

Untersuchung der Eigenschaften
spezieller Ljapunov–Funktionen in
der Umgebung von Instabilitäten
in Nichtgleichgewichtssystemen

Diplomarbeit von
Axel Pelster

Hauptberichter: Dr. habil. A. Wunderlin

Mitberichter: Prof. Dr. M. Wagner

Institut für Theoretische Physik
und Synergetik
Universität Stuttgart
Juni 1992

Inhaltsverzeichnis

1	Die Einleitung	4
2	Das Konzept der Ljapunov–Funktionen	7
2.1	Die Motivation	7
2.2	Die Einführung der Ljapunov–Funktion	7
2.3	Grundlegende Beispiele	9
2.4	Nichtgleichgewichtspotentiale	11
3	Die Methode der Pfadintegrale	13
3.1	Die Motivation	13
3.2	Die Herleitung des Pfadintegrals	14
3.2.1	Das Schrödingersche Anfangswertproblem	14
3.2.2	Die Definition der Ortsdarstellung	15
3.2.3	Der Übergang zur Ortsdarstellung	16
3.2.4	Die Eigenschaften des Propagators	17
3.2.5	Der Langzeit- und der Kurzzeitpropagator	20
3.2.6	Der Satz über Kurzzeitpropagatoren	21
3.2.7	Die Berechnung des Kurzzeitpropagators	22
3.2.8	Das Hamiltonsche Pfadintegral	23
3.2.9	Das Langrangesche Pfadintegral	23
3.2.10	Die Verbindungen zur klassischen Mechanik	24
3.3	Die Herleitung der Schrödinger–Gleichung aus dem Lagrangeschen Pfadintegral	26
3.3.1	Die Langzeit- und die Kurzzeitentwicklung	26
3.3.2	Die Entwicklung nach ϵ	27
3.4	Der harmonische Oszillator mit Zentrifugalbarriere	28
3.4.1	Die Lösung des Newtonschen Anfangswertproblems	29
3.4.2	Die Dirichlet–Propagatoren	30
3.4.3	Das Spiegelungsprinzip	31
3.4.4	Die Anwendung des Spiegelungsprinzips	31
3.4.5	Die Anwendung des Satzes über Kurzzeitpropagatoren	32

3.4.6	Der Dirichlet–Langzeitpropagator	33
3.4.7	Die Diskussion des Dirichlet–Langzeitpropagators	36
3.4.8	Die Energieeigenwerte	37
3.4.9	Die Energieeigenfunktionen	38
4	Der Propagator der Fokker–Planck–Gleichung	40
4.1	Die Motivation	40
4.2	Das Fokker–Planck–Anfangs- und Randwertproblem	40
4.3	Der Zusammenhang zwischen Langevin– und Fokker–Planck–Gleichung . .	43
4.4	Die Transformation einer Fokker–Planck–Gleichung für multiplikatives Rauschen in eine für additives Rauschen	46
4.5	Die Transformation einer Fokker–Planck–Gleichung für additives Rauschen in eine Schrödinger–Gleichung	48
4.6	Die Lösungsstrategie für Fokker–Planck–Gleichungen auf der Beschreibungsebene der Propagatoren	52
4.7	Ein nichttriviales Beispiel	53
5	Verallgemeinerung der Duru–Kleinert–Propagatortransformationen	57
5.1	Die Motivation	57
5.2	Die Transformation der Zeitkoordinate	58
5.2.1	Die Erweiterung des Hilbertraumes	58
5.2.2	Der kausale Propagator	59
5.2.3	Die Konsequenzen für den kausalen Propagator	60
5.2.4	Die Bedeutung der Erweiterung des Hilbertraumes	61
5.2.5	Die Pfadintegraldarstellung des neuen kausalen Propagators	62
5.2.6	Die Vereinfachung	64
5.3	Die Transformation der Ortskoordinate	65
5.3.1	Die Konsequenzen für den kausalen Propagator	65
5.3.2	Die Entwicklung des Kurzzeitpropagators	66
5.3.3	Die erste Bedingung	67
5.4	Die Transformation der Wellenfunktion	68
5.4.1	Die Einführung einer neuen Funktion	68
5.4.2	Die Berechnung des Kurzzeitpropagators	69
5.4.3	Die Bestimmung der partiellen Differentialgleichung	70
5.4.4	Die zweite Bedingung	71
5.4.5	Die Transformationsformel für Propagatoren	72
5.5	Die Transformation der entsprechenden partiellen Differentialgleichung . . .	74
5.5.1	Die Bewegungsgleichung	74
5.5.2	Die Transformation der Zeitkoordinate	74
5.5.3	Die Transformation der Ortskoordinate	75

