

3.3 Semiklassische Approximation

Das Pfadintegral formalisiert die QM direkt in der Sprache der Fluktuationen. Der klassische Limes folgt dann in natürlicher Weise im dem Parameterbereich, in dem die Beiträge der Fluktuationen klein sind gegenüber den klassischen Orbits. Ein Beispiel dafür sind hochangeregte Zustände im Atom, bei denen sich das Wellenpaket des Elektrons ähnlich wie ein klass. Partikelchen um den Kern bewegt.

Die systematische Berechnung von fluktuations-induzierten Korrekturen um den klassischen Limes nennt man Semi-klassische Entwicklung. Diese wird realisiert in der WKB-Approximation (Wenzel-Kramers-Brillouin).

Zunächst ein

Crash-Kurs zur WKB Approx. in der Schrödinger-Theorie

Schrödinger-Gl. im Ortsraum:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 - (E - V(\vec{x})) \right] \psi(\vec{x}) = 0 \quad (3.30)$$

Def. . lokaler klass. Impuls:

$$p(\vec{x}) := \sqrt{2m (E - V(\vec{x}))} \quad (3.31)$$

$$\Rightarrow (-\hbar^2 \vec{\nabla}^2 - p^2(\vec{x})) \Psi(\vec{x}) = 0$$

Ansatz für die Wellenfkt.:

$$\Psi(\vec{x}) \approx \text{const.} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x})}, \quad S(\vec{x}): \text{"Eikonal"} \quad (3.32)$$

(für das Folgende vernachlässigen wir die Ortsabh. der Amplitude, die in WKB-Approx. natürlich konsistent berechnet werden kann.)

$$\stackrel{(3.31)}{\Rightarrow} -i\hbar \vec{\nabla}^2 S(\vec{x}) + (\vec{\nabla} S(\vec{x}))^2 - p^2(\vec{x}) = 0 \quad (3.33)$$

($\hat{=}$ Riccati'sche Dgl.)

WKB-Annahme: das Potential / der klass. Impuls sei räumlich langsam veränderlich auf Skalen der De Broglie - Wellenlänge, d.h.

$$\varepsilon := \lambda \cdot \left| \frac{\vec{\nabla} p(\vec{x})}{p(\vec{x})} \right| = \frac{2\pi\hbar}{p(\vec{x})} \left| \frac{\vec{\nabla} p(\vec{x})}{p(\vec{x})} \right| \ll 1 \quad (3.34)$$

(WKB Bedingung)

Extremfall: $V = \text{const} \rightarrow p = \text{const}$

$$\Rightarrow \mathcal{Y} \rightarrow \vec{p} \cdot \vec{x} + \text{const} \quad (\text{Ebene Welle})$$

(3.35)

Beobachtung: die WKB-Bedingung läßt sich formal erfüllen durch die Wahl $\hbar \rightarrow 0$. In führender Ordnung $\hbar^0$ lautet dann (3.33):

$$(\vec{\nabla} \mathcal{Y}_0(\vec{x}))^2 - p^2(\vec{x}) = 0. \quad (3.36)$$

Da dies Gleichung unabh. von $\hbar$ ist, muß sie eine klass. Bedeutung haben. Dazu betrachten wir die klass. Wirkung für einen Orbit, der bei $\vec{x}_0$ bei $t=0$ beginnt und in $\vec{x}$ bei t endet, als Funktion von $\vec{x}$ und t :

$$S(\vec{x}, t) = \int_0^t dt \left(\vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - \underset{\text{zeitunabh.}}{H(\vec{q}, \vec{p})} \right), \quad \begin{aligned} \vec{q}(t) &= \vec{x}, \\ \vec{q}(0) &= 0 \end{aligned} \quad (3.37)$$

Schränken wir die Menge aller Orbits ein auf jene konstanter Energie E , dann gilt

$$\underline{\underline{\vec{\nabla} S(\vec{x}, t)}} = \vec{\nabla} \int_0^t dt \left(\vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - \underset{\substack{\ll \\ E}}{H} \right) = \vec{\nabla} \int_0^{\vec{x}} d\vec{q} \cdot \vec{p} = \underline{\underline{\vec{p}}} \quad (3.38)$$

$$\Rightarrow \vec{p} = \vec{p}(\vec{x}, t) = \vec{\nabla} S(\vec{x}, t)$$

Vgl mit (3.36): $S(\vec{x}, t) = \mathcal{I}_0(\vec{x}) + f(t)$

aus (3.37): $S(\vec{x}, t) = \mathcal{I}_0(\vec{x}) - t \cdot E$ (3.39)

