

Kapitel 2

Pfadintegrale

Aus Ihren bisherigen Vorlesungen kennen Sie die Formulierungen der Quantenmechanik von HEISENBERG, SCHRÖDINGER und Kollegen. Bereits 1933 spekulierte DIRAC, ob die klassische Wirkung in der Quantenmechanik eine ähnlich wichtige Rolle spielen könnte wie in der klassischen Mechanik [7]. Er glaubte, daß die Wahrscheinlichkeitsamplitude für die Propagation von q nach q' in der Zeit t ,

$$K(t, q', q) = \langle q' | e^{-iHt/\hbar} | q \rangle \quad (2.1)$$

gegeben ist durch

$$K(t, q', q) \propto e^{iS[q_{cl}]/\hbar}, \quad (2.2)$$

wobei q_{cl} die klassische Bahn von q nach q' in der Zeit t bezeichnet. Der Exponent ist dimensionslos, da \hbar die Dimension einer Wirkung hat. Für ein freies Teilchen mit Hamilton- und Lagrangefunktion

$$H_0 = \frac{1}{2m}p^2 \quad \text{und} \quad L_0 = \frac{m}{2}\dot{q}^2 \quad (2.3)$$

kann man die obige Formel leicht nachprüfen: Freie Teilchen bewegen sich längs Geraden und der zur Zeit 0 bei q beginnende und zur Zeit t bei q' endende Weg ist

$$q_{cl}(s) = \frac{1}{t} \{sq' + (t-s)q\} \implies S[q_{cl}] = \int_0^t ds L_0[q_{cl}(s)] = \frac{m}{2t}(q' - q)^2.$$

Dies führt auf die Amplitude

$$K_0(t, q', q) \propto e^{im(q'-q)^2/2\hbar t}.$$

Der Proportionalitätsfaktor ist bestimmt durch die Bedingung $e^{-iHt/\hbar} \xrightarrow{t \rightarrow 0} \mathbb{1}$, welche in der Ortsdarstellung die Form

$$\lim_{t \rightarrow 0} K(t, q', q) = \delta(q', q) \quad (2.4)$$

annimmt. Er ist auch bestimmt durch die Eigenschaft $e^{-iHt/\hbar} e^{-iHs/\hbar} = e^{-iH(t+s)/\hbar}$ mit der entsprechenden Form in der Ortsdarstellung,

$$\int du K(t, q', u) K(s, u, q) = K(t + s, q', q). \quad (2.5)$$

Auf diese Weise findet man den korrekten Propagator für ein freies Teilchen,

$$K_0(t, q', q) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} e^{iS[q_{cl}]/\hbar}. \quad (2.6)$$

Ähnliche Resultate erhält man für Systeme in denen $\langle \hat{q} \rangle$ die klassische Bewegungsgleichung erfüllt, d.h. Systeme für die gilt $\langle V'(\hat{q}) \rangle = V'(\langle \hat{q} \rangle)$. Für nichtlineare Systeme muß die Formel (2.6) modifiziert werden. 1948 gelang es FEYNMAN schließlich, das Diracsche Resultat auf allgemeinere Systeme zu erweitern [8]. Er fand eine alternative Formulierung der Quantenmechanik, aufbauend auf der Tatsache, daß der Propagator als Summe der Amplituden *aller Wege* (und nicht nur der klassischen) von q nach q' geschrieben werden kann. In der Quantenmechanik kann ein Teilchen auf beliebigen Wegen $q(s)$ vom Anfangs- zum Endpunkt gelangen,

$$q(0) = q \quad \text{und} \quad q(t) = q'. \quad (2.7)$$

Die Amplitude für einen einzelnen Weg ist $\sim \exp(iS[\text{Weg}]/\hbar)$ und die Amplitude für alle Wege ist nach den Regeln der Quantenmechanik die Summe der einzelnen Amplituden,

$$K(t, q', q) \sim \sum_{\text{alle Wege}} e^{iS[\text{Weg}]/\hbar}. \quad (2.8)$$

Bei der Untersuchung von stochastischen Prozessen beschäftigte sich WIENER schon früher mit der Summe über alle Wege [13]. Dabei wurde dem einzelnen Weg aber eine reelle und positive Wahrscheinlichkeit und nicht eine komplexe Amplituden zugeordnet. Das Wienersehe Wegintegral entspricht dem Feynman Wegintegral für „imaginäre Zeiten“ und findet seine Anwendungen in der statistischen Physik. Die Wegintegralmethode gestattet eine einheitliche Sichtweise auf Quantenmechanik, Quantenfeldtheorie und statistische Mechanik und ist ein unersetzliches Werkzeug in der modernen theoretischen Physik. Sie ist ein alternativer Zugang zur kanonischer Quantisierung klassischer Systeme.

Sie feierte erste große Erfolge in den 1950er Jahren und ist sehr schön und verständlich in Feynman's ursprünglichen Arbeit [8] und in seinem Buch mit HIBBS [14] dargestellt. Dieses Buch enthält auch viele Anwendungen und gilt heute immer noch als eine Standardreferenz. Funktionalintegrale wurden von herausragenden Mathematikern und Physikern, und insbesondere von KAC, weiterentwickelt [15]. Eine gute Referenz für diese Entwicklung ist der Übersichtsartikel von GELFAND und YAGLOM [16].

Ich kann in dieser Vorlesung nur eine Einführung in Wegintegrale geben. Für ein tieferes Verständnis müssen sie die Literatur konsultieren. Es gibt viele gute Bücher und Übersichtsartikel über Wegintegrale. Einige sind in der Literaturliste angegeben. Insbesondere die Zitate [17]-[21] enthalten einführendes Material.

Etwa alle zwei Jahre wird an unserer Fakultät eine Vorlesung über Pfadintegrale angeboten. Zur Vorlesung im Wintersemester 2001/2002 existiert ein Skript, welches Sie unter <http://www.tpi.uni-jena.de/~wipf/hpwipf.html>, über den Link `lecture notes in ps.gz` abrufen können. Das vorliegende Kapitel ist eine verkürzte und übersetzte Version von Teilen des Skriptes.

2.1 Wiederholung der Quantenmechanik

Bekanntlich gibt es zwei Zugänge zur Quantisierung eines klassischen Systems - *kanonische Quantisierung* und *Pfadintegral Quantisierung*. Ich gehe davon aus, daß sie mit der ersten, also Schrödingers Wellenmechanik und Heisenbergs Matrizenmechanik, vertraut sind. Trotzdem wiederhole ich nochmals die wesentlichen Schritte der kanonischen Quantisierung.