5.5.4	Die Transformation der Wellenfunktion	76
5.6	Die Spezialfälle	76
5.6.1	Die Propagatortransformation von Duru und Kleinert	77
5.6.2	Die Transformation auf das freie Teilchen	78
5.6.3	Der harmonische Oszillator	79
6	Der Fall des Morse–Potentials	83
6.1	Die Motivation	83
6.2	Die zeitunabhängige Schrödinger–Gleichung	85
6.3	Die diskreten Spektraldaten	86
6.4	Die kontinuierlichen Spektraldaten	87
6.5	Die Resolvente	88
6.6	Die Energieeigenwerte	91
6.7	Die diskreten Energieeigenfunktionen	92
6.8	Die kontinuierlichen Energieeigenfunktionen	94
7	Das Brand–Schenzle–Modell	96
7.1	Die Motivation	96
7.2	Die Transformation auf das Morse–Potential	96
7.3	Der stochastische Prozeß mit rein additivem Rauschen	97
7.4	Der stochastische Prozeß mit rein multiplikativem Rauschen	98
7.5	Der Vergleich	100
7.6	Die Nichtgleichgewichtspotentiale	101
	Danksagung	103
	A Integraldarstellung der Delta–Funktion	105
	B Integraldarstellung der modifizierten Besselfunktion erster Gattung	107
	Abbildungsverzeichnis	110

Kapitel 1

Die Einleitung

Die von Hermann Haken im Jahre 1969 begründete **Synergetik** [31, 44] beschäftigt sich als interdisziplinäre Wissenschaft mit Systemen der unbelebten und belebten Natur, die aus vielen nichtlinear miteinander wechselwirkenden Untersystemen aufgebaut sind. Unabhängig von der konkreten Realisierung besitzen solche Systeme fern vom thermodynamischen Gleichgewicht die Fähigkeit, auf makroskopischen Skalen in Raum und Zeit spontan geordnete Strukturen auszubilden.

Diese Phänomene der Selbstorganisation beruhen ursächlich darauf, daß eine **interne Zeitskalenhierarchie** zu einer **zirkulären Kausalkette** [52, S. 56] führt, sofern die **Kontrollparameter**, die die Offenheit des Systems gegenüber der Umgebung quantitativ beschreiben, kritische Werte annehmen. Nach dem **Versklavungsprinzip** der Synergetik folgen die vielen schnell relaxierenden Moden des Systems instantan den wenigen langsam veränderlichen Moden, die daher als **Ordnungsparameter** bezeichnet werden. Umgekehrt bewirken die nichtlinearen Wechselwirkungen zwischen den Untersystemen, daß die Dynamik der Ordnungsparameter durch die schnell relaxierenden Moden beeinflusst wird. Aus dieser zirkulären Kausalkette ergibt sich so eine vereinfachte, komprimierte Systembeschreibung, da sich die vielen mikroskopischen Grundgleichungen in der Umgebung der kritischen Werte der Kontrollparameter auf wenige makroskopische **Ordnungsparametergleichungen** reduzieren lassen. Deren Diskussion erlaubt es schließlich, die Emergenz spontaner, makroskopischer Ordnungszustände als **Nichtgleichgewichtsphasenübergänge** im physikalischen Sinne zu verstehen.

In der Synergetik beginnt die detaillierte Analyse eines vorgegebenen Systems mit der **Identifikation der Ordnungsparameter**. Die konventionelle Vorgehensweise bedient sich hierzu der **linearen Stabilitätsanalyse eines Attraktors**, die auf das Eigenwertproblem einer Matrix führt. Während die Eigenvektoren die einzelnen kollektiven Moden des Systems ergeben, erlaubt die Diskussion der Eigenwerte in Abhängigkeit der Kontrollparameter, eine Zeitskalenhierarchie festzustellen und eine Aufspaltung der Moden in schnell relaxierende und langsam veränderliche vorzunehmen. Da aber bei einer solchen Stabilitätsanalyse lediglich die Umgebung des betrachteten Attraktors berücksichtigt wird, bleibt diese Vorgehensweise von rein **lokaler** Natur.

Hier knüpft die Idee der vorliegenden Diplomarbeit an, einen allgemeineren, **globaleren** Zugang zur Stabilitätsanalyse von Attraktoren in der Synergetik vorzubereiten. Dazu sollen die **Ljapunov-Funktionen** verwendet werden, die erstmals in der mathematischen Theorie dynamischer Systeme entdeckt wurden und eine naheliegende Verallgemeinerung des gewöhnlichen Potentialbegriffes darstellen.

Der erste Schritt zur Realisierung dieser Idee besteht darin, Methoden zur Berechnung von Ljapunov-Funktionen zu entwickeln und sie für sich anschließende, weitergehende Untersuchungen bereitzustellen. Da sich allein schon dieser eine Teilaspekt als äußerst umfangreich und schwierig erweist, beschränkt sich die vorliegende Diplomarbeit darauf, hierzu geeignete mathematische Hilfsmittel detailliert auszuarbeiten.

Im zweiten Kapitel wird für Attraktoren deterministischer, gewöhnlicher Differentialgleichungssysteme eine spezielle Klasse von Ljapunov-Funktionen eingeführt, die als **Nichtgleichgewichtspotentiale** bezeichnet werden. Eine prinzipielle Möglichkeit für deren Berechnung besteht darin, das ursprünglich rein deterministische System zu einem stochastischen zu erweitern, den dazugehörigen **stochastischen Propagator** zu bestimmen und anschließend Grenzwertprozesse an diesem vorzunehmen. Deshalb beinhalten die folgenden Kapitel verschiedene Lösungsstrategien, wie solche stochastischen Propagatoren zu gewinnen sind.