In der Tat ist (3.36) mit (3.39) die Hamilton-Jacobi Gleichung der klass. Mechanik

$$\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V(\vec{x}) = -\partial_t S \quad (3.40)$$

($\hat{=}$ Gleichg. zur Bestimmung derjenigen kanon. Trajs., die auf eine verschwindende Hamilton-Fkt. transformiert, so da β alle Koordinaten zyklisch werden).

In 1-D QM Systemen folgt also f $\ddot{u}$ r die Wellenfkt (3.32) in WKB-N $\ddot{a}$ herung:

$$\psi_{\text{WKB}}(\vec{x}) \sim e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int dx' p(x')} \quad , \quad p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (3.41)$$

$\Rightarrow V(\vec{x}) > E$: exp. ged $\ddot{a}$ mpft (vgl. Tunnel-Effekt)

$E > V(\vec{x})$: oszill. Propagation

Der Zwischenbereich $V(\vec{x}) \approx E$ ist wichtig f $\ddot{u}$ r die Anschlu β bedingungen, aber schwierig zu diskutieren, weil

hier die WKB-Bedingung nicht mehr erfüllt ist,
vgl. Standard-QM Literatur. Insbesondere folgt aus
den Anschlussbedingungen die semiklass. Quantisierungsregel $\oint dx p(x) = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2})$

Betrachten wir stattdessen das Pfadintegral.

Die WKB-Näherung ist verknüpft mit der Sattelpunkts-
Approximation (vgl. Kapitel 2.2 "Korrespondenz-Limes")
p. 22

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x_a, t_a}^{x_b, t_b} \mathcal{D}x \, e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right)} \quad (3.41)$$

In Sattelpunkts - (Stationäre Phasen) - Entwicklung dominieren
die Stationäre Pfade, d.h. Extrema der Wirkung,
d.h. die klass. Pfade mit

$$\delta S = 0, \quad (3.42)$$

$$\Rightarrow m \ddot{x} = -V'(x) \Big|_{x=x_0} \quad \hat{=} \text{klass. Pfad}$$

Es folgt die Energieerhaltung:

$$E = \frac{m}{2} \dot{x}_0^2 + V(x_0) = \text{const.} \quad (3.43)$$

Damit kann der klass. Impuls geschrieben werden als

$$p_0(t) \equiv m \dot{x}_0(t) \stackrel{(3.43)}{=} p(x_0(t)) \quad (3.44)$$

mit p identisch den obigen lokalen klass. Impuls.

Die Zeitabh. des klass. Pfades ist gegeben mit

$$t - t_a = \int_{x_a}^{x_b} dx \frac{m}{p(x)} = \int_{x_a}^{x_b} dx \frac{m}{\sqrt{2m(E - V(x))}} \quad (3.45)$$

Fassen wir nun Energie und Wirkung als Fkt. der Endpunkte und -zeiten auf, so gilt:

$$\underline{\underline{S(x_b, x_a; t_b - t_a)}} \equiv S[x_0 | (x_a, t_a) \rightarrow (x_b, t_b)]$$

zeittransl.
Invarianz

$$= \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{m}{2} \dot{x}_0^2 - V(x_0) \right)$$

$$= \int_{t_a}^{t_b} dt \left(p_0(t) \dot{x}_0 - H(p_0, x_0) \right)$$

$$= \int_{x_a}^{x_b} dx p(x) - (t_b - t_a) E(x_b, x_a; t_b - t_a)$$

$$\equiv \underset{\uparrow}{S_0(x_b, x_a; E)} - (t_b - t_a) E(x_b, x_a; t_b - t_a)$$

durch E-Abh. von
p(x)

$$\underline{\underline{\hspace{10em}}} \quad (3.46)$$

mit dem klass. Eikonal S_0 . Es läßt sich direkt verifizieren ([ÜA]), daß S und S_0 Legendre-Transformierte voneinander sind.