Ein klassisches System wird beschrieben durch seine Koordinaten $\{q^i\}$ und Impulse $\{p_i\}$ im *Phasenraum* Γ . Observablen sind Funktionen $O : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$. Die Energie $H(q, p)$ ist ein wichtiges Beispiel. Es existiert eine symplektische Struktur auf Γ , d.h. lokal existieren Koordinaten mit Poisson-Klammern

$$\{q^i, p_j\} = \delta_j^i, \quad (2.9)$$

und diese Struktur wird mit Hilfe der Derivationsregel $\{OP, Q\} = O\{P, Q\} + \{O, Q\}P$ und der Antisymmetrie auf Observablen ausgedehnt. Die Zeitentwicklung einer Observablen ist gegeben durch

$$\dot{O} = \{O, H\}, \quad \text{e.g.} \quad \dot{q}^i = \{q^i, H\} \quad \text{und} \quad \dot{p}_i = \{p_i, H\}. \quad (2.10)$$

Nun „quantisieren“ wir das System, indem wir Observablen durch hermiteschen Operato-

ren auf einem Hilbertraum und Poisson-Klammern durch Kommutatoren ersetzen:

$$O(q, p) \rightarrow \hat{O}(\hat{q}, \hat{p}) \quad \text{und} \quad \{O, P\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\hat{O}, \hat{P}]. \quad (2.11)$$

Die Zeitentwicklung einer nicht explizit zeitabhängigen Observablen ist im Heisenbergbild durch die *Heisenberggleichung*

$$\frac{d\hat{O}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{O}] \quad (2.12)$$

bestimmt. Speziell die Phasenraumkoordinaten (q^i, p_i) werden zu Operatoren mit einer Zeitentwicklung gemäß

$$\frac{d\hat{q}^i}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{q}^i] \quad \text{und} \quad \frac{d\hat{p}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{p}_i] \quad \text{mit} \quad [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_j^i.$$

Für nicht-relativistische Teilchen mit Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \text{mit} \quad \hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \sum \hat{p}_i^2 \quad (2.13)$$

findet man die bekannten Bewegungsgleichungen

$$\frac{d\hat{q}^i}{dt} = \frac{\hat{p}_i}{m} \quad \text{und} \quad \frac{d\hat{p}_i}{dt} = -\hat{V}_{,i}. \quad (2.14)$$

Die Observablen werden auf einem Hilbertraum \mathcal{H} , dessen Elemente die Systemzustände charakterisieren, dargestellt,

$$\hat{O}(\hat{q}, \hat{p}) : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}. \quad (2.15)$$

Für ein in einer Dimension gefangene Teilchen ist der Hilbertraum $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R})$ und in der Ortsdarstellung haben Ort- und Impulsoperator die Darstellung

$$(\hat{q}\psi)(q) = q\psi(q) \quad \text{und} \quad (\hat{p}\psi)(q) = \frac{\hbar}{i}\partial_q\psi(q). \quad (2.16)$$

In Experimenten werden Matrixelemente von Observablen gemessen, zum Beispiel der Erwartungswert des der Observablen zugeordneten Operators \hat{O} in einem gegebenen Zustand $|\psi\rangle$. Die Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes $\langle\psi|\hat{O}(t)|\psi\rangle$ folgt dann aus den Heisenberg-Gleichungen (2.12). Im Folgenden kennzeichnen wir Operatoren nur noch bei Bedarf mit einem Hut.

Wechselt man mit einer (zeitabhängigen) Ähnlichkeitstransformation vom Heisenberg-

ins *Schrödingerbild*,

$$O_s = e^{-itH/\hbar} O e^{itH/\hbar} \quad \text{und} \quad |\psi_s\rangle = e^{-itH/\hbar} |\psi\rangle, \quad (2.17)$$

dann werden Observablen zeitunabhängig,

$$\frac{d}{dt} O_s = e^{-itH/\hbar} \left(-\frac{i}{\hbar} [H, O] + \frac{d}{dt} O \right) e^{itH/\hbar} = 0.$$

Der Hamilton-Operator ändert allerdings nicht, $H_s = H$. Nach Konstruktion bleiben auch Erwartungswerte invariant,

$$\langle \psi | O(t) | \psi \rangle = \langle \psi_s(t) | O_s | \psi_s(t) \rangle. \quad (2.18)$$

Nach der Transformation $\{O(t), |\psi\rangle\} \longrightarrow \{O_s, |\psi_s(t)\rangle\}$ ins Schrödingerbild entwickeln sich die Zustände gemäß der *Schrödingergleichung*

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_s\rangle = H |\psi_s\rangle \iff |\psi_s(t)\rangle = e^{-itH/\hbar} |\psi_s(0)\rangle. \quad (2.19)$$

In der Ortsdarstellung hat diese formale Lösung die Form

$$\begin{aligned} \psi_s(t, q') \equiv \langle q' | \psi_s(t) \rangle &= \int \langle q' | e^{-itH/\hbar} | q \rangle \langle q | \psi_s(0) \rangle dq \\ &\equiv \int K(t, q', q) \psi_s(0, q) dq. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Dabei benutzen wir die Zerlegung der Eins,

$$\int dq |q\rangle \langle q| = \mathbb{1}, \quad (2.21)$$

und führten den Kern für die unitäre Zeitentwicklung ein,

$$K(t, q', q) = \langle q' | e^{-itH/\hbar} | q \rangle \quad (2.22)$$

Hier ist $K(t, q', q)$ die *Wahrscheinlichkeitsamplitude* für die Propagation von q zur Zeit 0 nach q' zur Zeit t . Man schreibt auch

$$K(t, q', q) \equiv \langle q', t | q, 0 \rangle. \quad (2.23)$$

Diese Amplitude erfüllt die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} K(t, q', q) = H K(t, q', q), \quad (2.24)$$

wobei H auf q' wirkt, und die Anfangsbedingung

$$\lim_{t \rightarrow 0} K(t, q', q) = \delta(q' - q). \quad (2.25)$$

Der Propagator K ist durch diese beiden Bedingungen eindeutig bestimmt. Zum Beispiel hat für das nicht-relativistische freie Teilchen in d Dimensionen mit Hamiltonoperator H_0 in (2.13) der Propagator die explizite Form

$$K_0(t, q', q) = \langle q' | e^{-itH_0/\hbar} | q \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{d/2} e^{im(q'-q)^2/2\hbar t}, \quad q, q' \in \mathbb{R}^d. \quad (2.26)$$

Speziell in einer Dimension ist

$$K_0(t, q', q) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} e^{im(q'-q)^2/2\hbar t}. \quad (2.27)$$

Nach diesen Vorbereitungen kommen wir nun zur Pfadintegraldarstellung des Propagators für ein Quantensystem mit Hamiltonoperator H .

2.2 Feynman-Kac Formel

In diesem Abschnitt leiten wir die Feynmansche Pfadintegraldarstellung für den unitären Zeitentwicklungsoperator $\exp(-iHt)$ und die Kac'sche Pfadintegraldarstellung für den positiven Operator $\exp(-H\tau)$ ab.

Wir werden die Produktformel von Trotter benötigen. Für Matrizen wurde sie bereits von LIE bewiesen, und in dieser Version lautet sie:

Satz von Lie *Für zwei Matrizen A und B gilt*

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{A/n} e^{B/n})^n.$$

Wir beweisen diese einfache Formel. Mit den Definitionen $S_n := \exp[(A+B)/n]$ und $T_n := \exp[A/n] \exp[B/n]$ können wir schreiben

$$\begin{aligned} \|e^{A+B} - (e^{A/n} e^{B/n})^n\| &= \|S_n^n - T_n^n\| \\ &= \|S_n^{n-1}(S_n - T_n) + S_n^{n-2}(S_n - T_n)T_n + \cdots + (S_n - T_n)T_n^{n-1}\|. \end{aligned}$$

Die Norm eines Produktes ist kleiner gleich dem Produkt der Normen, und deshalb gilt $\|\exp(X)\| \leq \exp(\|X\|)$. Mit der Dreiecksungleichung folgt dann

$$\|S_n\|, \|T_n\| \leq a^{1/n} \quad \text{mit} \quad a = e^{\|A\|+\|B\|},$$

und damit

$$\|S_n^n - T_n^n\| \leq n \cdot a^{(n-1)/n} \|S_n - T_n\|.$$

Benutzen wir noch $S_n - T_n = -[A, B]/2n^2 + O(1/n^3)$, so ist die Produktformel für Matrizen bewiesen.