Hierbei beschränkt sich die vorliegende Arbeit darauf, **eindimensionale** Problemstellungen zu behandeln, da dann die stochastischen und die einfacher handhabbaren quantenmechanischen Systeme mathematisch zueinander äquivalent sind. In Kapitel 4 ermöglicht dies durch eine geschickte Transformation der Zeit, der Zufallsvariablen und der Verbundwahrscheinlichkeitsdichte, die Berechnung von stochastischen Propagatoren auf die Bestimmung **quantenmechanischer Propagatoren** zurückzuführen.

Quantenmechanische Propagatoren lassen sich wiederum mit Hilfe zweier unterschiedlicher Methoden berechnen. Hierzu werden in Kapitel 3 ausführlich die **Pfadintegrale** vorgestellt, bei denen sich ein quantenmechanischer Propagator durch Integration über alle möglichen Wege im zugrunde liegenden Funktionenraum ergibt. Eine zweite, dazu alternative Methode wird in Kapitel 5 behandelt. Dort wird eine allgemeine **Abbildung** zwischen zwei quantenmechanischen Propagatoren konstruiert, indem drei Transformationen geschickt hintereinander ausgeführt werden, die die Zeitkoordinate, die Ortskoordinate sowie die Wellenfunktion involvieren.

Die Nützlichkeit der erwähnten Lösungsstrategien wird an Hand von Beispielen dargestellt, die in Abb. 1.1 zu einem **viereckigen Schema** zusammengefaßt sind. Hierbei handelt es sich um zwei stochastische und zwei quantenmechanische Systeme, die gewöhnlich nur isoliert voneinander betrachtet werden. Auf der globalen Beschreibungsebene von Propagatoren lassen sie sich jedoch durch Transformationen ineinander abbilden.

Der in Abb. 1.1 illustrierte Zusammenhang beginnt in der vorliegenden Diplomarbeit bei dem harmonischen Oszillator mit Zentrifugalbarriere. Dessen Dirichlet–Propagator wird in Kapitel 3 bereitgestellt, indem die Methode der Pfadintegrale angewendet wird. Dieser Dirichlet–Propagator wird dann in Kapitel 4 in den Propagator des stochastischen Systems mit dem x^2 –Rauschen abgebildet. In den Kapiteln 6 und 7 dagegen läßt sich dieser Dirichlet–Propagator über das Morse–Potential in den stochastischen Propagator zum x –Rauschen überführen. Damit ist es mathematisch gelungen, zwei stochastische, gewöhnliche Differentialgleichungen, die im Rahmen der Synergetik als Ordnungsparametergleichungen anzusehen sind, mit Hilfe quantenmechanischer Systeme ineinander zu überführen. Ob es auch möglich ist, eine direkte Verbindung zwischen beiden herstellen zu können, bleibt dabei offen (vgl. das Fragezeichen in Abb. 1.1).

Am Ende des 7. Kapitels schließt sich dann die Argumationskette, da dort zwei Nichtgleichgewichtspotentiale für das deterministische System $\dot{x} = a \cdot x - b \cdot x^3$ aus den stochastischen Propagatoren zum x^2 –Rauschen beziehungsweise zum x –Rauschen abgeleitet werden. Dies zeigt beispielhaft, daß es zu einem System unterschiedliche Ljapunov–Funktionen geben kann.

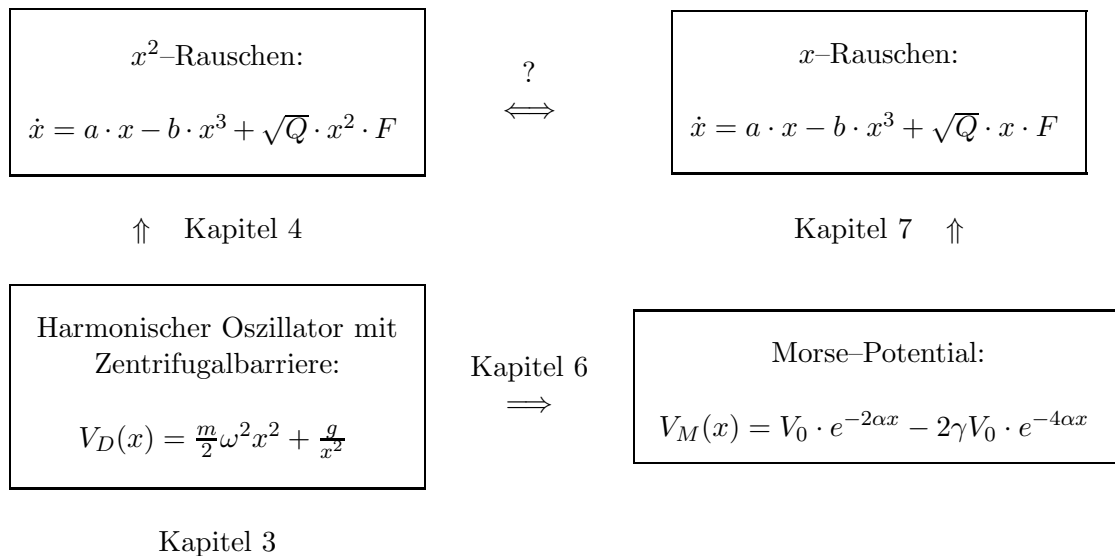


Abbildung 1.1: Viereckiges Schema von zwei stochastischen und zwei quantenmechanischen Systemen, die sich auf der globalen Beschreibungsebene von Propagatoren durch Transformationen ineinander überführen lassen