Berechnen wir nun die Fluktuation um den klass. Pfad : $x(t) = x_0(t) + \delta x(t)$

$$S[x] = S[x_0] + \int dt \frac{\delta S[x_0]}{\delta x(t)} \delta x(t) + \frac{1}{2} \int dt dt' \frac{\delta^2 S[x_0]}{\delta x(t) \delta x(t')} \delta x(t) \delta x(t') + \mathcal{O}((\delta x)^3)$$

(3.47)

Da alle Koeffizienten bei $x_0(t)$, dem klass. Pfad, ausgewertet werden, gilt $\frac{\delta S[x_0]}{\delta x(t)} = 0$. Die quadratische Ordnung lautet.

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int dt dt' \delta x(t) \frac{\delta^2 S}{\delta x(t) \delta x(t')} [x_0] \delta x(t') &= \int dt \left[\frac{m}{2} (\dot{\delta x})^2 - \frac{1}{2} V''(x_0) (\delta x)^2 \right] \\ &\equiv \int dt \delta x(t) \left(\frac{m}{2} (-\partial_t^2) - \frac{1}{2} V''(x_0) \right) \delta x(t), \quad (3.48) \end{aligned}$$

In erster nicht-triviale Näherung vernachlässigen wir Terme der Ordnung $(\delta x)^3$. Damit wird die Wirkung quadratisch und das Problem entspricht dem eines harmonischen Oszillators mit zeitabh. Frequenz

$$\omega^2(t) = \frac{1}{m} V''(x_0(t)). \quad (3.49)$$

Dieses Problem haben wir bereits gelöst, vgl.
z.B. Glm (2.108) & (2.111). Das Ergebnis ist
gegeben durch die ~~Phase~~ Phase mit klass.
Wirkung und den Vorfaktor mit Fluktuationsde-
terminanten:

$$G_{SC}(x_b, t_b | x_a, t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}} \left(\frac{\det S^{(2)}}{\det S_{FT}^{(2)}} \right)^{-1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S(x_b, x_a; t_b - t_a)} \quad (3.50)$$

↑
semi-classical

$$\begin{aligned} \text{mit } \frac{\det S^{(2)}}{\det S_{FT}^{(2)}} &= \frac{\det \left(\frac{m}{2} (-\partial_t^2) - V''(x_0(t)) \right)}{\det (m (-\partial_t^2))} \\ &\stackrel{(3.49)}{=} \frac{\det (-\partial_t^2 - \omega^2(t))}{\det (-\partial_t^2)} \quad (3.51) \end{aligned}$$

Dieses Det.-Verhältnis kann leicht mit dem

Gelfand-Yaglom Formalismus gelöst werden:

$$\left(\frac{\det S^{(2)}}{\det S_{FT}^{(2)}} \right)^{-1/2} = \left(\frac{(t_b - t_a)}{D(t_b, t_a)} \right)^{1/2} \quad (3.52)$$

mit der GY Funktion $D(t, t_a)$ (vgl. 2.55).

Zu vorgegebener klassischer Wirkung S stellt also (3.50-52) die Lösung des QM Propagators in semiklass. Approximation dar ($\sim$ WKB). Mit Hilfe der Feynman-Vac Formel (und deren Verallgemeinerungen) läßt sich daraus Information z.B. über die stationären Energieniveaus gewinnen.

Jedoch auch ohne die Wirkung $S = \int \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right)$ näher zu spezifizieren, lassen sich allgemeine Aussagen aus (3.50) ableiten.

Dazu leiten wir eine alternative Darstellung der GY Determinante ab. Bisher wissen wir, daß gilt:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2(t) \right) D(t, t_a) = 0, \quad D(t, t_a) = 0, \quad \dot{D}(t, t_a) = 1$$

$$\text{mit } \omega^2(t) = \frac{1}{m} V''(x). \quad (3.53)$$

Diese Formulierung als Anfangswertproblem spiegelt das Anfangswertproblem der klassischen Bewegung wieder: der klass. Pfad ist spezifiziert durch $x(t_a) = x_a$ und $\frac{d}{dt} x(t_a) = \dot{x}_a$. Zu vorgegebenen Werten x_a und $\dot{x}_a$ gibt es genau einen klass. Pfad, der sich schreiben läßt als

