Übung 1. Saddle point approximation

Wir betrachten die beide Fälle separat:

- Wir nähern $f(x)$ durch die Konstante $f(x_0)$, da wir angenommen haben, dass die Funktion in der Nähe von x_0 sehr flach ist und finden

$$\int dx\, f(x)e^{-g(x)} \approx f(x_0) \int dx\, e^{-g(x)} = V \cdot f(x_0)\ . \tag{L.1}$$

  Hier ist V ein Volumenfaktor, der dem Volumen des Peaks entspricht. Beachte, dass in dieser Integration die "Gewichts-Funktion" $e^{-g(x)}$ wie eine Delta-Funktion behandelt wird, nämlich $e^{-g(x)} \sim V \cdot \delta(x - x_0)$.

- Wenn $f(x)$ eine Steigung und/oder Krümmung hat, hat das Produkt $f(x)e^{-g(x)}$ sein Maximum nicht umbedingt bei x_0, sondern ist im Allgemeinen verschoben. Deswegen kann $f(x)$ nicht mehr aus dem Integral gezogen werden.

  Wir benutzen die Saddle point approximation: diese ist eine Methode, um Integrale der Form $\int e^{-h(x)}$ zu berechnen. Wenn $e^{-h(x)}$ genug gepeaked ist, ist der Hauptbeitrag bei $h(\tilde{x}_0)$, mit $\tilde{x}_0$ der Position des Minimums von $h(x)$. Wenn $h(x)$ eine Breite hat, können wir $h(x)$ bis auf 2. Ordnung entwickeln: $h(x) \approx h(\tilde{x_0}) + \frac{1}{2}h''(\tilde{x}_0)(x - \tilde{x}_0)^2$ (Die 1. Ordnung verschwindet wegen Minimum). Der erste Term ist eine Konstante; der zweite liefert ein Gausssches Integral.

  Für diesen Teil der Übung ist der Trick, die Funktion f in den Exponent zu bringen:

$$\int dx\, f(x)e^{-g(x)} = \int dx\, e^{-g(x)+\ln f(x)} = \int dx\, e^{-h(x)}\ . \tag{L.2}$$

  Sei jetzt $\tilde{x}_0$ das neue Minimum von $h(x)$. (Der hängt im allgemein von der Form von f und g, also ist es nicht einfach einen genauen allgemeine Ausdruck zu geben.) Wir entwickeln $h(x)$ also um $\tilde{x}_0$ bis auf 2. Ordnung (mit $h'(\tilde{x}_0) = 0$ wegen Minimum):

$$\int dx\, e^{-h(x)} = \int dx\, e^{-h(\tilde{x}_0)-\frac{1}{2}h''(\tilde{x}_0)(x-\tilde{x}_0)^2} = e^{-h(\tilde{x}_0)}\sqrt{\frac{2\pi}{h''(\tilde{x}_0)}}\ , \tag{L.3}$$

  wobei wir in den letzten Schritt ein Gaußsches Integrals ausgewertet haben und berücksichtigt haben, dass $h''(\tilde{x}_0) > 0$. Mit $h(x) = g(x) - \ln f(x)$ bestimmen wir jetzt $h'(x) = g'(x) - (1/f(x))f'(x)$ und $h''(x) = g''(x) + \frac{(f'(x))^2}{(f(x))^2} - \frac{f''(x)}{f(x)}$. Dies liefert dann

$$(\text{L.3}) = f(x_0)\, e^{-g(\tilde{x}_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{g''(\tilde{x}_0) + \frac{(f'(\tilde{x}_0))^2}{(f(\tilde{x}_0))^2} - \frac{f''(\tilde{x}_0)}{f(\tilde{x}_0)}}}\ . \tag{L.4}$$

  Falls $f(x) \approx f(x_0)$, wie in obigem Fall, folgt direkt $\tilde{x}_0 \approx x_0$ und $h''(\tilde{x}_0) \approx g''(x_0)$.