Kapitel 2

Das Konzept der Ljapunov–Funktionen

2.1 Die Motivation

Während die lineare Stabilitätsanalyse nur eine lokale Untersuchung von Attraktoren dynamischer Systeme ermöglicht, stellt das Konzept der Ljapunov–Funktionen einen globaleren Zugang dar. Deshalb werden die Ljapunov–Funktionen zunächst am Beispiel der einfachsten Attraktoren, den Gleichgewichtslagen, eingeführt und durch grundlegende physikalische Beispiele illustriert. Dann wird mit den Nichtgleichgewichtspotentialen eine allgemeine Klasse von Ljapunov–Funktionen deterministischer Systeme betrachtet, deren Berechnung sich auf die Bestimmung stochastischer Propagatoren zurückführen läßt.

2.2 Die Einführung der Ljapunov–Funktion

Ursprünglich wurde das Konzept der Ljapunov–Funktionen in der **mathematischen Theorie dynamischer Systeme** entwickelt, um strenge Aussagen über das Stabilitätsverhalten solcher Systeme zu gewinnen [10]. Insbesondere erwies es sich als notwendig, eine präzise Übereinkunft darüber zu treffen, was man eigentlich unter Stabilität zu verstehen hat. Deshalb wird im folgenden zunächst die einfachst mögliche **Stabilitätsdefinition im Sinne von Ljapunov** vorgestellt.

Hierzu sei ein System vorgegeben, das durch einen Satz von n autonomen gewöhnlichen Differentialgleichungen beschrieben wird:

$$\dot{\vec{x}}(t) = \vec{N}(\vec{x}(t)). \quad (2.1)$$

$\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)$ bezeichnet man als den Zustandsvektor des Systems, da seine Komponenten x_m für $m = 1, \dots, n$ die einzelnen Variablen des Systems festlegen. \vec{N} repräsentiert ein im allgemeinen nichtlineares Vektorfeld.

Bei einem derartigen System interessiert man sich für die Stabilität von Attraktoren wie zum Beispiel den Gleichgewichtslagen, den Grenzzyklen oder den chaotischen Attraktoren.

Da aber solche Attraktoren spezielle Trajektorien darstellen, wird man schließlich auf die allgemeinere Fragestellung geführt, wann überhaupt Trajektorien als stabil zu betrachten sind. Eine intuitive Vorstellung geht davon aus, daß man hierzu eine kleine Störung auf das System einwirken läßt, so daß das System statt durch die ursprünglich betrachtete Trajektorie durch eine andere beschrieben wird. Die ursprüngliche Trajektorie heißt dann stabil, wenn sie durch die Einwirkung dieser kleinen Störung für alle Zeiten nur auf eine nah benachbarte Trajektorie treibt. Diese intuitive Vorstellung kann folgendermaßen mathematisch präzisiert werden [11, S. 118]:

Stabilitätsdefinition im Sinne von Ljapunov:

Es seien $\vec{x}(t)$ und $\vec{x}'(t)$ zwei Lösungen des gewöhnlichen Differentialgleichungssystems (2.1). Dann heißt die Lösung $\vec{x}(t)$ **stabil**, wenn es zu jedem $\epsilon > 0$ ein $\delta = \delta(\epsilon) > 0$ gibt, so daß gilt

$$|\vec{x}(0) - \vec{x}'(0)| < \delta \quad \implies \quad |\vec{x}(t) - \vec{x}'(t)| < \epsilon \quad \text{für alle } t \geq 0. \quad (2.2)$$

Ferner heißt die Lösung $\vec{x}(t)$ **asymptotisch stabil**, wenn zusätzlich noch der Grenzwert

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |\vec{x}(t) - \vec{x}'(t)| = 0 \quad (2.3)$$

gegeben ist.

In einem zweiten Schritt ist nun ein möglichst effizientes Verfahren gesucht, mit dessen Hilfe man die Stabilitätseigenschaften von Trajektorien ermitteln kann. Der Einfachheit halber werden hierzu beispielhaft nur die Gleichgewichtslagen \vec{x}_0 von (2.1) betrachtet, die durch

$$\vec{N}(\vec{x}_0) = \vec{0} \quad (2.4)$$

definiert sind.