$$X(x_a, \dot{x}_a; t) = f_1(t) x_a + f_2(t) \dot{x}_a, \quad (3.54)$$

und die DGL $(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2(t)) X(x_a, \dot{x}_a; t) = 0$ erfüllt. Die Bedingungen implizieren z.B., daß

$$f_2(t_a) = 0, \quad f_2'(t_a) = 1$$

(und $f_1(t_a) = 1, f_1'(t_a) = 0$) und das $f_{1,2}$ beide die DGL erfüllen. Vergleich mit (3.53) ergibt insbesondere:

$$f_2(t) \equiv \mathcal{D}(t, t_a) \quad (3.55)$$

Woraus folgt:

$$\mathcal{D}(t, t_a) = \frac{\partial X(x_a, \dot{x}_a; t)}{\partial \dot{x}_a} \quad (3.56)$$

Für die Determinante folgt speziell:

$$\mathcal{D}(t_b, t_a) = \frac{\partial x_b}{\partial \dot{x}_a} \quad (3.57)$$

mit dem Endpunkt $x_b \equiv X(x_a, \dot{x}_a; t_b)$.

Gl. (3.57) macht bereits deutlich, daß die

105

Determinante, d.h. das Ergebnis von QM Fluktuationen
 bereits vollständig durch die klassische Trajektorie
 bestimmt ist! ("klass. Bew. enthält schon viel
 QM Information.")

Alternativ zum Anfangswertproblem können wir
 nun den klass. Pfad auch als Randwertproblem
 auffassen. Implizites invertieren von
 $x_b = x(x_a, \dot{x}_a; t_b)$ liefert

$$\dot{x}_a = \dot{x}_a(x_a, x_b; t_a, t_b), \quad (3.58)$$

d.h. bei vorgeg. Anfangs- und Endpunkten liegt
 die klass. Trajektorie (in der Regel) fest. Die
 Determinante wird dann bestimmt durch

$$D(t_b, t_a) = \left(\frac{\partial \dot{x}_a(x_a, x_b)}{\partial x_b} \right)^{-1}. \quad (3.59)$$

Nun verwenden wir $\dot{x}_a(x_a, x_b) = \frac{1}{m} p_a(x_a, x_b) = -\frac{1}{m} \frac{\partial S(x_b, x_a; t_b, t_a)}{\partial x_a}$,

(vgl. (3.38), wobei das Minuszeichen daher rührt,
 daß wir nach dem Anfangspunkt variiert haben.)

Es folgt:

$$D(t_b, t_a) = -m \left(\frac{\partial^2 S(x_b, x_a; t_b, t_a)}{\partial x_a \partial x_b} \right)^{-1} \quad (3.60)$$

$\Rightarrow$ Die Fluktationsdeterminante ist also durch die Variation der klass. Wirkung bezüglich Anfangs- und Endpunkt des klass. Pfades gegeben! (Van-Vleck - Pauli - Dirac-Morette Determinante)

Im Hinblick auf den Feynman-Kac Formalismus ist für uns das Integral

$$Z(t_b - t_a) = \int dx_a G_{sc}(x_a, t_b; x_a, t_a) \quad (3.61)$$

$\uparrow \quad \uparrow$
 ko-zidenz times

von Interesse (dieses entspricht in der Tat der QM Zustandssumme):

$$Z(t_b - t_a) = \int dx_a \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar}} \left(-m^{-1} \frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b} \right)^{+1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S(x_b, x_a)} \Big|_{x_b=x_a} \quad (3.62)$$

$$\text{klass. Pfad } x_0(t) = \int dx_a \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \left(-\frac{1}{\dot{x}_0(t_b)} \frac{1}{\dot{x}_0(t_a)} \frac{\partial^2 S}{\partial t_a \partial t_b} \right)^{+1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S(x_b, x_a)} \Big|_{x_b=x_a}$$

$$S = \text{funkt.}(t_b - t_a) = \int dx_a \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \frac{1}{\dot{x}_a} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial t_b^2} \right)^{+1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S(x_b, x_a)} \Big|_{x_b=x_a} \quad (3.63)$$

$\dot{x}_a \rightarrow \dot{x}_0(t_a)$

Nun gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_a} S(x_a, x_a) &= \left. \frac{\partial}{\partial x_b} S(x_b, x_c) \right|_{x_b=x_a} + \left. \frac{\partial}{\partial x_a} S(x_b, x_a) \right|_{x_b=x_a} \\ &= p_b \Big|_{b=a} - p_a \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \quad (3.64)$$

↑ Pfad soll S stationär belassen.