Der Satz gilt allerdings auch für unbeschränkte selbstadjungierte Operatoren A, B für die $A + B$ auf dem Durchschnitt ihrer Definitionsbereiche (wesentlich) selbstadjungiert ist:

Satz von Trotter: *Sind A, B selbstadjungierte Operatoren und ist $A + B$ (wesentlich) selbstadjungiert auf dem Durchschnitt \mathcal{D} ihrer Definitionsbereiche, so gilt*

$$e^{-it(A+B)} = s - \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{-itA/n} e^{-itB/n})^n. \quad (2.28)$$

Sind A und B zusätzlich nach unten beschränkt, dann gilt auch

$$e^{-\tau(A+B)} = s - \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{-\tau A/n} e^{-\tau B/n})^n. \quad (2.29)$$

Der starke Limes bedeutet, daß die Konvergenz für alle Zustände $\psi \in \mathcal{D}$ gilt. Die Formel (2.28) wird in der Quantenmechanik gebraucht, die Formel (2.29) dagegen in der statistischen Mechanik sowie euklidischen Formulierung der Quantenmechanik [22, 23].

Nun nehmen wir an, daß $H = H_0 + V$ ist und wenden die Produktformel (2.28) auf (2.22) an. Mit $\epsilon = t/n$ und $\hbar = 1$ erhalten wir

$$\begin{aligned} K(t, q', q) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \langle q' | (e^{-i\epsilon H_0} e^{-i\epsilon V})^n | q \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int dq_1 \cdots dq_{n-1} \prod_{j=0}^{j=n-1} \langle q_{j+1} | e^{-i\epsilon H_0} e^{-i\epsilon V} | q_j \rangle, \end{aligned} \quad (2.30)$$

wobei wir $\int dq_j |q_j\rangle \langle q_j| = \mathbb{1}$ benutzten sowie $q = q_0$ und $q' = q_n$ setzten. Das Potential V ist diagonal in der Ortsdarstellung, so daß

$$\langle q_{j+1} | e^{-i\epsilon H_0} e^{-i\epsilon V} | q_j \rangle = \langle q_{j+1} | e^{-i\epsilon H_0} | q_j \rangle e^{-i\epsilon V(q_j)}. \quad (2.31)$$

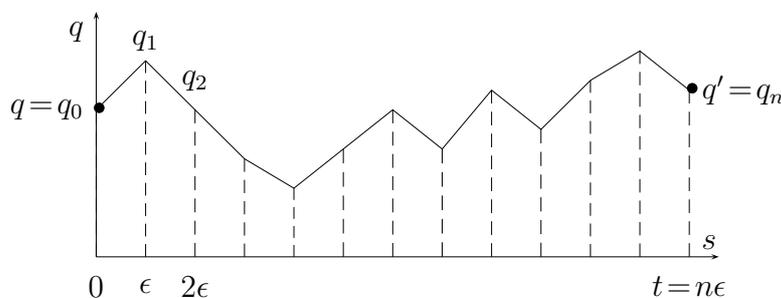
Jetzt setzen wir für den Propagator des freien Teilchens mit Hamiltonoperator H_0 das

Resultat (2.26) ein. Es folgt

$$K(t, q', q) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dq_1 \cdots dq_{n-1} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{n/2} \cdot \exp \left\{ i \epsilon \sum_{j=0}^{j=n-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 - V(q_j) \right] \right\}. \quad (2.32)$$

Diese *Feynman-Kac Formel* liefert die gesuchte Pfadintegraldarstellung für den Zeitentwicklungskern.

Um zu sehen, warum die rechte Seite Pfad- oder Wegintegral heißt, verbinden wir die Punkte $q = q_0, q_1, \dots, q_{n-1}, q_n = q'$ mit Strecken, so daß wir einen Weg bestehend aus kleinen Geradenstücken erhalten, wie in der folgenden Abbildung gezeigt.



Wir unterteilen das Intervall $[0, t]$ in n gleich lange Teilintervalle der Länge $\epsilon = t/n$ und identifizieren q_k mit $q(s = k\epsilon)$. Dann ist der Exponent in (2.32) das Riemannsche Integral für die klassische Wirkung eines sich längs des stückweise geraden Weges bewegenden Punktteilchens,

$$\sum_{j=0}^{j=n-1} \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 - V(q_j) \right] = \int_0^t ds \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{ds} \right)^2 - V(q(s)) \right]. \quad (2.33)$$

Das $n - 1$ -fache Integral $\int dq_1 \dots dq_{n-1}$ ist dann die Summe über alle stückweise geraden Wege von q nach q' . Da jeder stetige Weg von q nach q' durch einen stückweise geraden Weg approximiert werden kann und da wir den Kontinuumslimites $n \rightarrow \infty$ beziehungsweise $\epsilon \rightarrow 0$ vollführen, können wir das Integral als Summe über alle Wege ansehen, die zur Zeit $t = 0$ bei q beginnen und zur Zeit t bei q' enden. Setzen wir noch

$$\left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{n/2} = C \quad (2.34)$$

mit einer Konstanten C , welche zu einem unitären Zeitentwicklungskern Anlaß gibt, dann finden wir

$$K(t, q', q) = C \int_{q(0)=q}^{q(t)=q'} \mathcal{D}q e^{iS[q]/\hbar}. \quad (2.35)$$

Das formale Maß $\mathcal{D}q$ ist über den Grenzprozess (2.32) erklärt. Da das unendliche Produkt von Lebesquemaßen nicht existiert, hat \mathcal{D} keine präzise mathematische Bedeutung. Aber man kann ein Maß auf allen Wegen definieren, wenn man das Pfadintegral zu imaginären Zeiten fortsetzt.

Die Formel (2.35) gilt auch für Teilchen, die sich in mehr als einer Dimension bewegen, oder für allgemeinere Systeme mit verallgemeinerten Koordinaten q^1, \dots, q^N . Für weitere Eigenschaften des Pfadintegrals sowie Beispiele und Anwendungen verweise ich auf [24].

2.3 Euklidisches Pfadintegral

Der oszillierende Integrand $\exp(iS)$ im Pfadintegral (2.35) führt auf Distributionen. Falls es gelingen würde, die Oszillationen zu unterdrücken, dann gäbe es vielleicht die Möglichkeit, ein wohldefiniertes Pfadintegral zu konstruieren. Dies mag erklären, warum in beinahe allen rigorosen Arbeiten zum Pfadintegral eine imaginäre Zeit angenommen wird. Für imaginäre Zeiten kann in der Tat ein Maß auf allen Pfaden streng konstruiert werden und die Konstruktion führt auf das Wiener-Maß. Mit einer sogenannten Wickdrehung wird also t zu imaginären Zeiten analytisch fortgesetzt und bei der inversen Wickdrehung rotiert man wieder zurück zu reellen Zeiten. In der Praxis ersetzt man im Pfadintegral (2.35) die Zeit t durch $-i\tau$, versucht das so erhaltene euklidische Pfadintegral zu lösen, und ersetzt in der Lösung die imaginäre Zeit τ wieder durch it .