Übung 2. Gaußsches Wellenpaket

(a) Die Differentialgleichung $\partial_t A(x,t) = \alpha \, \partial_x^2 A(x,t)$ erlaubt eine separable Lösung, d.h. wir wählen $A(x,t) = \chi(x)\phi(t)$. Dies ergibt

$$\chi(x) \, \partial_t \, \phi(t) = \alpha \, \phi(t) \, \partial_x^2 \, \chi(x).$$

Wir bringen jetzt alle t-Abhängigkeit auf eine Seite dieser Gleichung, und x auf die andere:

$$\frac{\partial_t \, \phi(t)}{\phi(t)} = \alpha \frac{\partial_x^2 \, \chi(x)}{\chi(x)}.$$

Da sich x und t unabhängig von einander variieren lassen, müssen beide Seiten dieser Gleichung denselben konstanten Wert annehmen. Wir wählen $-\lambda$ für diese Konstante, mit $\lambda > 0$ (mit $\lambda \leq 0$ findet man keine gültige Lösung). Das ergibt für $\phi(t)$:

$$\partial_t \, \phi(t) = -\lambda \phi(t) \quad \rightarrow \quad \phi(t) \sim e^{-\lambda t},$$

und für $\chi(x)$:

$$\partial_x^2 \, \chi(x) = -\frac{\lambda}{\alpha} \chi(x) \quad \rightarrow \quad \chi(x) \sim e^{i\sqrt{\frac{\lambda}{\alpha}}x}.$$

Eine Lösung ist also gegeben durch

$$A(x,t) = e^{i(\sqrt{\frac{\lambda}{\alpha}}x + i\lambda t)}.$$

Wenn wir das mit einer ebenen Welle vergleichen,

$$E(x,t) = e^{i(kx - \omega(k)t)},$$

sehen wir, dass die Dispersion gegeben ist durch $\omega = -i\alpha k^2$.

(b) Zuerst berechnen wir

$$A(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \, e^{-\frac{1}{4}a^2k^2 + i(kx + i\alpha k^2 t)} \tag{L.5}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \, e^{-(\frac{1}{4}a^2 + \alpha t)k^2 + ikx} \tag{L.6}$$

$$= \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{2}a^2 + 2\alpha t}} \, e^{\frac{-x^2}{2(\frac{1}{2}a^2 + 2\alpha t)}} \tag{L.7}$$

$$= \frac{1}{w} e^{\frac{-x^2}{2w^2}}, \tag{L.8}$$

wobei $w = \sqrt{\frac{1}{2}a^2 + 2\alpha t}$. Die Breite des Pakets lässt sich jetzt einfach bestimmen. Die Breite einer Gaußschen Verteilung $e^{-x^2/2\sigma^2}$ ist gegeben durch σ, fur σ reell. Für die Diffusionsgleichung mit $\alpha = D$ finden wir direkt $\Delta x = w \sim \sqrt{t}$. Für die freie Schrödingergleichung brauchen wir einen zusätzlichen Schritt, da $\alpha = \frac{i\hbar}{2m}$ (und damit w) komplex ist:

$$A(x,t) = \Psi(x,t) \rightarrow |\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{|w|^2} e^{\frac{-a^2x^2}{2|w^2|^2}} \tag{L.9}$$

wobei $|w|^2 = \sqrt{\frac{1}{4}a^4 + \frac{\hbar^2t^2}{m}}$ und $|w^2|^2 = \frac{1}{4}a^2 + \frac{\hbar^2t^2}{m}$. Das quantenmechanische Gaußsche Wellenpaket breitet sich also aus wie $\Delta x \sim t$.

Übung 3*. Harmonisches Oszillator in 1D mit Pfadintegralen

(a) Die Wirkung ist

$$S[x] = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{1}{2} m\, \dot{x}(t)^2 - \frac{1}{2}\, m\omega^2 x(t)^2 \right) dt = \frac{1}{2}\, m \int_{t_a}^{t_b} \left(\dot{x}(t)^2 - \omega^2 x(t)^2 \right) dt \tag{L.10}$$

Eine Entwicklung um den klassischen Pfad mit $x(t) = \bar{x}(t) + y(t)$ ergibt

$$S[\bar{x} + y] = \frac{1}{2}\, m \int_{t_a}^{t_b} \left(\left(\dot{\bar{x}} + \dot{y}\right)^2 - \omega^2 \left(\bar{x} + y\right)^2 \right) dt = S[\bar{x}] + \frac{1}{2}\, m \int_{t_a}^{t_b} \left(\dot{y}^2 - \omega y^2 \right) dt\ . \tag{L.11}$$

(Die Terme linear in y und $\dot{y}$ verschwinden wegen der Bedingung $\delta S = 0$ für den klassischen Pfad $\bar{x}(t)$.) Wir führen jetzt eine partielle Integration durch. Weil der Pfad y die Bedingungen $y(t_a) = y(t_b) = 0$ erfüllen muss, verschwinden die Randterme und wir finden

$$(\text{L.11}) = S[\bar{x}] + \frac{1}{2}\, m \int y \left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2 \right) y\, dt\ . \tag{L.12}$$

Der Propagator nimmt dann die Form

$$K(b,a) = \int \mathcal{D}[y] \exp\left(\frac{i}{\hbar}\, S[\bar{x} + y] \right) = e^{\frac{i}{\hbar} S[\bar{x}]} \int \mathcal{D}[y] \exp\left[\frac{i}{\hbar}\, \frac{1}{2}\, m \int y \left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2 \right) y\, dt \right]\ ,$$

an, was (7) und (8) entspricht.

