

2.3 Pfadintegral für quadratische Wirkungen (zeitabh. Oszillator)

Als nicht-triviales Beispiel betrachten wir eine klassische Wirkung der Form

$$S = \int dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} c(t) x^2 - e(t) x \right). \quad (2.28)$$

Dies schließt u.a. den harmonischen Oszillator mit ein ($c_{t_0} = \text{const.}$, $e_{t_0} = 0$).

Berechnen möchten wir den Propagator

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \int_{x_a(t_a)}^{x_b(t_b)} \mathcal{D}x \, e^{\frac{i}{\hbar} S}. \quad (2.29)$$

Dazu sei angenommen, daß wir über die klassische Lösung x_0 verfügen, welche die Euler-Lagrange-Gleichung löst:

$$\left. \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \right|_{x_0} \Rightarrow m \ddot{x}_0 + c(t) x_0 + e(t) = 0 \quad (2.30)$$

$$\text{Randbedingung: } x_0(t_a) = x_a, \quad x_0(t_b) = x_b$$

Nun führen wir eine neue Integrationsvariable $y(t)$ ein,

$$x(t) = x_0(t) + y(t) \Rightarrow y(t) = x(t) - x_0(t), \quad (2.31)$$

so daß $y(t)$ als Fluktuation um die klassische Lösung x_0 betrachtet werden kann.

Die "Jacobi-Determinante" dieser Variablentransformation ist $= 1$, denn

$$\mathcal{D}_X \sim \prod_n dx_n = \prod_n d(x_n - \underbrace{x_{0n}}_{\text{const.}}) = \prod_n dy_n \sim \mathcal{D}_Y. \quad (2.32)$$

Die Taylor-Entwicklung der Wirkung,

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= S[y(t) + x_0(t)] \\ &= S[x_0(t)] + \int dt \frac{\delta S}{\delta x} \Big|_{x_0(t)} y(t) + \frac{1}{2} \int dt dt' y(t) \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \Big|_{x_0(t)} y(t'), \end{aligned} \quad (2.33)$$

bricht nach der 2. Ordnung ab und ist damit exakt, da $S[x]$ ein quadratisches Funktional ist. Desweiteren ist $\frac{\delta S}{\delta x} \Big|_{x_0(t)} = 0$, da $x_0(t)$ die klass. Lsg. ist, so daß

$$S[x(t)] = S[x_0(t)] + \frac{1}{2} \int dt dt' y(t) S^{(2)}[x_0](t, t') y(t'), \quad (2.34)$$

mit der quadratischen Fluktuationmatrix

$$\begin{aligned} S^{(2)}[x_0] &:= \frac{\delta^2 S}{\delta x^2} \Big|_{x_0} \\ \Rightarrow S^{(2)}[x_0](t, t') &= \frac{\delta^2 S}{\delta x(t) \delta x(t')} \Big|_{x_0} \end{aligned} \quad (2.35)$$

Mit der Regel $\frac{\delta x(t)}{\delta x(t')} = \delta(t-t')$ für Funktionale

Differentiation, folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\delta S}{\delta x(t)} &= \frac{\delta}{\delta x(t)} \int dt'' \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2(t'') - \frac{1}{2} c(t'') x^2(t'') - e(t'') x(t'') \right) \\ &= \int dt'' \left[m \dot{x}(t'') \frac{d}{dt''} - c(t'') x(t'') - e(t'') \right] \delta(t''-t) \\ &= - \left[m \ddot{x}(t) + c(t) x(t) + e(t) \right] \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$\Rightarrow \frac{\delta^2 S}{\delta x(t) \delta x(t')} = \left[-m \frac{d^2}{dt^2} - c(t) \right] \delta(t-t') \quad (2.37)$$

symbolisch: $S^{(2)} = -m \frac{d^2}{dt^2} - c(t)$

Einsetzen von (2.34) in (2.29) führt zu:

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = e^{i \frac{S[x_b, x_a]}{\hbar}} \cdot \langle 0, \tilde{t}_b | 0, t_a \rangle \quad (2.38)$$

mit dem reduzierten Propagator

$$\langle 0, \tilde{t}_b | 0, t_a \rangle = \int_{y(t_b)=0}^{y(t_a)=0} \mathcal{D}y \, e^{i \frac{1}{\hbar} \int y S^{(2)} y} \quad (2.39)$$

Dieses Pfadintegral soll nun ausgewertet werden.

Dazu betrachten wir explizit den Limes-Prozeß $N \rightarrow \infty$:

$$\langle 0, t_b | 0, t_a \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \prod_{n=1}^N \int dy_n \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^N \left[\frac{m}{2\varepsilon} (y_{j+1} - y_j)^2 - \frac{1}{2} \varepsilon c_j y_j^2 \right] \right\} \quad (2.40)$$

mit $c_j = c(t_j)$, $t_j = t_a + \frac{j}{N+1}(t_b - t_a)$.