2.3.1 Quantenmechanik für imaginäre Zeiten

Für selbstadjungierte Hamilton-Operatoren hat der unitäre Zeitentwicklungsoperator die Spektraldarstellung

$$U(t) = e^{-iHt} = \int e^{-iEt} dP_E, \quad (2.36)$$

wobei P_E die spektrale Familie von H ist. Der Träger des Integrales ist das Spektrum von H . Für ein diskretes Spektrum ist P_E der orthogonale Projektor auf den von allen Eigenfunktionen mit Energien $\leq E$ aufgespannten Unterraum von \mathcal{H} . Wir wollen annehmen, daß der Hamilton-Operator nach unten beschränkt ist. Dann können wir eine Konstante addieren, so daß $H \geq 0$ gilt und das Integral (2.36) von 0 bis ∞ geht. Jetzt ersetzen wir

$t \rightarrow t - i\tau$ mit dem Resultat

$$e^{-(\tau+it)H} = \int_0^\infty e^{-E(\tau+it)H} dP_E. \quad (2.37)$$

Mit unseren Annahmen ist dies eine holomorphe Halbgruppe in der unteren komplexen Halbebene

$$\{t - i\tau \in \mathbb{C}, \tau \geq 0\}. \quad (2.38)$$

Kennen wir den Operator (2.37) auf der unteren imaginären Achse ($t = 0, \tau \geq 0$), dann können wir zur reellen Achse ($t, \tau = 0$) analytisch fortsetzen. Wenn wir in der Minkowski Metrik $ds^2 = dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$ die Zeit fortsetzen, $t \rightarrow -i\tau$ dann erhalten wir eine Metrik mit euklidischer Signatur. Deshalb nennt man die Theorie mit imaginärer Zeit oft euklidische Theorie. Streng genommen ist dieser Name nur für relativistische Feldtheorien (und nicht in der Quantenmechanik) angebracht.

Die Entwicklungsoperatoren $U(t)$ sind für alle reellen Zeiten definiert und bilden eine *einparametrische unitäre Gruppe*. $U(t)$ erfüllt die Schrödingergleichung

$$i \frac{d}{dt} U(t) = H U(t)$$

und der Kern $K(t, q', q) = \langle q' | U(t) | q \rangle$ ist komplex und oszillierend.

Für imaginäre Zeiten sind die „Entwicklungsoperatoren“

$$U(\tau) = e^{-\tau H} \quad (2.39)$$

hermitesch (und nicht unitär) mit reellem Spektrum. Die $U(\tau)$ existieren für positive τ und bilden eine *Halbgruppe*. Für beinahe alle Anfangsdaten ist eine Entwicklung in die „imaginäre Vergangenheit“ allerdings unmöglich. $U(\tau)$ erfüllt eine *Diffusionsgleichung*,

$$\frac{d}{d\tau} U(\tau) = -H U(\tau), \quad (2.40)$$

mit einem für reelle Hamilton-Operatoren reellen Kern¹

$$K(\tau, q', q) = \langle q', \tau | q, 0 \rangle = \langle q' | e^{-\tau H} | q \rangle \quad \text{mit} \quad K(0, q', q) = \delta(q', q). \quad (2.41)$$

Der Kern ist strikt positiv:

Satz: *Das Potential V sei stetig und nach unten beschränkt, und $H = -\frac{1}{2}\Delta + V$ sei*

¹Bei einer Kopplung an das magnetische Feld wird H und damit $U(\tau)$ komplex.

wesentlich selbstadjungiert. Dann ist

$$\langle q' | e^{-\tau H} | q \rangle > 0. \quad (2.42)$$

Für einen Beweis dieses Satzes verweise ich auf das Buch von GLIMM und JAFFE [21], Seite 50. Zum Beispiel sind die Kerne für das *freie Teilchen* in d Dimensionen und für imaginäre Zeiten

$$K_0(\tau, q', q) = \left(\frac{m}{2\pi\tau} \right)^{d/2} e^{-m(q'-q)^2/2\tau} \quad (2.43)$$

und den *harmonischen Oszillator* in d Dimensionen und für imaginäre Zeiten

$$K_\omega(\tau, q', q) = \left(\frac{m\omega}{2\pi \sinh \omega\tau} \right)^{d/2} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2} \left[(q'^2 + q^2) \coth \omega\tau - \frac{2q'q}{\sinh \omega\tau} \right] \right\}, \quad (2.44)$$

offensichtlich positiv. Diese Positivität ist wesentlich für die weitreichende Beziehung zwischen der euklidischen Quantenmechanik (Quantenfeldtheorie) und der Wahrscheinlichkeitstheorie. Die Größe

$$P(\tau, q) = C \cdot \langle q, \tau | 0, 0 \rangle = C \cdot K(\tau, q, 0), \quad (2.45)$$

kann als Wahrscheinlichkeit für die Bewegung von 0 nach q im Zeitintervall τ interpretiert werden². Die Wahrscheinlichkeit dafür irgendwo zu landen muß Eins sein,

$$C \cdot \int dq \langle q, \tau | 0, 0 \rangle = C \cdot \int dq K(\tau, q, 0) = 1, \quad (2.46)$$

und diese Forderung legt C fest. Für ein freies Teilchen erhält man

$$P_\tau(q) = \left(\frac{m}{2\pi\tau} \right)^{d/2} e^{-mq^2/2\tau},$$

und dies ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für die *Brownsche Bewegung* mit Diffusionskoeffizient $D = 1/2m$.

Vakuumerwartungswerte von Feldoperatoren an verschiedenen Raumzeitpunkten sind in einer Quantenfeldtheorie sehr wichtig und werden in dieser Vorlesung eine große Rolle spielen. In der Quantenmechanik haben diese Erwartungswerte die Form

$$W^{(n)}(t_1, \dots, t_n) = \langle 0 | q(t_1) \cdots q(t_n) | 0 \rangle, \quad q(t) = e^{itH} q e^{-itH}. \quad (2.47)$$

²Um die Notation einfach zu halten bezeichnet hier q und nicht q' den Endpunkt.

Diese nach ARTHUR WIGHTMAN benannten Funktionen ändern bei Vertauschung zweier Argumente, da Ortsoperatoren zu verschiedenen Zeiten nicht vertauschen. Wir dürfen wieder annehmen, daß die Energie des Grundzustandes $|0\rangle$ verschwindet. Nun setzen wir die Wightmanfunktionen zu komplexen Zeiten $z_i = t_i - i\tau_i$ fort,

$$W^{(n)}(z_1, \dots, z_n) = \langle 0 | q e^{-i(z_1 - z_2)H} q e^{-i(z_2 - z_3)H} q \dots q e^{-i(z_{n-1} - z_n)H} q | 0 \rangle. \quad (2.48)$$

Wir haben benutzt, daß H den Grundzustand annihiliert und deshalb $\exp(i\zeta H) |0\rangle = |0\rangle$ gilt. Hier müssen die Imaginärteile der z_k geordnet sein,

$$\Im(z_k - z_{k+1}) \leq 0.$$

Mit obiger Definition der komplexen Zeiten z_i folgt die *Analytizität* von $W^{(n)}$ im Gebiet

$$\tau_1 > \tau_2 \dots > \tau_n. \quad (2.49)$$

Die Wightmanfunktionen für reelle Zeiten sind deshalb die Randwerte der analytischen Wightmanfunktionen für komplexe Argumente

$$W^{(n)}(t_1, \dots, t_n) = \lim_{\substack{\Im z_i \rightarrow 0 \\ \Im(z_{k+1} - z_k) > 0}} W^{(n)}(z_1, \dots, z_n). \quad (2.50)$$

Die Funktionen mit imaginären Argumenten heißen *Schwingerfunktionen*,

$$\begin{aligned} S^{(n)}(\tau_1, \dots, \tau_n) &= W^{(n)}(-i\tau_1, \dots, -i\tau_n) \\ &= \langle 0 | q e^{-(\tau_1 - \tau_2)H} q e^{-(\tau_2 - \tau_3)H} q \dots q e^{-(\tau_{n-1} - \tau_n)H} q | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Wie sieht dies nun für den Oszillator mit (renormiertem) Hamilton-Operator

$$H = \omega a^\dagger a,$$

aus, wobei a und a^\dagger die bekannten Absteige- und Aufsteigeoperatoren sind,

$$q = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (a^\dagger + a) \quad \text{und} \quad p = i\sqrt{\frac{m\omega}{2}} (a^\dagger - a) \quad \text{mit} \quad [a, a^\dagger] = 1.$$

