wahrscheinlichkeit dass die Teilchen tunnelt $\rightarrow e^{-\gamma}$.

* Dann die Wahrscheinlichkeit von Tunnel pro Einheit Zeit ist:

$$R = \frac{[2m(E+V_0)]^{1/2}}{2m x_0} e^{-\gamma}$$

Also der Lebensdauer des Teilchens ist $1/R = \tau$

* So ein Modell beschreibt ziemlich gut den radiativen Zerfall (von α-Teilchen) von radiative Elementen. $[{}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}Y + \alpha + \text{Energie}]$

In den Fall $V(r) = (Z-2) 2 e^2/r$ ist das Coulomb-Potential zwischen Tochterkern (mit Ladung $Z-2$) und α-Teilchen (mit Ladung $+2$). Der Abstand x_0 ist der Kernradius (typischerweise ~ 10 fm, $1 \text{fm} = 10^{-15}$ m)

(Bemerkung: die Höhe der Barriere $V_{max} = \frac{(Z-2) 2e^2}{x_0}$ ist z.B. für ${}^{238}U$ ~ 25 MeV, und die Energie des α-Teilchen ~ 5 MeV.

Also $E \ll V_0$ wie wir angenommen haben.)

* Man kann das WKB-Integral exakt machen:

$$\gamma = 2 \sqrt{\frac{2m V_{max} x_0}{\hbar^2}} \sqrt{x_e} \left\{ \frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{x_0}{x_e}} - \sqrt{\frac{x_0}{x_e}} \sqrt{1 - \frac{x_0}{x_e}} \right\}$$

wobei $V(x_e) = E$

* Für $E \ll V_{max} \longrightarrow x_e \gg x_0$ und

$$\gamma \simeq \pi \sqrt{\frac{2m V_{max} x_0 x_e}{\hbar^2}}$$

und daher

$$\boxed{\tau \cong \frac{2m x_0}{\sqrt{2m(E+V_0)}} \exp\left\{-\pi \sqrt{\frac{2m V_{max} x_0 x_e}{\hbar^2}}\right\}}$$

* Bemerkung: Die Lebensdauern kann sehr unterschiedlich sein

$^{223}Th \longrightarrow 1{,}3 \times 10^{10}$ Jahre

$^{212}Po \longrightarrow 3{,}0 \times 10^{-7}$ sek (!!)