Wir definieren einen Vektor

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

mit dessen Hilfe der Exponent in (2.40) geschrieben werden kann als

$$\exp \{ \dots \} = \exp \{ - Y^T M Y \}, \quad (2.42)$$

mit der Matrix M :

$$M = \frac{m}{2i\hbar\varepsilon} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 2 & -1 \\ 0 & & & -2 & 2 \end{pmatrix} + \frac{i\varepsilon}{2\hbar} \begin{pmatrix} c_1 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & \ddots & & \\ 0 & & & \ddots & \\ & & & & c_N \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

Damit läßt sich (2.40) kompakt schreiben als:

$$\langle 0, t_b | 0, t_a \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \int d^N Y e^{-Y^T M Y} \quad (2.44)$$

Nun ist $M = i \bar{M}$ mit $\bar{M}$ hermitesch

$\Rightarrow$ M kann durch unitäre Transformation diagonalisiert werden:

$$M = i \bar{M} = i U^\dagger \bar{M}_D U = U^\dagger M_D U \quad (2.45)$$

mit M_D , bzw. $\bar{M}_D$, welche die Diagonalmatrizen mit den Eigenwerten von M , bzw. $\bar{M}$, darstellen:

$$M_D = \begin{pmatrix} m_1 & & 0 \\ & m_2 & \\ 0 & & m_3 & \\ & & & \ddots \\ & & 0 & & m_N \end{pmatrix}.$$

Die Eigenvektoren von M ergeben sich demnach

aus $Y_D := U Y \quad (2.46)$

(d.h. für $Y_{D1} = \begin{pmatrix} y_{D1} \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$ ist $Y_1 := U^\dagger Y_{D1}$ ein Eigenvektor von M mit Eigenwert m_1).

Nun ist wegen $|\det U| = 1$ die Jacobi-Determinante des Basiswechsels (2.46) = 1, so daß:

$$\begin{aligned} \int d^N Y e^{-Y^T M Y} &= \int d^N Y_D e^{-Y_D^T M_D Y_D} \\ &= \prod_{n=1}^N \int dY_{Dn} e^{-m_n Y_{Dn}^2} = \prod_{n=1}^N \sqrt{\frac{\pi}{m_n}} = \frac{\pi^{N/2}}{\sqrt{\det M}} \end{aligned} \quad (2.47)$$

Der reduzierte Propagator ist also

$$\begin{aligned}
 \langle 0, t_0 | 0, t_a \rangle &\stackrel{(2.44)}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N/2} \frac{\pi^{N/2}}{\sqrt{\det M}} \\
 &\stackrel{(2.47)}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{2i\hbar\varepsilon}{m} \right)^N \det M}} \quad (2.48) \\
 &\quad =: \det \tilde{M}_N
 \end{aligned}$$

mit

$$\tilde{M}_N = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 2 & -1 \\ 0 & & & -1 & 2 \end{pmatrix} + \left(-\frac{\varepsilon^2}{m} \right) \begin{pmatrix} c_1 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & c_N \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

Wir definieren die Determinante

$$d_N = \det \tilde{M}_N, \text{ sowie die Teildeterminanten}$$

$$d_j = \det \underbrace{(\tilde{M}_N)_{j \times j}}_{\text{erste } j \text{ Zeilen und } j \text{ Spalten}}$$

Desweiteren sei $d_0 := 1$ (Definition). Offensichtlich gilt:

$$d_1 = 2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1 \quad \neq \frac{\varepsilon^2}{m}$$

$$\begin{aligned}
 d_2 &= \det \begin{pmatrix} 2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1 & -1 \\ -1 & 2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_2 \end{pmatrix} = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1 \right) \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_2 \right) - 1 \\
 &= d_1 \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_2 \right) - d_0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 d_3 &= \det \begin{pmatrix} 2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_3 \end{pmatrix} \\
 &= d_2 \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_3 \right) - (-1) \det \begin{pmatrix} 2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1 & -1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
 &= d_2 \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_3 \right) - d_1
 \end{aligned}$$

Daraus lässt sich sukzessive die Rekursion ableiten

$$d_{j+1} = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_{j+1} \right) d_j - d_{j-1}$$

bzw

$$\frac{d_{j+1} - 2d_j + d_{j-1}}{\varepsilon^2} = -\frac{1}{m} c_{j+1} d_j \quad (2.50)$$

"

$$\frac{(d_{j+1} - d_j) - (d_j - d_{j-1})}{\varepsilon^2}$$

Mit $d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) \equiv d(t_a + j\varepsilon) = d_j$ folgt im
 Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ die DGL:

$$\frac{d^2}{dt^2} d(t) = -\frac{c(t)}{m} d(t) \quad (2.51)$$

Mit Blick auf (2.48) ist es sinnvoll die Größe

$$D(t, t_0) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon d(t) \quad (2.52)$$

zu betrachten:

$$\frac{d^2}{dt^2} D(t, t_0) = - \frac{c(t)}{m} D(t, t_0). \quad (2.53)$$

Die Anfangswerte sind

$$\underline{D(t \rightarrow t_0, t_0)} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon d_0 = \underline{0}$$

$$\begin{aligned} \underline{\frac{d}{dt} D(t \rightarrow t_0, t_0)} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \frac{d_1 - d_0}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m} c_1 - 1 \right) \\ &= \underline{1} \end{aligned} \quad (2.54)$$