$\Rightarrow$ da die klass. Pfade die Bewegungsgl. erfüllen, sind auch die Impulse im Koinzidenzlimites $b \rightarrow a$ stetig $\Rightarrow$ periodische Pfade

$\Rightarrow S$ ist unabh. von x_a

$$\Rightarrow \int dx_a \frac{1}{\dot{x}_a} = \int_{t_a}^{t_b} dt = (t_b - t_a)$$

$$\Rightarrow Z(t_b - t_a) = \frac{(t_b - t_a)}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial t_a^2} \right)^{+1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S} \quad (3.65)$$

Folgende Subtilität ist wichtig:

Betrachten wir das Beispiel des harmonischen Oszillators:

Hier ist

$$D(t_b, t_a) \stackrel{(2.59)}{=} \frac{\sin \omega (t_b - t_a)}{\omega} \quad (3.66)$$

Nun ist $D(t_b - t_a = \frac{n\pi}{\omega}) = 0$ und D hat dort einen Vorzeichenwechsel. Da D eine Determinante entspricht,

bedeutet dies, das bei $t_b - t_a = \frac{n\pi}{\omega}$ jeweils ein Eigenwert des Fluktuationsoperators $= 0$ wird und von Positiven zum Negativen wechselt. Da $\mathcal{D}$ unter der Wurzel steht, muß man die genaue Phasenkonvention beachten. Diese wird durch die Fresnel-Integralformel bestimmt.

(vgl. p. 12). Für den HO ist das Ergebnis

$$\left(-\frac{t_b - t_a}{D(t_b, t_a)} \right)^{1/2} = \left(\left| \frac{\omega(t_b - t_a)}{\sin \omega(t_b - t_a)} \right| \right)^{1/2} e^{-in\frac{\pi}{2}} \quad (3.67)$$

wobei n die Zahl die Zahl der sog. konjugierten Punkte t zählt, an denen

$\mathcal{D}(t, t_a)$ verschwindet. n heißt auch

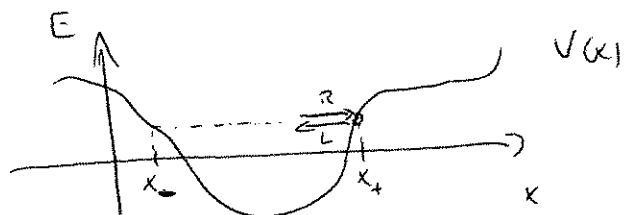
Maslov - Morse Index einer Trajektorie.

Die Punkte (i. A. Flächen im Mehrdimensionalen) an denen $\mathcal{D}$ verschwindet heißen auch Kaustiken.

Gl. (3.67) gilt natürlich auch direkt verallgemeinert für allgemeinere Systeme:

$$\left(\frac{t_b - t_a}{\mathcal{D}(t_b, t_a)} \right)^{1/2} = \left| \frac{t_b - t_a}{\mathcal{D}(t_b, t_a)} \right|^{1/2} e^{-in\frac{\pi}{2}}, \quad (3.68)$$

Betrachten wir allgem. eine Bewegung im Potential bei fester Energie: an einem klassischen Umkehrpunkt wechselt der klassische Impuls sein Vorzeichen:



$$p_{R,L} = \pm \sqrt{2m(E - V(x))}$$

Am Umkehrpunkt entwickelt die Ableitung des Impulses eine Singularität, d.h.

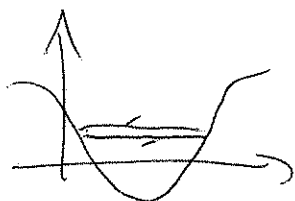
$$\frac{\partial p_b}{\partial x_a} = \frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b} \rightarrow \infty$$

Für $x_b \rightarrow$ Umkehrpunkt x_+ . Da $D(t_b, t_a) \sim \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b} \right)^{-1}$

entsprechen die klassischen Umkehrpunkte den Kaustiken.