In dem Spezialfall, daß es sich bei dem nichtlinearen Vektorfeld $\vec{N}(\vec{x})$ um das negative Gradientenfeld eines **Potentiales** $V(\vec{x})$ gemäß

$$\vec{N}(\vec{x}) = -\frac{\partial}{\partial \vec{x}} V(\vec{x}) \quad (2.5)$$

handelt, gewinnt man die Stabilität der Gleichgewichtslagen unmittelbar durch eine Diskussion des Potentials $V(\vec{x})$. Wegen (2.5) kann man nämlich die Dynamik (2.1) als die überdämpfte Bewegung eines fiktiven Teilchens mit der Koordinate \vec{x} im Potential $V(\vec{x})$ auffassen. In diesem Bild repräsentieren dann die Minima des Potentials $V(\vec{x})$ die stabilen Gleichgewichtslagen und die Maxima die instabilen.

Im allgemeinen Fall, in dem (2.5) nicht gelten muß, bietet es sich für die Stabilitätsuntersuchung der einfachen Gleichgewichtslagen an, die von Ljapunov entwickelte sogenannte **direkte Methode** zu verwenden [10]. Sie beruht im wesentlichen auf einer Verallgemeinerung des soeben eingeführten Potentialbegriffes.

Hierzu sei \vec{x}_0 eine Gleichgewichtslage entsprechend (2.4) und $\vec{x}(t)$ eine eindeutige Lösung von (2.1) in der Umgebung von \vec{x}_0 . Man betrachtet dann eine Funktion $F(\vec{x}(t))$, die die folgenden drei Eigenschaften besitzt:

$$F(\vec{x}_0) = 0, \quad (2.6)$$

$$F(\vec{x}(t)) \geq 0, \quad (2.7)$$

$$\frac{d}{dt} F(\vec{x}(t)) \leq 0. \quad (2.8)$$

Erfüllt eine Funktion $F(\vec{x}(t))$ diese drei Eigenschaften, so wird sie als **Ljapunov-Funktion** bezeichnet. Mit ihrer Hilfe läßt sich die folgende wichtige Aussage ableiten [31, S. 125]:

Zweites Theorem von Ljapunov:

Existiert eine Ljapunov-Funktion $F(\vec{x}(t))$, dann ist die Gleichgewichtslage \vec{x}_0 asymptotisch stabil.

Für den Spezialfall der Potentialsysteme (2.5) wählt man als Funktion $F(\vec{x}(t)) = V(\vec{x}(t)) - V(\vec{x}_0)$, da dann die beiden Ljapunov-Eigenschaften (2.6) und (2.8) automatisch für alle Zustände \vec{x}_0 erfüllt sind. Die dritte Ljapunov-Eigenschaft (2.7) ist dagegen nur für diejenigen Zustände \vec{x}_0 gegeben, die mit den Minima des Potentials $V(\vec{x})$ zusammenfallen. Damit ergibt die Anwendung des zweiten Theorems von Ljapunov auf diese Potentialsysteme, daß nur **die Minima des Potentials $V(\vec{x})$ die asymptotisch stabilen Gleichgewichtslagen** darstellen.

Die eigentliche Bedeutung dieses Theorems liegt aber darin begründet, daß es sich in zweierlei Hinsicht verallgemeinern läßt:

1. Betrachtet man die Gleichgewichtslage \vec{x}_0 als eine kompakte Menge im zugrunde liegenden, endlich dimensional Vektorraum, so liegt es nahe, daß das zweite Theorem von Ljapunov auch allgemeiner für **kompakte Mengen** gültig ist [18, S. 66]. Damit ist das Konzept, Stabilitätsuntersuchungen mit Ljapunov-Funktionen durchzuführen, nicht nur auf einfache Gleichgewichtslagen anwendbar, sondern es läßt sich auch auf kompliziertere Attraktoren wie beispielsweise Grenzzyklen oder chaotische Attraktoren ausdehnen.
2. Das zweite Theorem von Ljapunov erweist sich auch dann noch als gültig, wenn man statt endlich dimensionale auch **unendlich dimensionale Vektorräume** betrachtet [56, S. 10]. Dies ermöglicht es, das Konzept der Ljapunov-Funktionen von den gewöhnlichen auf die partiellen Differentialgleichungen zu übertragen.

2.3 Grundlegende Beispiele

Der zweite Hauptsatz der **Thermodynamik des Gleichgewichtes** besagt, daß man für abgeschlossene Systeme die **negative Entropiedifferenz** $F = -(S - S_0)$ als Ljapunov-Funktion deuten kann [43, S. 27]. Dabei repräsentiert S_0 den stationären Zustand des

thermodynamischen Gleichgewichtes.

Im Rahmen der **linearen, irreversiblen Thermodynamik des Nichtgleichgewichtes** übernimmt dagegen die **Differenz der Entropieproduktion** $F = P - P_0$ die Rolle einer Ljapunov-Funktion [19, S. 34]. Hierbei ist P_0 der stationäre Zustand des thermodynamischen Nichtgleichgewichtes.