Damit ist die Berechnung einer Determinante einer ∞ -großen Matrix zurückgeführt worden auf die Integration einer gewöhnlichen DGL.

$$\frac{d^2}{dt^2} D(t, t_0) + \frac{c(t)}{m} D(t, t_0) = 0, \quad D(t_0, t_0) = 0, \quad D'(t_0, t_0) = 1; \quad (2.55)$$

es gilt

$$\underline{D(t_b, t_a) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \varepsilon \det \hat{M}}, \quad \varepsilon(N+1) = t_b - t_a \quad (2.56)$$

(Gelfand-Yaglom Formalismus)

Damit gilt

$$\langle 0, t_b | 0, t_a \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar D(t_b, t_a)}} \quad (2.57)$$

und mit (2.38) erhalten wir den Propagator für allgemeine quadratische Wirkungen:

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar D(t_b, t_a)}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_0; x_b, x_a]} \quad (2.58)$$

Wie im freien Fall beobachten wir, daß die Phase des Propagators $\sim$ zur klassischen Wirkung ist.

Dies gilt offensichtlich für alle quadratischen Wirkungen.

Beispiele:

1) Freies Teilchen : $c(t) = 0$, $e(t) = 0$

$$\text{GY: } \frac{d^2}{dt^2} D(t, t_a) = 0 \quad , \quad D(t_a, t_a) = 0 \quad , \quad D'(t_a, t_a) = 1$$

$$\Rightarrow D(t, t_a) = \alpha \cdot (t - t_a) + \beta \quad , \quad \Downarrow \quad \beta = 0 \quad \Downarrow \quad \alpha = 1$$

$$\Rightarrow D(t_b, t_a) = t_b - t_a$$

$$S[x_b; x_a, t_a] \stackrel{\text{S. 21}}{=} \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{(t_b - t_a)}$$

$$\Rightarrow \langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}} e^{+i \frac{m}{\hbar} \frac{(x_b - x_a)^2}{2(t_b - t_a)}}$$

$$\hat{=} (2.21)$$

2) Harmonischer Oszillator : $c(t) = m\omega^2 = \text{const}$, $e(t) = 0$

$$\text{GY: } \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) D(t, t_a) = 0 \quad , \quad D(t_a, t_a) = 0 \quad , \quad D'(t_a, t_a) = 1$$

$$\Rightarrow D(t, t_a) = \alpha \cos \omega(t - t_a) + \beta \sin \omega(t - t_a) \quad \Rightarrow \quad \alpha = 0 \quad , \quad \Downarrow \quad \beta = \frac{1}{\omega}$$

$$\Rightarrow D(t_b, t_a) = \frac{\sin \omega(t_b - t_a)}{\omega} \quad (2.59)$$

Die Berechnung der klass. Wirkung des Harmonischen Oszillators ist ein Standardproblem der klass. Mechanik, siehe z.B. Dittich & Reuter

Wir verwenden hier das Ergebnis für eine klassische Trajektorie $x(t)$ mit $x(t_a) = x_a$, $x(t_b) = x_b$:

$$S[x_b; x_b, x_a] = \frac{m\omega}{2\sin\omega(t_b-t_a)} \left[(x_a^2 + x_b^2) \cos\omega(t_b-t_a) - 2x_a x_b \right]. \quad (2.60)$$

Damit ergibt sich ~~der~~ exakte Propagator zu

$$\underline{\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle_{H_0}} = \underline{\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin\omega(t_b-t_a)}}} e^{\frac{im\omega}{2\hbar \sin\omega(t_b-t_a)} \left[(x_a^2 + x_b^2) \cos\omega(t_b-t_a) - 2x_a x_b \right]}. \quad (2.61)$$

3) Vorschlag für eine Übungsaufgabe:

Teilchen im homogenen Feld: $c(t) = 0$, $e(t) \equiv e = \text{const}$

$$S \doteq \int_{t_b}^{t_a} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - e x \right) \quad \left(\begin{array}{l} \text{z.B.: } e \hat{=} m \cdot g \quad \text{Gravitationsfeld} \\ e \hat{=} e E \quad \text{elekt. Feld} \end{array} \right)$$

Zeige, daß der Propagator gegeben ist durch

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b-t_a)}} e^{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(x_b-x_a)^2}{2(t_b-t_a)} - \frac{1}{2} e(t_b-t_a)(x_b+x_a) - \frac{e^2(t_b-t_a)^3}{24m} \right]}. \quad (2.62)$$

Verwende die Gelfand-Yaglom Methode.