Im Vorliegenden Fall haben wir es mit geschlossenen klass. Pfaden (periodischen Orbits) zu tun.

Der minimale periodische Orbit hat 2 Umkehrpunkte



$$\Rightarrow Z_{\min}(t_b - t_a) \stackrel{(3.65)}{=} \frac{(t_b - t_a)}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \left| \frac{\partial^2 S}{\partial t_b^2} \right|^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S - i\pi} \quad (3.68)$$

$\uparrow$
 $n=2$

Im Hinblick auf den Feynman - Kac Formalismus ist die Fourier - Transformierte von (3.69) von Interesse, da in dieser gebundene Zustände als Pole identifiziert werden können:

$$Z_{\min}(E) = \int_{t_a}^{\infty} dt_b e^{\frac{i}{\hbar} E(t_b - t_a)} Z_{\min}^{(t_b - t_a)} \quad (3.70)$$

↑
kausal

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \int_{t_a}^{\infty} dt_b (t_b - t_a) \left| \frac{\partial^2 S}{\partial t_b^2} \right| e^{\frac{i}{\hbar} S(t_b - t_a) + \frac{i}{\hbar} (t_b - t_a) E - i\pi}$$

Auch dieses Integral lösen wir im Sattelpunktsnäherung: zu gegebenem E gibt es einen Wert $t_b - t_a$, der den Exponenten $S_{\text{ext}} + (t_b - t_a) E$ extremal macht, d.h.

$$-\frac{d}{dt_b} S(t_b, t_a) \Big|_{t_b - t_a = t} = E = 0 \quad \text{für den Extremal-}$$

wert $t = t(E)$. Entwicklung des Exponenten um t liefert: $(t_b - t_a = t + \delta t)$

$$S(t_b - t_a) + (t_b - t_a) E = S(t) + tE + \underbrace{\left(\frac{d}{dt} S(t) + E \right)}_{=0} \delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 S(t)}{dt^2} \delta t^2 + \dots$$

Es ergibt sich ein Fresnel - Integral mit dem Resultat

$$Z_{\min}(E) = \underline{\underline{t(E) e^{\frac{i}{\hbar} (S(t) + tE) - i\pi}}} \quad (3.71)$$

Der Fluktuations-Faktor $|\partial^2 S / \partial t_0^2|$ kürzt sich genau weg.

Der Exponent enthält genau das Eichonal

$$\mathcal{Y}(E) = S(t) + t E \quad \text{mit } t=t(E) \quad (3.72)$$

Schließlich existieren auch noch die periodischen Orbits höherer Ordnung mit $2m$ Umkehrpunkten und n -facher klass. Winkung (aber fester Energie)

$$\begin{aligned} \Rightarrow \underline{\underline{Z(E)}} &= \sum_{n=1}^{\infty} t(E) e^{\frac{i m}{\hbar} (\mathcal{Y}(E)) - i m \pi} \\ &= t(E) \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{Y}(E) - i \pi}}{1 - e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{Y}(E) - i \pi}} = -t(E) \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{Y}(E)}}{1 + e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{Y}(E)}} \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck hat Pole bei (3.73)

$$\mathcal{Y}(E) = \underline{\underline{2\pi\hbar(n + \frac{1}{2})}}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$\underline{\underline{\oint dx \, p(x)}} = 2 \int_{x_-}^{x_+} dx \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (3.74)$$

welche Bindungszuständen entsprechen.

Damit haben wir aus dem Pfadintegral die semiklassische Bohr-Sommerfeld Quantisierungsregel abgeleitet.

Insbesondere hat die AM Grundzustands-
energie $E_0 = \frac{1}{2} h \omega$ eine geometrische
Bedeutung bekommen: sie ist über den
Maslov-Morse Index direkt mit der Zahl
der klass. Umkehrpunkte des niedrigsten
Periodischen Orbits verknüpft!

Die semi-klassische Approximation ist in gewissem Sinne komplementär zur Störungstheorie. Dazu untersuchen wir nun beispielhaft die λ -Abhängigkeit des Propagators vom Parameter λ , nach dem in Störungstheorie entwickelt würde.