Ljapunov-Funktionen lassen sich aber auch in den offenen Systemen der **Synergetik** angeben, die sehr weit vom thermodynamischen Gleichgewicht entfernt sind. [31, 44, 45]. Beispielsweise bei der ersten Instabilität des Einmodenlasers führt die Anwendung des **Versklavungsprinzips der Synergetik** bei fester Phase auf die eindimensionale **Ordnungsparametergleichung**

$$\dot{x}(t) = -\frac{\partial}{\partial x(t)} V(x(t)) \quad \text{mit} \quad V(x) = \frac{1}{2}a \cdot x^2 - \frac{1}{4}b \cdot x^4, \quad (2.9)$$

wobei der **Ordnungsparameter** durch x und der **Kontrollparameter** durch a gegeben ist. Offensichtlich stellt hierbei $F(x(t)) = V(x(t)) - V(x_0)$ eine Ljapunov-Funktion dar, wobei die asymptotisch stabilen Zustände nach dem zweiten Theorem von Ljapunov durch

$$x_0 = 0 \text{ für } a < 0 \quad \text{und} \quad x_0 = \pm \sqrt{\frac{a}{b}} \text{ für } a \geq 0 \quad (2.10)$$

gegeben sind.

Neben den bisher genannten **phänomenologischen Theorien** werden aber auch die entsprechenden **statistischen Theorien** entscheidend von der Existenz einer Ljapunov-Funktion geprägt. Als grundlegendes Beispiel hierfür läßt sich die **Kullback-Information** der statistischen Synergetik anführen [31, 45]. Für ein Nichtgleichgewichtssystem sei die eindeutige stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte $f_{st}(\vec{x})$ und die Wahrscheinlichkeitsdichte $f(\vec{x}, t)$ zu jedem Zeitpunkt $t \geq 0$ vorgegeben. Dann ist die dazugehörige Kullback-Information $K(f, f_{st})$ definiert durch

$$K(f, f_{st}) = \int dx^n f(\vec{x}, t) \cdot \ln \left\{ \frac{f(\vec{x}, t)}{f_{st}(\vec{x})} \right\}. \quad (2.11)$$

Es läßt sich zeigen, daß die Kullback-Information die Eigenschaften

$$K(f_{st}, f_{st}) = 0, \quad (2.12)$$

$$K(f, f_{st}) \geq 0, \quad (2.13)$$

$$\frac{d}{dt} K(f, f_{st}) \leq 0 \quad (2.14)$$

besitzt, wobei (2.14) nur gegeben ist, wenn die Wahrscheinlichkeitsdichte $f(\vec{x}, t)$ beispielsweise einer **Fokker-Planck-Gleichung** (vgl. Kapitel 4) mit nichtsingulärer Diffusionsmatrix genügt. Damit läßt sich die Kullback-Information in der statistischen Synergetik als Ljapunov-Funktion interpretieren.

2.4 Nichtgleichgewichtspotentiale

Um zu einem gewöhnlichen Differentialgleichungssystem (2.1) auch Ljapunov-Funktionen für kompliziertere Attraktoren wie Grenzyklen oder chaotische Attraktoren konstruieren zu können, muß man weitergehendere Betrachtungen anstellen. Hierzu wurde von Robert Graham eine allgemeine Klasse von Ljapunov-Funktionen für beliebige Attraktoren von (2.1) entwickelt, die als **Nichtgleichgewichtspotentiale** bezeichnet werden [48].

Der Ausgangspunkt der Überlegungen besteht darin, daß höherdimensionale Attraktoren im allgemeinen eine schwierige, zum Teil fraktale Struktur im zugrunde liegenden Konfigurationsraum aufweisen. Dies erschwert es, eine analytische Ljapunov-Funktion durch einen direkten Rückgriff auf (2.1) zu definieren.

Man verspricht sich nun von zusätzlichen Rauschprozessen in (2.1), daß die komplizierten Attraktorstrukturen **geglättet** oder **ausgeschmiert** werden. Deshalb erweitert man das rein deterministische Differentialgleichungssystem zu stochastischen **Langevin-Gleichungen** (vgl. Kapitel 4):

$$\dot{\vec{x}}(t) = \vec{N}(\vec{x}(t)) + \sqrt{Q} \cdot \underline{B}(\vec{x}(t)) \cdot \vec{F}(t). \quad (2.15)$$

Dabei stellt $\underline{B}(\vec{x})$ eine Matrix der **Rauschstärken** dar und die **Rauschkraft** \vec{F} sind einem **delta-korrelierten Gauß-Prozeß** mit

$$\langle F_i(t) \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle F_i(t) F_j(t') \rangle = \delta_{ij} \cdot \delta(t - t') \quad (2.16)$$

unterworfen.

Für die durch (2.15), (2.16) definierte Zufallsvariable $\vec{x}(t)$ läßt sich im Falle der Stratonovich-Interpretation eine Wahrscheinlichkeitsdichte $f(\vec{x}, t)$ angeben, die der Dynamik einer eindeutig bestimmten Fokker-Planck-Gleichung genügt (vgl. Kapitel 4). Die stationäre Lösung $f_{st}(\vec{x})$ dieser Fokker-Planck-Gleichung wird dann dazu herangezogen, die Funktion des Nichtgleichgewichtspotentiales $\phi(\vec{x})$ durch

$$\phi(\vec{x}) = - \lim_{Q \rightarrow 0} Q \cdot \ln f_{st}(\vec{x}) \quad (2.17)$$

zu definieren. Dabei wird die Erweiterung des deterministischen Systems (2.1) zu den stochastischen Langevin-Gleichungen (2.15) in (2.17) wieder rückgängig gemacht, da der Grenzübergang $Q \rightarrow 0$ zu einem schwachen Rauschen durchgeführt wird. Nach [48] stellt dieses Nichtgleichgewichtspotential $\phi(\vec{x})$ **unabhängig** von der in (2.15) gewählten Matrix $\underline{B}(\vec{x})$ der Rauschstärken eine Ljapunov-Funktion für die Attraktoren des deterministischen Systems (2.1) dar.

