## 3.2 Einfache Systeme

Seite 43: $$K(y,t_b;x,t_a) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \int \prod_{i=2}^{N} dx_i \, \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} \varepsilon \left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2 - U(x_j)\right]\right\}_{\substack{x_1:=x \\ x_{N+1}:=y}}$$

Der Einfachheit halber setzen wir im Folgenden $t_a \to 0$, $t_b \to t$; $\varepsilon N = t$.

### Häufig gebraucht: Gauss'sches Integral

* MMP III : $$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-\frac{ax^2}{2} \pm ibx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \, e^{-\frac{b^2}{2a}} .$$

* Verallgemeinerung zu mehreren Variablen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \prod_i dx_i \; \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[x^T A x + b^T x + x^T b\right]\right\}$$

unbedingt: $A^T = A$
nehme an: $\exists \, A^{-1}$
es folgt: $(A^{-1})^T = A^{-1}$

$x = x' - A^{-1}b$
$x^T = x'^T - b^T A^{-1}$

$$\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i dx'_i \; \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[x'^T A x' - \cancel{b^T x'} - \cancel{x'^T b} + b^T A^{-1} b + \cancel{b^T x'} - b^T A^{-1} b + \cancel{x'^T b} - b^T A^{-1} b\right]\right\}$$

diagonalisiere A

$$\stackrel{!}{=} \exp\left\{\frac{b^T A^{-1} b}{2}\right\} \prod_i \int_{-\infty}^{\infty} dx''_i \; \exp\left\{-\frac{1}{2}\lambda_i (x''_i)^2\right\}$$

$$= \exp\left\{\frac{b^T A^{-1} b}{2}\right\} \prod_i \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_i}} = \frac{(2\pi)^{\frac{\dim A}{2}}}{\sqrt{\det A}} \, e^{\frac{b^T A^{-1} b}{2}} .$$

### Freies Teilchen $(U(x_j) := 0)$

(i) Klassisches Ergebnis:

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

$$\Rightarrow e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} = e^{\frac{im(y-x)^2}{2\hbar t}} .$$

(ii) Exaktes Ergebnis (ohne Pfadintegral):

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

$\mathbb{1} = \int \frac{dk}{2\pi} |k\rangle\langle k|$

$p = \hbar k$

$$\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \, e^{\frac{-i\hbar k^2 t}{2m}} \underbrace{\langle y|k\rangle\langle k|x\rangle}_{e^{ik(y-x)}}$$

Gauss'sches Integral mit $a = \frac{i\hbar t}{m}$

$$\stackrel{!}{=} \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{2\pi m}{i\hbar t}} \, e^{-\frac{m(y-x)^2}{2i\hbar t}}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \, \underbrace{e^{\frac{im(y-x)^2}{2\hbar t}}}_{e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} \;!} .$$

(iii) Pfadintegral:

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

Man könnte die Abhängigkeit von $x_2,\dots,x_N$ in der Form $x^TAx+b^Tx+x^Tb$ ausdrücken und das Gaussche Integral benutzen, $A$ ist aber nichtdiagonal, so dass die Bestimmung von $A^{-1}$ und $\det A$ mühsam ist.

Trick: $$e^{-\frac{m}{2i\varepsilon\hbar}(y-x_N)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N+1}\,\delta(y-x_{N+1})\,e^{-\frac{m}{2i\varepsilon\hbar}(x_{N+1}-x_N)^2}.$$

Hier ist $\delta(y-x_{N+1})$

$$= \delta\left(y-x-[x_{N+1}-x_N]-[x_N-x_{N-1}]-\dots-[x_3-x_2]-[x_2-x]\right)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\,e^{i\omega(\;\text{—"—}\;)}.$$

Jetzt gibt es nur abgekoppelte Integrale (nach $x_{j+1}\to x_j+x'_{j+1}$):

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_{j+1}\,e^{-\frac{m}{2i\varepsilon\hbar}(x_{j+1}-x_j)^2-i\omega(x_{j+1}-x_j)} = \sqrt{\frac{2\pi}{\left(\frac{m}{i\varepsilon\hbar}\right)}}\;e^{-\frac{\omega^2}{2\left(\frac{m}{i\varepsilon\hbar}\right)}}$$

$a=\frac{m}{i\varepsilon\hbar}$

$$= \sqrt{\frac{2\pi\hbar i\varepsilon}{m}}\;e^{-\frac{i\varepsilon\hbar\omega^2}{2m}}.$$

Dies gilt $\forall j\in\{1,\dots,N\}$, d.h. $N$-mal.

$$\Rightarrow K = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\left(\frac{2\pi\hbar i\varepsilon}{m}\right)^{\frac{N}{2}}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\,e^{-\frac{i\varepsilon N\hbar\omega^2}{2m}+i\omega(y-x)}}$$

$$a=\frac{i\varepsilon N\hbar}{m}=\frac{it\hbar}{m}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2\pi}\cdot\sqrt{\frac{2\pi m}{it\hbar}}\;e^{-\frac{(y-x)^2}{2\frac{it\hbar}{m}}}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\;e^{\frac{im(y-x)^2}{2\hbar t}}\qquad \text{Ok!}$$

Bemerkung: Hier ist das Ergebnis exakt richtig auch ohne den Limes $N\to\infty$ bzw. $\varepsilon\to 0$; wenn $U(x_j)\neq 0$ ist dies nicht mehr der Fall.