Paradebeispiel ist der Anharmonische Oszillator:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{x}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 x^2 - \frac{1}{4} \lambda x^4. \quad (m=1) \quad (3.75)$$

Die Energie-Niveaus im WKB Näherung könnten nun gleich mit (3.74) berechnet werden.

Betrachten wir aber den Propagator und hier lediglich die Phase, welche durch die klassische Wirkung gegeben ist. Für einen klass. Pfad von

$(x_a, 0) \rightarrow (x, t)$ gilt für die Wirkung die

Hamilton-Jacobi-Gleichung (3.40):

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 + \frac{1}{4} \lambda x^4 + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (3.76)$$

Für klass. Pfade gilt: $\frac{\partial S}{\partial t} = -E$ (Energie) (3.77)

Die konst. Energie bestimmt sich zu

$$E = \frac{1}{2} \dot{x}^2 + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 + \frac{1}{4} \lambda x^4 \quad \equiv \quad \frac{1}{2} \dot{x}^2 + V(x) \quad (3.78)$$

Ein klass. Pfad hat einen Punkt maximale Ausdehnung vom Ursprung $x^2 = L^2$ an dem $\dot{x}^2 = 0$

$$\Rightarrow E = \frac{1}{2} \omega^2 L^2 + \frac{1}{4} \lambda L^4 \quad (3.79)$$

Nun müssen wir E durch die Anfangs- und Endwerte $(x_a, 0)$ und $(x_b = x(T), T)$ ausdrücken. Dazu integrieren wir (3.78):

$$T = \int_{x_a}^{x_b} dx \left(2(E - V(x)) \right)^{-1/2}. \quad (3.80)$$

Falls der Pfad mehrmals die Punkte $x = \pm L$ passiert, gilt:

$$T = 2n \int_0^L dx \left(2(E - V) \right)^{-1/2} \quad (3.81)$$

↑
Zahl der "repeats"

Für die Zustandssumme (Prop. im Vornäherungs-Limes) ist der Limes $x_a = x_b$ von Interesse.

Mit (3.79) und $u = \frac{x}{L}$ gilt:

$$T = \frac{2m}{L\sqrt{\frac{\lambda}{2}}} \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{1-u^4 + \left(\frac{2\omega^2}{\lambda L^2}\right)(1-u^2)}} = T(L) \quad (3.82)$$

Implizite Inversion ergibt $L = L(T)$ (hat i. d. mehrere / viele Lösungen).

Die Wirkung folgt aus (3.76) (Hamilton-Jacobi):

$$S = 2m L^3 \sqrt{\frac{\lambda}{2}} \int_0^1 du \sqrt{1-u^4 + \left(\frac{2\omega^2}{\lambda L^2}\right)(1-u^2)} - T(L) \cdot E \quad (3.83)$$

Diese elliptischen Integrale lassen sich geschlossen lösen. Von besonderem Interesse sei hier jedoch lediglich der Beitrag großer Pfade, die die Anharmonizität besonders spüren; für diese gilt:

$$\frac{1}{4}\lambda L^4 \gg \frac{1}{2}\omega^2 L^2 \Rightarrow \frac{2\omega^2}{\lambda L^2} \ll 1 \quad (3.84)$$

In dieser Näherung gilt

$$S = 2m L^3 \sqrt{\frac{\lambda}{2}} \cdot C_1, \quad C_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{8} \frac{\Gamma(1/4)}{\Gamma(7/4)} - \frac{C_2}{2} \quad (3.85)$$

$$T = \frac{2m}{L\sqrt{\frac{\lambda}{2}}} \int_0^1 \frac{du}{\sqrt{1-u^4}} = \frac{2m}{L\sqrt{\frac{\lambda}{2}}} C_2, \quad C_2 = \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(5/4)}{\Gamma(3/4)}$$

$$\Rightarrow L = \frac{2m}{T\sqrt{\frac{\lambda}{2}}} C_2$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{S = c_3 \frac{m^4}{T^3 \lambda}}}, \quad c_3 = 32 c_1 c_2^3 \quad (3.86)$$

Dies zeigt, daß $S \sim \frac{1}{\lambda}$ so daß

der Propagator eine wesentliche Singularität
in λ enthält vom Typ $e^{i \frac{\text{const}}{\lambda}}$,

d.h. eine Struktur, die zu keiner Ordnung
in Störungstheorie sichtbar ist.