Die stationäre Lösung $f_{st}(\vec{x})$ der Fokker-Planck-Gleichung ergibt sich analog zu (4.20) durch einen Langzeitlimes aus dem Fokker-Planck-Propagator $G_F(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0)$ gemäß

$$f_{st}(\vec{x}) = \lim_{t \rightarrow +\infty} G_F(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) \quad \text{für} \quad t > t_0, \quad (2.18)$$

Damit wird die Berechnung von Ljapunov-Funktionen für das deterministische Differentialgleichungssystem (2.1) schließlich auf die Bestimmung stochastischer Propagatoren zurückgeführt. Dieses Ergebnis motiviert die Untersuchung von stochastischen Propagatoren in den folgenden Kapiteln.

Kapitel 3

Die Methode der Pfadintegrale

3.1 Die Motivation

Die in diesem Jahrhundert entwickelte **nichtrelativistische Quantenmechanik** eröffnet ein vollkommen neues physikalisches Verständnis für den atomaren Aufbau der Materie. Folgt man der historischen Entwicklung, so wird sie mit Hilfe zweier grundsätzlich verschiedener Konzepte formuliert, die sich aber vom mathematischen Standpunkt aus besehen als vollständig äquivalent erweisen.

Ursprünglich beschrieb Erwin Schrödinger (1887–1961) die mikroskopischen Phänomene durch eine **partielle Differentialgleichung** für eine komplexwertige **Wellenfunktion** [1, 2, 3]. Sein Zugang ermöglicht es, grundlegende physikalische Problemstellungen wie zum Beispiel das Wasserstoffatom erfolgreich zu bearbeiten, da hierzu die weit entwickelten Lösungsmethoden für partielle Differentialgleichungen zur Verfügung stehen. Der einzige Nachteil seiner Formulierung der Quantenmechanik besteht darin, daß aus ihr nicht unmittelbar ersichtlich ist, wie sich die klassische Mechanik als Spezialfall aus dieser allgemeineren Theorie ergeben soll.

Viele Jahre später gelang es dann Richard Philips Feynman (1918–1988), eine andere, globalere Formulierung der Quantenmechanik anzugeben, indem er den Schwerpunkt der Betrachtungen von der Wellenfunktion auf den sogenannten **Propagator** verlagerte [8, 16]. Dieser Zugang war von Paul Adrien Maurice Dirac vorbereitet worden [5, 7] und basiert im Unterschied zur Schrödingerschen Quantenmechanik explizit auf den Ideen und Konzepten der klassischen Mechanik wie der Wirkung und dem Hamiltonschen Prinzip. Obwohl die Feynmansche Quantenmechanik aus rein theoretischer Sicht durch ihre Eleganz besticht, ist es keineswegs eine triviale Aufgabe, die dort auftretenden **Pfadintegrale** für physikalisch interessante Probleme auszuwerten.

In den ersten zwei Abschnitten dieses Kapitels wird die mathematische Äquivalenz beider Konzepte bewiesen. Im letzten Abschnitt wird dann exemplarisch am Beispiele des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere dargestellt, wie die von Feynman entwickelte Methode der Pfadintegrale zur Lösung quantenmechanischer Probleme herangezogen werden kann.

3.2 Die Herleitung des Pfadintegrals

Ausgehend von der Schrödingerschen Quantenmechanik wird sukzessive die von Feynman vorgenommene Umformulierung entwickelt. Hierbei liegt der Schwerpunkt auf der Einführung des Propagatorbegriffes und der Ableitung seiner Pfadintegraldarstellung. Abschließend erfolgt eine ausführliche Diskussion der Verbindungen zwischen der Feynman'schen Quantenmechanik und der klassischen Mechanik.

3.2.1 Das Schrödingersche Anfangswertproblem

Den Ausgangspunkt der Betrachtungen stellt die Schrödingersche Formulierung der Quantenmechanik dar. Wählt man die darstellungsfreie, von Dirac eingeführte Schreibweise, so wird ein abgeschlossenes System durch einen linearen, hermiteschen Hamiltonoperator \hat{H} charakterisiert, der nicht explizit von der Zeit t abhängt. Beispielsweise besitzt ein einzelnes Teilchen der Masse m , das sich in einer Dimension x mit dem Impuls p im Potential $V(x)$ bewegen kann, besitzt den **Hamiltonoperator**:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad \text{mit} \quad \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad \text{und} \quad \hat{V} = V(\hat{x}). \quad (3.1)$$

Hierbei bezeichnen \hat{T} , \hat{V} , \hat{x} und \hat{p} die Operatoren der kinetischen Energie, der potentiellen Energie, der Ortskoordinate und des Impulses.