Der Grundzustand $|0\rangle$ hat die Energie $E_0 = 0$ und der erste angeregte Zustand $|1\rangle = a^\dagger |0\rangle$ die Energie $E_1 = \omega$. Die Zweipunkt-Wightmanfunktion hängt nur von der Zeitdifferenz $t_1 - t_2$ ab,

$$W^{(2)}(t_1 - t_2) = \langle 0 | q(t_1) q(t_2) | 0 \rangle = \frac{1}{2m\omega} \langle 0 | (a + a^\dagger) e^{-i(t_1 - t_2)H} (a + a^\dagger) | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{2m\omega} \langle 1 | e^{-it\omega a^\dagger a} | 1 \rangle = \frac{e^{-i\omega(t_1-t_2)}}{2m\omega},$$

und die zugehörige Schwingerfunktion hat die Form

$$S^{(2)}(\tau_1 - \tau_2) = \frac{e^{-\omega(\tau_1 - \tau_2)}}{2m\omega}. \quad (2.52)$$

In einer relativistischen Quantenfeldtheorie sind die Schwingerfunktionen $S^{(n)}$ invariant unter der euklidischen Lorentzgruppe $SO(4)$ und $S^{(n)}(x_1, \dots, x_n)$ ist eine symmetrische Funktion seiner Argumente $x_i \in \mathbb{R}^4$. In der Quantenmechanik ist dies nicht der Fall.

2.3.2 Das Pfadintegral für imaginäre Zeiten

Nun wollen wir die Pfadintegral-Formulierung der Quantenmechanik mit imaginärer Zeit formulieren. Wir erinnern daran, daß die Produktformel von Lie und Trotter (2.29) aus der Formel (2.27) hervorgeht, wenn man it durch τ ersetzt. Genauso wie im kanonischen Zugang dreht man die reelle Zeit t mit einer Wickrotation in die imaginäre Zeit $-i\tau$ oder euklidische Zeit τ . Dies ist allerdings nur statthaft, wenn H nach unten beschränkt ist. Mit denselben Argumenten wie in der Quantenmechanik mit reeller Zeit kann man die zu (2.32) analoge Formel für die euklidische Zeit τ beweisen. Die einzige Änderung ist die Ersetzung von $i\epsilon$ durch ϵ . Man findet

$$K(\tau, q', q) = \langle q' | e^{-\tau H/\hbar} | q \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dq_1 \cdots dq_{n-1} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{n/2} e^{-S_E(q_0, q_1, \dots, q_n)/\hbar}$$

mit $S_E(\dots) = \epsilon \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 + V(q_j) \right\},$ (2.53)

wobei wieder $q_0 = q$ und $q_n = q'$ gesetzt wurden.

Die rechte Seite ist die Zustandssumme für ein System auf einem eindimensionalen Gitter, dessen Gitterpunkte mit j bezeichnet sind. Auf jedem Gitterpunkt j ist eine reellwertige Variable q_j definiert und die Wechselwirkung ist eine zwischen nächsten Nachbarn q_j und q_{j+1} . Die Werte des Gitterfeldes

$$\{0, 1, \dots, n-1, n\} \longrightarrow \{q_0, q_1, \dots, q_{n-1}, q_n\}$$

werden am Rande des Gitters festgehalten, $q_0 = q$ und $q_n = q'$. Das vielfache Integral (2.53) entspricht der Summe über alle Gitterkonfigurationen. Mit dieser Interpretation wird \hbar zu einer Temperatur und der klassische Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ geht über in den Tieftemperaturlimites des Gittersystems.

Im Kontinuumslimites $n \rightarrow \infty$ wird die rechte Seite in (2.53) zu einem euklidischen

Pfadintegral mit euklidischer Wirkung

$$S_E[q] = \int_0^\tau d\sigma \left[\frac{1}{2} m \dot{q}^2 + V(q(\sigma)) \right] \quad (2.54)$$

und positiven Kern

$$K(\tau, q', q) = \langle q' | e^{-\tau H/\hbar} | q \rangle = C \int_{q(0)=q}^{q(\tau)=q'} \mathcal{D}q e^{-S_E[q]/\hbar}. \quad (2.55)$$

Die Kerne für das freie Teilchen und den harmonischen Oszillator wurden bereits in (2.43) und (2.44) angegeben.

2.3.3 Pfadintegrale in der statistischen Mechanik

Die Pfadintegralformulierung führt unmittelbar zu einer Verbindung zwischen Quantenmechanik und statistischer Mechanik. Die Zustandssumme ist ein Pfadintegral mit imaginärer Zeit.

Die Spur des Operators $K(\tau) = \exp(-\tau H/\hbar)$, dessen Kern die Pfadintegraldarstellung (2.55) hat, ist gerade die kanonische *Zustandssumme* zur Temperatur $T = \hbar/\tau$ oder zur inversen Temperatur β ,

$$Z(\beta) = \text{tr} e^{-\beta H} = \sum e^{-\beta E_n} = \int dq K(\hbar\beta, q, q), \quad \beta = \frac{1}{T}. \quad (2.56)$$

Im auftretenden Kern K ist $q = q'$ und deshalb wird in dessen Pfadintegraldarstellung (2.55) nur über periodische Wege von q nach q integriert. Wegen der anschließenden Integration über q ergibt sich dann das Wegintegral über *alle periodischen* Wege,

$$Z(\beta) = C \oint \mathcal{D}q e^{-S_E[q]/\hbar}, \quad q(\hbar\beta) = q(0). \quad (2.57)$$

Im Folgenden setzen wir wieder $\hbar = 1$. Für den harmonischen Oszillator ist

$$K(\beta, q', q) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \sinh(\omega\beta)}} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2} \left[(q'^2 + q^2) \coth(\omega\beta) - \frac{2q'q}{\sinh(\omega\beta)} \right] \right\}, \quad (2.58)$$

und die Zustandssumme hat die Form

$$Z(\beta) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \sinh(\omega\beta)}} \int dq \exp \left\{ -m\omega \tanh\left(\frac{1}{2}\omega\beta\right) q^2 \right\}$$

$$= \frac{1}{2 \sinh(\frac{1}{2}\omega\beta)} = \frac{e^{-\frac{1}{2}\omega\beta}}{1 - e^{-\omega\beta}} = e^{-\frac{1}{2}\omega\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\omega\beta}, \quad (2.59)$$

wobei wir $\sinh x = 2 \sinh x/2 \cdot \cosh x/2$ benutzten. Vergleichen wir mit (2.56), so können wir die Energien des harmonischen Oszillators mit Kreisfrequenz ω ablesen,

$$E_n = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (2.60)$$

Für große $\omega\beta$, d.h. für sehr tiefe Temperaturen, wird die Summe (2.56) vom Beitrag des Grundzustandes dominiert, und entsprechend konvergiert die *freie Energie* gegen die Grundzustandsenergie,

$$F(\beta) \equiv -\frac{1}{\beta} \log Z(\beta) \xrightarrow{\omega\beta \rightarrow \infty} E_0. \quad (2.61)$$

Oft ist man an den Energien und Wellenfunktionen der angeregten Zustände interessiert. Wir diskutieren nun eine elegante Methode zur Berechnung dieser Größen.