(b) Der Propagator für ein freies Teilchen ist, gemäss Gl. (1.18) im Skript,

$$K(b,a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\, (t_b - t_a)}}\, \exp\left[\frac{im\, (x_b - x_a)^2}{2\hbar\, (t_b - t_a)} \right]\ . \tag{L.13}$$

Die Wirkung des klassischen Weges ist

$$S[\bar{x}] = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}\, m\, \dot{\bar{x}}^2\, dt = \frac{1}{2}\, m\, \frac{(\bar{x}_b - \bar{x}_a)^2}{t_b - t_a}\ , \tag{L.14}$$

da der klassische Weg eine uniforme Bewegung ist. Es folgt

$$K(b,a) = e^{\frac{i}{\hbar} S[\bar{x}]}\, F(t_b, t_a)\ , \tag{L.15}$$

mit

$$F(t_b, t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\, (t_b - t_a)}}\ . \tag{L.16}$$

(c) Als Referenz für diese Rechnung und für Pfadintegrale würden wir das Buch von Feynman und Hibbs[1] und/oder das Skript von Matthias Blau empfehlen.[2] Diese Rechnung orientiert sich stark am Skript von Matthias Blau.

Wir berechnen die Determinante des Operators

$$\frac{m}{2\pi i\hbar} \left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2 \right) \tag{L.17}$$

[1] Feynman, R. & Hibbs, A, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, Dover Publications (2010)

[2] http://www.blau.itp.unibe.ch/lecturesPI.pdf (http://www.blau.itp.unibe.ch/Lecturenotes.html)

als Produkt dessen Eigenwerten:

$$\begin{aligned}\mathrm{Det}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\left(-\frac{d^2}{dt^2}-\omega^2\right)\right) &= \prod_{n=1}^{\infty}\frac{m}{2\pi i\hbar}\left(\frac{n^2\pi^2}{T^2}-\omega^2\right)\\ &= \prod_{n=1}^{\infty}\frac{m}{2\pi i\hbar}\frac{n^2\pi^2}{T^2}\prod_{n=1}^{\infty}\left(1-\frac{\omega^2T^2}{n^2\pi^2}\right) = C\cdot\frac{\sin\omega T}{\omega T}\ , \qquad \text{(L.18)}\end{aligned}$$

mit $T = t_b - t_a$ und mithilfe der Formel $\prod_{n=1}^{\infty}\left(1-\frac{x^2}{n^2\pi^2}\right) = \frac{\sin x}{x}$. Wir haben die Terme, die nicht von ω abhängen im Faktor C zusammengefasst.

Bemerkung: wir nehmen den Operator (L.17) hier als nur im Zeitintervall $[t_a, t_b]$ wirkend. Diese Forderung kommt von den Grenzen des inneren Integrals in (8). Aus diesem Grund treten Terme in der Form $t_b - t_a$ in den Eigenfunktionen und Eigenwerten auf.

Es folgt, dank der Formel für das Fresnelsche Integral,

$$F(t_b, t_a) \propto \left[\mathrm{Det}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\left(-\frac{d^2}{dt^2}-\omega^2\right)\right)\right]^{-1/2} \propto \left(\frac{\sin\omega T}{\omega T}\right)^{-1/2}\ . \qquad \text{(L.19)}$$

Die (universelle) Normierungskonstante können wir aus dem Spezialfall des freien Teilchens (siehe Teil (b)) bestimmen. Für das freie Teilchen gilt $\omega = 0$ und $(\sin\omega T)/(\omega T) = 1$. Gemäss (L.16) ist dann die Proportionalitätskonstante in (L.19)

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b - t_a)}}$$

und so folgt allgemein

$$F(t_b, t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b - t_a)}}\sqrt{\frac{\omega(t_b - t_a)}{\sin(\omega(t_b - t_a))}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega(t_b - t_a))}}\ . \qquad \text{(L.20)}$$

Möchte man das Fresnelsche Integral (9) im allgemeinen Fall nicht so annehmen, dann kann das Pfadintegral berechnet werden, indem das Integral im Exponent von (8) so umformen, dass $y(t)$ explizit in der Basis der Eigenfunktionen vom Operator (L.17) ausgedruckt wird (siehe Skript von Matthias Blau). Eine andere Technik ist, die Integral im Fourierraum zu berechnen (siehe Buch von Feynmann und Hibbs, Kap. 3–11).