— o —

# Harmonischer Oszillator $\left(U(x_j) := \frac{1}{2} m\omega^2 x_j^2\right)$

Diesmal wird nicht das „exakte" diskretisierte Pfadintegral sondern die „symbolische" Kontinuumversion (Seite 43) als Ausgangspunkt gewählt:

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

Dabei muss die „Normierung" des Integrationsmasses später fixiert werden.

(i) Klassisches Ergebnis:

$$\ddot{x}_{cl} = -\omega^2 x_{cl} \quad \Rightarrow \quad x_{cl} = A\cos\omega t' + B\sin\omega t'$$

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

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

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

$$= \frac{m\omega}{2}\left\{\underbrace{\left(-x\sin\omega t + \frac{y - x\cos\omega t}{\sin\omega t}\cos\omega t\right)}_{\frac{\dot{x}_{cl}(t)}{\omega}}\underbrace{\left(x\cos\omega t + \frac{y - x\cos\omega t}{\sin\omega t}\sin\omega t\right)}_{x_{cl}(t) = y} - \underbrace{\frac{y - x\cos\omega t}{\sin\omega t}}_{\frac{\dot{x}_{cl}(0)}{\omega}}\underbrace{x}_{x_{cl}(0)}\right\}$$

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

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

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

(ii) Pfadintegral:

Schreibe (vgl. Seite 44) $x(t') = x_{cl}(t') + \delta x(t')$ ; $\begin{cases} x_{cl}(0) = x \\ x_{cl}(t) = y \end{cases}$ ; $\begin{cases} \delta x(0) = 0 \\ \delta x(t) = 0 \end{cases}$ .

Die Wirkung kann damit umgeschrieben werden:

$$S = \frac{m}{2}\int_0^t dt' \left[\dot{x}\dot{x} - \omega^2 xx\right]$$

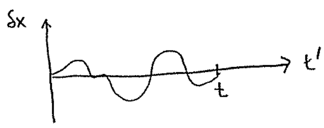
$$= S_{cl} + m\int_0^t dt' \left[\dot{x}_{cl}\,\delta\dot{x} - \omega^2 x_{cl}\,\delta x\right] + \frac{m}{2}\int_0^t dt' \left[\delta\dot{x}\,\delta\dot{x} - \omega^2\delta x\,\delta x\right]$$

partielle Integration im 2. und 3. Term, mit $\delta x(0) = \delta x(t) = 0$

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

(Bewegungsgleichung) (keine klassische Bahn)

Wir können $\delta x$ durch eine Fourier-Reihe parametrisieren:




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

Integrationsmass: $\mathcal{D}x(t) = J \prod_{n=1}^{\infty} da_n$ .

Unbekannte Jacobi-Determinante

Der dritte Term der Wirkung:

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

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

nur $n'=n$ ergibt einen Beitrag

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

$$a = \frac{mt}{2i\hbar}\left(\left(\frac{n\pi}{t}\right)^2-\omega^2\right)$$

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

Wie kann die Konstante J bestimmt werden? Zur Erinnerung (Seite 43): sie ist rein „kinematisch", d.h. unabhängig vom V. Deshalb können wir den bekannten Vorfaktor eines freien Teilchens benutzen! Dies entspricht dem Limes $\omega \to 0$ (vgl. Seite 45).

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

$$= \underbrace{J\prod_{n=1}^{\infty}\left\{\sqrt{\frac{4\pi i\hbar}{mt}}\left(\left(\frac{n\pi}{t}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}}\right\}}_{\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}} \times \underbrace{\prod_{n=1}^{\infty}\left\{\left[1-\left(\frac{\omega t}{n\pi}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}}\right\}}_{\to 1 \text{ für } \omega\to 0}$$

Es gilt [z.B. Arfken-Weber-Harris, (11.89)]: $\prod_{n=1}^{\infty}\left[1-\left(\frac{\omega t}{n\pi}\right)^2\right] = \frac{\sin(\omega t)}{\omega t}$.

Insgesamt erhalten wir also ..

$$K(y,t;x,0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega t)}}\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin(\omega t)}\left[(x^2+y^2)\cos\omega t - 2xy\right]\right\}.$$

---

„Mehler-Formel"
1835-1895

In dieser Formel ist z.B. das ganze Energiespektrum des harmonischen Oszillators enthalten (vgl. Aufgabe 12.2).