2.3.4 Korrelationsfunktionen in der Quantenstatistik

Die Energien der angeregten Zustände kann man aus den thermischen Korrelationsfunktionen zu imaginären Zeiten gewinnen. Dies sind Erwartungswerte von Produkten des Ortsoperators zu verschiedenen imaginären Zeiten,

$$q_E(\tau) = e^{\tau H/\hbar} q e^{-\tau H/\hbar}, \quad q_E(0) = q(0), \quad (2.62)$$

im kanonischen Ensemble,

$$\langle q_E(\tau_1) \cdots q_E(\tau_n) \rangle_\beta \equiv \frac{1}{Z(\beta)} \text{tr} e^{-\beta H} q_E(\tau_1) \cdots q_E(\tau_n), \quad (2.63)$$

wobei $Z(\beta)$ die kanonische Zustandssumme ist. Am absoluten Temperaturnullpunkt gehen sie, wie wir gleich zeigen werden, in die Schwingerfunktionen über.

Die *Energielücke* zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand kann man aus der thermischen Zweipunktfunktion

$$\begin{aligned} \langle q_E(\tau_1) q_E(\tau_2) \rangle_\beta &= \frac{1}{Z(\beta)} \text{tr} e^{-\beta H} q_E(\tau_1) q_E(\tau_2) \\ &= \frac{1}{Z(\beta)} \text{tr} e^{-(\beta-\tau_1)H} q e^{-(\tau_1-\tau_2)H} q e^{-\tau_2 H} \end{aligned} \quad (2.64)$$

wie folgt gewinnen: Zur Berechnung der Spur verwenden wir die orthonormierten Energie-

Eigenzustände $|n\rangle$ und schieben den Einheitsoperator $\mathbb{1} = \sum |m\rangle\langle m|$ ein, mit dem Resultat

$$\langle \dots \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-(\beta-\tau_1+\tau_2)E_n} e^{-(\tau_1-\tau_2)E_m} \langle n|q|m\rangle \langle m|q|n\rangle. \quad (2.65)$$

Für tiefe Temperaturen $\beta \rightarrow \infty$ sind die Terme mit E_n , $n \neq 0$ exponentiell unterdrückt und die thermische Zweipunktfunktion geht in die Schwingerfunktion über,

$$\langle q_E(\tau_1)q_E(\tau_2) \rangle_\beta \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \sum_{m \geq 0} e^{-(\tau_1-\tau_2)(E_m-E_0)} |\langle 0|q|m\rangle|^2 = \langle 0|q_E(\tau_1)q_E(\tau_2)|0\rangle. \quad (2.66)$$

Ganz analog findet man für die Einpunktfunktion

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle q_E(\tau) \rangle_\beta = \langle 0|q|0\rangle. \quad (2.67)$$

Die *verbundene Zweipunktfunktion*

$$\langle q_E(\tau_1)q_E(\tau_2) \rangle_{c,\beta} \equiv \langle q_E(\tau_1)q_E(\tau_2) \rangle_\beta - \langle q_E(\tau_1) \rangle_\beta \langle q_E(\tau_2) \rangle_\beta \quad (2.68)$$

wird für große Zeitunterschiede $\tau_1 - \tau_2$ exponentiell klein,

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle q_E(\tau_1)q_E(\tau_2) \rangle_{c,\beta} = \sum_{m > 0} e^{-(\tau_1-\tau_2)(E_m-E_0)} |\langle 0|q|m\rangle|^2, \quad (2.69)$$

da im Gegensatz zur Zweipunktfunktion der Term mit $m = 0$ nicht vorkommt. Die verbundene Zweipunktfunktion ist die Zweipunktfunktion für den verschobenen Ortsoperator,

$$\langle q_E(\tau_1)q_E(\tau_2) \rangle_{c,\beta} \equiv \langle \Delta q_E(\tau_1)\Delta q_E(\tau_2) \rangle_\beta \quad \Delta q_E(\tau) = q_E(\tau) - \langle q_E(\tau) \rangle_\beta. \quad (2.70)$$

In der Störungstheorie tragen nur verbundene Feynmangraphen zu $\langle \dots \rangle_c$ bei. Für große euklidische Zeitdifferenzen $\tau_1 - \tau_2$ kann man nun die Energielücke und den Betrag des Matrixelementes $\langle 0|q|1\rangle$ leicht ablesen,

$$\langle q_E(\tau_1)q_E(\tau_2) \rangle_{c,\beta \rightarrow \infty} \longrightarrow e^{-(E_1-E_0)(\tau_1-\tau_2)} |\langle 0|q|1\rangle|^2, \quad \tau_1 - \tau_2 \rightarrow \infty. \quad (2.71)$$

Als nächstes leiten wir die Pfadintegraldarstellung für die thermischen Korrelationsfunktionen ab. Wir lassen eine Zeitabhängigkeit von H zu. Wie beim Zeitentwicklungsoperator berechnen wir zuerst das Matrixelement

$$\langle q'|K(\beta)q_E(\tau_1)q_E(\tau_2)|q\rangle, \quad \text{mit} \quad q_E(\tau) = K(-\tau)qK(\tau). \quad (2.72)$$

Hierin ist $K(\tau)$ der euklidische Propagator, dessen Kern die Pfadintegraldarstellung (2.55) hat. Wir schieben zweimal die Eins ein, so daß

$$\langle \dots \rangle = \int dv du \langle q' | K(\beta - \tau_1) | v \rangle v \langle v | K(\tau_1 - \tau_2) | u \rangle u \langle u | K(\tau_2) | q \rangle.$$

Setzen wir für die Propagatoren das Resultat (2.55) ein, dann ist die Pfadintegraldarstellung der thermischen Zweipunktfunktion evident: Zuerst summieren wir über alle Wege von $q \rightarrow u$ in der „imaginären“ Zeit τ_2 und anschließend multiplizieren wir mit der Koordinate u zur Zeit τ_2 . Danach summieren wir über alle Wege $u \rightarrow v$ in der Zeit $\tau_1 - \tau_2$ und multiplizieren mit der Koordinate v zur Zeit τ_1 . Zum Schluß summieren wir noch über alle Wege $v \rightarrow q'$ in der Zeit $\beta - \tau_1$. Die Integration über die Zwischenorte u und v bedeutet, daß über *alle* Wege $q \rightarrow q'$ summiert wird und nicht nur über Wege die zur Zeit τ_2 durch u und zur Zeit τ_1 durch v gehen. Neben $\exp(-S_E)$ enthält der Integrand den Faktor $vu = q(\tau_1)q(\tau_2)$. Die gesamte Zeit ist β , so daß schlussendlich

$$\langle q' | e^{-\beta \hat{H}} \hat{q}_E(\tau_1) \hat{q}_E(\tau_2) | q \rangle = C \cdot \int_{q(0)=q}^{q(\beta)=q'} \mathcal{D}q e^{-S_E[q]} q(\tau_1)q(\tau_2), \quad \tau_1 > \tau_2. \quad (2.73)$$

Zur Berechnung der Spur im thermischen Erwartungswert (2.64) setzen wir $q = q'$, integrieren über q und dividieren das Resultat durch die Zustandssumme $Z(\beta)$. Im Pfadintegral bedeutet $q = q'$ und das Integral über q , daß wir über alle periodischen Wege mit Periode β summieren,

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}_E(\tau_1) \hat{q}_E(\tau_2) \rangle_\beta &= \frac{1}{Z(\beta)} \oint \mathcal{D}q \exp(-S_E[q]) q(\tau_1)q(\tau_2), \\ Z &= \oint \mathcal{D}q \exp(-S_E[q]). \end{aligned} \quad (2.74)$$

Bei der Anwendung der Trotter-Formel haben wir $\tau_1 > \tau_2$ vorausgesetzt.