Die Wirkung des klassisches Pfades ist (siehe Serie 2, Übung 1, aber mit einer allgemeinen Anfangsbedingung):

$$S[\bar{q}] = \frac{m\omega}{2\sin(\omega(t_b - t_a))}\left[\left(x_a^2 + x_b^2\right)\cos(\omega(t_b - t_a)) - 2x_bx_a\right]\ . \qquad \text{(L.21)}$$

Zusammen mit (7) und (L.20) führt dies schlussendlich auf den Propagator

$$\begin{aligned}K(b, a) = &\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega(t_b - t_a))}}\\ &\times\exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin(\omega(t_b - t_a))}\left[\left(x_a^2 + x_b^2\right)\cos(\omega(t_b - t_a)) - 2x_bx_a\right]\right]\ . \qquad \text{(L.22)}\end{aligned}$$

Bemerkung: wie ihr wahrscheinlich schon gemerkt habt, haben wir viele Formalitäten versteckt. Insbesondere sind einige der obigen Grössen unendlich oder nicht wohl definiert *(z.B. das Produkt, der C in (L.18) bestimmt, divergiert stark). Dies liegt daran, das wir die Normierung des Integralmasses vergessen haben. Eigentlich ist die Formel für das Fresnelsche Integral ohne die $1/A$ Terme, die im Skript eingeführt waren: deshalb divergiert das Pfadintegral. Wenn wir diese Normierungsterme wieder einführen, dann ist das Integral wieder endlich. (Siehe z.B. das Skript von Matthias Blau.)*

Eigentlich soll man diese Grössen nicht als individuelle mathematische Objekte betrachten (obwohl wir sie so notieren): sobald sie im finalen Pfadintegral zusammengestellt werden ist der Grenzwert des gesamten Ausdrucks wieder eine endliche Zahl.

In der Physik separiert man gerne solche Grössen, die eine klare physikalisch konzeptuelle Interpretation besitzen; der Nachteil eines mathematisch formalen Schreiben ist, dass die Notation sich stark erschwert. Dies wird noch relevanter in QM2 und Quantenfeldtheorie.

Alternative Lösung: Wir zeigen hier eine alternative Lösung, in welcher die Divergenzen rigoroser gehandhabt werden. Wir starten von Gl. (L.11), sodass sich der Propagator schreiben lässt als

$$K(b,a) = e^{\frac{i}{\hbar}S[\bar{x}]} \int_{\substack{y(t_a)=0 \\ y(t_b)=0}} \mathcal{D}[y] \exp\left[\frac{im}{2\hbar} \int (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2)\, dt\right]. \tag{L.23}$$

Wir berechnen nun das Pfadintegral, welches sich analog zum freien Fall in der Vorlesung schreiben lässt als

$$\begin{aligned} F(t_b,t_a) &= \int_{\substack{y(t_a)=0 \\ y(t_b)=0}} \mathcal{D}[y] \exp\left[\frac{im}{2\hbar} \int (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2)\, dt\right] \\ &= \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{A} \prod_{j=1}^{N-1} \int \frac{dy_j}{A} \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\epsilon \sum_{k=0}^{N-1} (\dot{y_k}^2 - \omega^2 y_k^2)\right]. \end{aligned} \tag{L.24}$$

Nun nutzen wir $\dot{y}_k = (y_{k+1} - y_k)/\epsilon$ und erhalten

$$F(t_b,t_a) = \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{A^N} \prod_{j=1}^{N-1} \int dy_j \exp\left[\frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{k=0}^{N-1} [(y_{k+1} - y_k)^2 - \epsilon^2\omega^2 y_k^2]\right]. \tag{L.25}$$

Wir machen eine Variablentransformation zu $z_j = \sqrt{m/2\hbar\epsilon}\, y_j$ und erhalten mithilfe der Bedingungen $y_0 = y(t_a) = 0$ und $y_N = y(t_b) = 0$

$$\begin{aligned} F(t_b,t_a) &= \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{A^N} \left(\frac{2\hbar\epsilon}{m}\right)^{(N-1)/2} \prod_{j=1}^{N-1} \int dy_j \exp\left[i\Big(\sum_{k=1}^{N-1} (2 - \epsilon^2\omega^2) z_k^2 - \sum_{k=1}^{N-2} 2 z_k z_{k+1}\Big)]\right] \\ &= \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{A^N} \left(\frac{2\hbar\epsilon}{m}\right)^{(N-1)/2} \prod_{j=1}^{N-1} \int dy_j \exp\left[i \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{N-1} z_l M_{lk} z_k\right] \end{aligned} \tag{L.26}$$

mit der Matrix

$$M = \begin{pmatrix} 2-\epsilon^2\omega^2 & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & 2-\epsilon^2\omega^2 & -1 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & 2-\epsilon^2\omega^2 & -1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{L.27}$$