Die Pfadintegraldarstellung für die höheren zeitgeordneten thermischen Korrelationsfunktionen erhält man analog. Sie können aus dem erzeugenden Kern

$$Z(\beta, j, q', q) = C \int_{q(0)=q}^{q(\beta)=q'} \mathcal{D}q e^{-S_E[q] + \int j(\tau)q(\tau)}, \quad (2.75)$$

oder dem zugehörigen erzeugenden Funktional, der Zustandssumme in Gegenwart einer

äußeren Quelle,

$$Z(\beta, j) = \int dq Z(\beta, j, q, q) = C \oint_{q(0)=q(\beta)} \mathcal{D}q e^{-S_E[q] + \int j(\tau)q(\tau)}, \quad (2.76)$$

gewonnen werden. Man braucht diese nur genügend oft nach der Quelle $j(\tau)$ abzuleiten. So ist die thermische Zweipunktfunktion (2.64) gleich

$$\langle T \hat{q}_E(\tau_1) \hat{q}_E(\tau_2) \rangle_\beta = \frac{1}{Z(\beta, 0)} \frac{\delta^2}{\delta j(\tau_1) \delta j(\tau_2)} Z(\beta, j) \Big|_{j=0}, \quad (2.77)$$

wobei T für die Zeitordnung steht. Beide Seiten stimmen für $\tau_1 > \tau_2$ überein und da die rechte Seite symmetrisch in den Zeitargumenten ist, müssen wir auf der linken Seite die Zeitordnung einschieben. Wir erhielten die Zeitordnung natürlich auch wenn wir die obige Rechnung für $\tau_2 > \tau_1$ wiederholten.

Die *verbundenen Korrelationsfunktionen* werden vom Logarithmus der Zustandssumme, dem *Schwingerfunktional*

$$W(\beta, j) = \log Z(\beta, j) \quad (2.78)$$

erzeugt. Für ein konservatives System mit zeitunabhängiger Quelle j ist W proportional zur freien Energie. Die verbundenen Korrelationsfunktionen erhält man durch funktionale Ableitungen des Funktionals,

$$\langle T \hat{q}_E(\tau_1) \hat{q}_E(\tau_2) \cdots \hat{q}_E(\tau_n) \rangle_{c,\beta} = \frac{\delta^n}{\delta j(\tau_1) \cdots \delta j(\tau_n)} W(\beta, j) \Big|_{j=0}. \quad (2.79)$$

2.4 Anhang A: Der harmonische Oszillator

Nach Diskretisierung der euklidischen Zeit lautet die Pfadintegraldarstellung für die Zustandssumme des harmonischen Oszillators mit Lagrangefunktion

$$L = \frac{m}{2} \dot{q}^2 + \mu q^2 \quad (A-1)$$

auf dem Gitter mit Gitterkonstanten ϵ und n Stützstellen wie folgt,

$$Z = \int dq_1 \cdots dq_n \left(\frac{m}{2\pi\epsilon} \right)^{n/2} \exp \left\{ -\epsilon \sum_{j=0}^{n-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 + \mu q_j^2 \right] \right\}$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi\epsilon}\right)^{n/2} \int dq_1 \cdots dq_n \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{q}, A\mathbf{q})\right). \quad (\text{A-2})$$

Im ersten Integral ist $q_0 = q_n$ und im zweiten haben wir die reguläre symmetrische Matrix

$$A = \frac{m}{\epsilon} \begin{pmatrix} \alpha & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & \alpha & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & -1 \\ -1 & 0 & 0 & \cdots & -1 & \alpha \end{pmatrix}, \quad \alpha = 2\left(1 + \frac{\mu}{m}\epsilon^2\right), \quad (\text{A-3})$$

eingeführt. Dies ist eine *Toeplitz-Matrix* mit denselben Elementen in jeder Nebendiagonalen. Diese Eigenschaft folgt aus der Invarianz der Wirkung unter Gittertranslationen.

Zur Berechnung von Momenten ist es vorteilhaft, von der *erzeugenden Funktion*

$$\begin{aligned} Z[\mathbf{j}] &= \left(\frac{m}{2\pi\epsilon}\right)^{n/2} \int d^n q \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{q}, A\mathbf{q}) + (\mathbf{j}, \mathbf{q})\right\} \\ &= \frac{(m/\epsilon)^{n/2}}{\sqrt{\det A}} \exp\left\{\frac{1}{2}(\mathbf{j}, A^{-1}\mathbf{j})\right\} \end{aligned} \quad (\text{A-4})$$

Gebrauch zu machen. Hier haben wir die als bekannt vorausgesetzte Formel für Gaußsche Integrale zur Anwendung gebracht. Die Eigenwerte von A sind

$$\lambda_k = \frac{m}{\epsilon} \left(\alpha - 2 \cos \frac{2\pi k}{n}\right) = \frac{2}{\epsilon} \left(\mu\epsilon^2 + 2m \sin^2 \frac{\pi k}{n}\right), \quad k = 1, \dots, n, \quad (\text{A-5})$$

und die zugehörigen orthonormierten Eigenvektoren haben die Form

$$\psi(k) = \frac{1}{\sqrt{n}} (z^k, z^{2k}, \dots, z^{nk})^T \quad \text{mit} \quad z = e^{2\pi i/n}. \quad (\text{A-6})$$

Damit ergibt sich für die inverse Matrix

$$A^{-1} = \sum_k \frac{\psi(k)\psi^\dagger(k)}{\lambda_k} \quad \text{bzw.} \quad (A^{-1})_{pq} = \frac{\epsilon}{2n} \sum_{k=1}^n \frac{e^{2\pi i k(p-q)/n}}{\mu\epsilon^2 + 2m \sin^2 \frac{\pi k}{n}}. \quad (\text{A-7})$$

Die verbundenen Korrelationsfunktionen des Oszillators

$$\langle q_{i_1} \cdots q_{i_m} \rangle = \frac{\partial^m}{\partial j_{i_1} \cdots \partial j_{i_m}} \log Z[\mathbf{j}] \Big|_{\mathbf{j}=0} \quad (\text{A-8})$$

verschwinden für $m > 2$. Die einzige nicht-verschwindende Funktion ist

$$\langle q_i q_j \rangle_c = \langle q_i q_j \rangle = \frac{\partial^2}{\partial j_i \partial j_j} (\mathbf{j}, A^{-1} \mathbf{j}) = (A^{-1})_{ij}. \quad (\text{A-9})$$

Es folgt insbesondere, daß unabhängig von i gilt

$$\langle q_i^2 \rangle = \frac{\epsilon}{2n} \sum_{k=1}^n \frac{1}{\mu \epsilon^2 + 2m \sin^2 \frac{\pi k}{n}}. \quad (\text{A-10})$$

Zusammen mit dem Virialtheorem führt dieses Resultat auf die Grundzustandsenergie E_0 des Oszillators auf dem endlichen Gitter. Die entsprechenden Energien sind für verschiedene ϵ und n mit $\epsilon n = 10$ in der Tabelle (4.49) im nächsten Kapitel unter $E_0(\text{exakt})$ zu finden.

2.5 Aufgaben

Aufgabe 1: Gaußsches Integral

Zeigen Sie

$$\int dz_1 d\bar{z}_1 \dots dz_n d\bar{z}_n \exp \left(- \sum_{ij} \bar{z}_i A_{ij} z_j \right) = \pi^n (\det A)^{-1},$$

wobei A eine positive definite hermitesche $n \times n$ Matrix ist, und es sich bei den z_i um komplexe Integrationsvariablen handelt.

Aufgabe 2: Harmonischer Oszillator

Leiten Sie die in der Vorlesung verwendete Formel für den Kern $K(t, q', q) = \langle q' | e^{-iHt} | q \rangle$ des Zeitentwicklungsoperators des harmonischen Oszillators

$$H = \frac{1}{2} (p^2 + x^2)$$

her. Hier wurde zur Vereinfachung $\hbar = m = \omega = 1$ gesetzt. Drücken Sie dazu den Kern mittels Eigenfunktionen von H aus und verwenden Sie

$$\exp(-(\xi^2 + \eta^2)) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\zeta^n}{2^n n!} H_n(\xi) H_n(\eta) = \frac{1}{\sqrt{1 - \zeta^2}} \exp \left(\frac{-(\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta\zeta)}{1 - \zeta^2} \right).$$

Dabei sind H_n die Hermitefunktionen, d.h. die Eigenfunktionen von H .

Bemerkung: Dieses Ergebnis kann auch über die direkte Auswertung des Pfadintegrals

erhalten werden (siehe mein Vorlesungsskript *Path Integrals*, Seite 14-17).

Aufgabe 3: Freies Teilchen auf S^1

Ein freies Teilchen bewege sich in einer eindimensionalen „Box“ mit periodischen Randbedingungen. Berechnen Sie für das Teilchen den Zeitentwicklungskern $K(t_b - t_a, q_b, q_a) = \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle$. Verwenden Sie die bekannte Formel für den Zeitentwicklungskern des freien Teilchens, und versuchen Sie die durch die Randbedingungen eingeschränkten Pfade durch eine Summe von nicht eingeschränkten Pfaden auszudrücken.

Aufgabe 4: Verbundene und unverbundene Korrelationsfunktionen

In der Vorlesung wurde folgende Formel für die unverbundenen thermischen Korrelationsfunktionen abgeleitet:

$$\langle T \hat{q}_E(\tau_1) \dots \hat{q}_E(\tau_n) \rangle_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} \frac{\delta^n}{\delta j(\tau_1) \dots \delta j(\tau_n)} \oint \mathcal{D}q \exp \left(-S_E[q] + \int_0^\beta j(\tau) q(\tau) \right) \Big|_{j=0},$$

wobei über β -periodische Wege integriert wird. Nehmen Sie an, daß in der euklidischen Lagrangedichte $\mathcal{L}_E(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} \dot{q}^2 + V(q)$ das Potential gerade ist, d.h. $V(-q) = V(q)$ gilt.

a) Zeigen Sie, daß $\langle \hat{q}_E(\tau) \rangle_\beta = 0$ ist.

b) Drücken sie die unverbundene 4-Punktfunktion $\langle T \hat{q}_E(\tau_1) \dots \hat{q}_E(\tau_4) \rangle_\beta$ durch verbundene Korrelationsfunktionen aus.

Aufgabe 5: Semiklassische Entwicklung der Verteilungsfunktion

In der Vorlesung wurde gezeigt, daß die thermische Zustandssumme folgende Pfadintegraldarstellung hat,

$$Z(\beta) = C \int dq \int_{q(0)=q}^{q(\hbar\beta)=q} \mathcal{D}q e^{-S_E[q]/\hbar}.$$

Nach Reskalierung der imaginären Zeit und der Amplitude gemäß

$$\tau \longrightarrow \hbar\tau \quad \text{and} \quad q(\cdot) \longrightarrow \hbar q(\cdot)$$

hat das „Zeitintervall“ die Länge β anstelle von $\hbar\beta$ und

$$Z(\beta) = C \cdot \int dq \int_{q(0)=q/\hbar}^{q(\beta)=q/\hbar} \mathcal{D}q \exp \left[- \int_0^\beta \left\{ \frac{1}{2} m \dot{q}^2 + V(\hbar q(\cdot)) \right\} d\tau \right].$$

Die kinetische Energie dominiert das Potential für kleine \hbar solange das Teilchen nicht ruht. Zerlege nun den Weg in eine konstanten Anteil ohne kinetische Energie und Fluktuationen

um diesen Weg, $q(\cdot) = q/\hbar + \xi(\cdot)$. Zeige, dass

$$Z(\beta) = C \cdot \frac{1}{\hbar} \int dq \int_{\xi(0)=0}^{\xi(\beta)=0} \mathcal{D}\xi \exp \left[- \int_0^\beta \left\{ \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 + V(q + \hbar \xi) \right\} d\tau \right].$$

Die Konstante C ist so zu wählen, dass sich für ein freies Teilchen mit $V = 0$ das bekannte Resultat $Z(\beta, q, q) = (m/2\pi\beta\hbar^2)^{1/2}$ ergibt. Entwickle nun $\exp(-\int V)$ in Potenzen von \hbar und beweise das Zwischenresultat

$$Z = C \cdot \frac{1}{\hbar} \int dq e^{-\beta V(q)} \int_{\xi(0)=0}^{\xi(\beta)=0} \mathcal{D}\xi e^{-\frac{1}{2}m \int d\tau \dot{\xi}^2} \cdot \left[1 - \hbar V' \int \xi(\tau) - \frac{1}{2} \hbar^2 \{ V'' \int \xi^2(\tau) - (V')^2 \int \xi(\tau) \int \xi(s) \} + \dots \right],$$

wobei das Argument von V, V', \dots gleich q ist. Bedingte Erwartungswerte wie

$$\langle \xi(\sigma_1) \xi(\sigma_2) \rangle = \langle \xi(\sigma_2) \xi(\sigma_1) \rangle = C \cdot \int_{\xi(0)=0}^{\xi(\beta)=0} \mathcal{D}\xi e^{-\frac{1}{2}m \int d\tau \dot{\xi}^2} \xi(\sigma_1) \xi(\sigma_2)$$

können durch Differenzieren des erzeugenden Funktionals

$$C \int_{\xi(0)=0}^{\xi(\beta)=0} \mathcal{D}\xi e^{-\frac{1}{2}m \int d\tau \dot{\xi}^2 + \int d\tau j \xi} = \frac{m}{2\pi\beta} \exp \left(\frac{1}{m\beta} \int_0^\beta d\sigma_1 \int_0^{\sigma_1} d\sigma_2 (\beta - \sigma_1) \sigma_2 j(\sigma_1 j(\sigma_2)) \right)$$

berechnet werden. Beweisen sie diese Formel für das erzeugende Funktional und berechnen Sie die führende Ordnung der semiklassischen Entwicklung sowie die erste Korrektur.

Aufgabe 6: Hochtemperaturentwicklung der Zustandssumme

Wir untersuchen die Temperaturabhängigkeit der Zustandssumme interessiert und dürfen $\hbar = 1$ setzen. Wiederholen Sie die obige Rechnung, allerdings mit den Reskalierungen

$$\tau \longrightarrow \beta\tau \quad \text{und} \quad \xi \longrightarrow \sqrt{\beta}\xi,$$

so dass die β -Abhängigkeit nur vom Potential herrührt,

$$Z(\beta) = \frac{C}{\sqrt{\beta}} \int dq \int_{\xi(0)=0}^{\xi(1)=0} \mathcal{D}\xi \exp \left[- \int_0^1 \left\{ \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 + \beta V(q + \sqrt{\beta}\xi) \right\} d\tau \right].$$

Entwickeln Sie in Potenzen der inversen Temperatur β . Um die entstehenden Korrelationsfunktionen zu berechnen benutze man das erzeugende Funktional in der vorherigen Aufgabe für $\beta = 1$. Die verbleibenden Integrale über die Korrelationsfunktionen können relativ leicht ausgeführt werden. Bestimmen Sie die Terme der Ordnungen $T^{1/2}$, $T^{-1/2}$ und $T^{-3/2}$ in der Hochtemperaturentwicklung von $Z(\beta)$.