Da M reell und symmetrisch, lässt sie sich durch eine orthogonale Transformation $\mathcal{O}$ diagonalisieren. Sei $D = \mathcal{O} M \mathcal{O}^T$ (mit D diagonal) und $w_j = \sum_n \mathcal{O}_{jn} z_n$ die zugehörige

Orthonormalbasis, dann erhält man durch Koordinatentransformation

$$F(t_b,t_a)=\lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{A^N}\Big(\frac{2\hbar\epsilon}{m}\Big)^{(N-1)/2}\prod_{j=1}^{N-1}\int dw_j\exp\left[i\sum_{k=1}^{N-1}D_{kk}w_k^2\right]. \tag{L.28}$$

In dieser Basis sind die Integrale unabhängig und wir erhalten

$$F(t_b,t_a)=\lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{A^N}\Big(\frac{2\hbar\epsilon}{m}\Big)^{(N-1)/2}\prod_{j=1}^{N-1}\sqrt{\frac{i\pi}{D_{jj}}}=\lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{A^N}\Big(\frac{2i\pi\hbar\epsilon}{m}\Big)^{(N-1)/2}\sqrt{\frac{1}{\det M}}, \tag{L.29}$$

wobei wir $\prod_j D_{jj}=\det D=\det M$ benutzt haben. Mit $A=\sqrt{2\pi i\hbar\epsilon/m}$ folgt

$$F(t_b,t_a)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\cdot\lim_{\epsilon\to 0}\sqrt{\frac{1}{\epsilon\det M}}. \tag{L.30}$$

Es bleibt nun noch die Determinante der Matrix M zu berechnen. Hierfür definieren wir $\mu=2-\epsilon^2\mu^2$ und sehen, dass die Determinante der Matrix M_d der Dimension $d\times d$ folgende Rekursionsrelation erfüllt (indem wir die Matrix nach der ersten Spalte entwickeln)

$$\det M_d=\mu\det M_{d-1}-\det M_{d-2}, \tag{L.31}$$

welche von der Form $x_d=\mu x_{d-1}-x_{d-2}$ ist. Mit dem Ansatz $x_d=\lambda^d$ finden wir die beiden Lösungen

$$\lambda_\pm=\frac{1}{2}\big(\mu\pm i\sqrt{4-\mu^2}\big). \tag{L.32}$$

Somit ist die allgemeine Lösung von der Form $\det M_d=c_+\lambda_+^d+c_-\lambda_-^d$. Die beiden Koeffizienten können durch die Anfangsbedingungen $\det M_1=\mu$ und $\det M_0=1$ bestimmt werden und wir finden

$$\det M_d=\frac{-i}{\sqrt{4-\mu^2}}(\lambda_+^{d+1}-\lambda_-^{d+1}). \tag{L.33}$$

Wir interessieren uns nun am Grenzwert $\epsilon\to 0$ von $\det M_{N-1}$, wobei $N=T/\epsilon\to\infty$. Betrachten wir μ für kleine ϵ, erkennen wir, dass

$$\mu=2-\epsilon^2\omega^2=2\cdot(1-\frac{\epsilon^2\omega^2}{2})\approx 2\cos(\epsilon\omega), \tag{L.34}$$

dadurch finden wir $\lambda_\pm\approx e^{i\epsilon\omega}$ für $\epsilon\to 0$. Mit $N\epsilon=T=t_b-t_a$ folgt nun

$$\det M_{N-1}\approx\frac{-i}{2\sin(\epsilon\omega)}(e^{iN\epsilon\omega}-e^{-iN\epsilon\omega})=\frac{\sin(\omega T)}{\sin(\epsilon\omega)}\approx\frac{\sin(\omega T)}{\epsilon\omega}, \tag{L.35}$$

womit wir mit Gl. (L.30) direkt das Resultat

$$F(t_b,t_a)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\cdot\lim_{\epsilon\to 0}\sqrt{\frac{\epsilon\omega}{\epsilon\sin[\omega(t_b-t_a)]}}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin[\omega(t_b-t_a)]}} \tag{L.36}$$

erhalten. Wir finden dasselbe Resultat wie oben.