Der Zustand eines Systems zum Zeitpunkt t wird in der Schrödingerschen Quantenmechanik durch einen Zustandsvektor $|\psi(t)\rangle$ aus dem Hilbertraum \mathcal{H}_1 beschrieben. Er genügt der Dynamik eines Schrödingerschen Anfangswertproblems, das durch den Hamiltonoperator \hat{H} des Systems festgelegt ist:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad \text{mit} \quad |\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle. \quad (3.2)$$

Beachtet man, daß der Hamiltonoperator \hat{H} nicht explizit von der Zeit t abhängen soll, so läßt sich die Lösung von (3.2) unmittelbar angeben. Sie besagt, daß der gegebene Anfangszustand $|\psi_0\rangle$ durch den linearen, unitären **Zeitentwicklungoperator** $\hat{U}(t, t_0)$ in den gesuchten Endzustand $|\psi(t)\rangle$ abgebildet wird:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle \quad \text{mit} \quad \hat{U}(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) \right\}. \quad (3.3)$$

Wegen der geforderten Abgeschlossenheit des quantenmechanischen Systems liegt Homogenität bezüglich der Zeit vor, so daß der Zeitentwicklungoperator $\hat{U}(t, t_0)$ nach (3.3) nur von der Differenz der beiden Zeiten t und t_0 abhängt:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t + T, t_0 + T) \quad \text{für alle } T. \quad (3.4)$$

3.2.2 Die Definition der Ortsdarstellung

Die Eigenvektoren $|x\rangle$ des Ortsoperators \hat{x} bilden ein vollständiges Orthonormalsystem und genügen den Eigenschaften des Eigenwertproblems (3.5), der Orthonormalität (3.6) und der Vollständigkeit (3.7):

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad (3.5)$$

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'), \quad (3.6)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x| dx = 1. \quad (3.7)$$

Ein beliebiger Vektor $|\psi\rangle$ des zugrunde gelegten Hilbertraumes \mathcal{H}_1 läßt sich unter Ausnutzung der Vollständigkeitsrelation (3.7) nach den Eigenvektoren $|x\rangle$ des Ortsoperators \hat{x} entwickeln. Die dabei auftretenden Entwicklungskoeffizienten $\psi(x)$ bezeichnet man als die Ortsdarstellung des Vektors $|\psi\rangle$ oder einfach als die Schrödingersche Wellenfunktion:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \cdot \psi(x) dx \quad \text{mit} \quad \psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \quad (3.8)$$

Die Ortsdarstellung der Eigenvektoren $|x\rangle$ des Ortsoperators \hat{x} gewinnt man beispielsweise direkt aus der Orthonormalität (3.6):

$$|x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x'\rangle \cdot \psi(x', x) dx' \quad \text{mit} \quad \psi(x', x) = \delta(x' - x). \quad (3.9)$$

Die Eigenvektoren $|p\rangle$ des Impulsoperators \hat{p} bilden ebenfalls ein vollständiges Orthonormalsystem und genügen den zu (3.5) bis (3.7) analogen Eigenschaften:

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad (3.10)$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p'), \quad (3.11)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle\langle p| dp = 1. \quad (3.12)$$

Verwendet man die von Pascual Jordan aufgestellte Regel

$$\langle x|\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x|, \quad (3.13)$$

so läßt sich das Eigenwertproblem (3.10) in die Ortsdarstellung überführen:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x|p\rangle = p \langle x|p\rangle. \quad (3.14)$$

Die orthonormierten Lösungen von (3.14) sind dann die gesuchten Ortsdarstellungen der Eigenvektoren $|p\rangle$ des Impulsoperators \hat{p} :

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar} p x\right\}. \quad (3.15)$$

3.2.3 Der Übergang zur Ortsdarstellung

Nach diesen Vorbereitungen kann nun der Übergang zur Ortsdarstellung vollzogen werden. Hierzu wird zunächst der Bra-Vektor $\langle x|$ auf das Schrödingersche Anfangswertproblem (3.2) angewendet. Mit dem Hamiltonoperator (3.1), der Ortsdarstellung $\psi(x, t) = \langle x|\psi(t)\rangle$ der Zustandsvektoren $|\psi(t)\rangle$ nach (3.8) und der Jordan-Regel (3.13) geht das darstellungsfreie Schrödingersche Anfangswertproblem (3.2) in seine Ortsdarstellung über:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi(x, t) \quad \text{mit} \quad \psi(x_0, t_0) = \psi_0(x_0, t_0). \quad (3.16)$$

Entsprechend ergibt sich die Ortsdarstellung der darstellungsfreien Lösung (3.3) des Schrödingerschen Anfangswertproblems (3.2):

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, t; x_0, t_0) \cdot \psi_0(x_0, t_0) dx_0, \quad (3.17)$$

$$\text{mit} \quad G(x, t; x_0, t_0) = \langle x|\hat{U}(t, t_0)|x_0\rangle. \quad (3.18)$$

Die **Linearität** des Schrödingerschen Anfangswertproblems (3.2) spiegelt sich in der Ortsdarstellung (3.17) von deren Lösung wider. Die Ortsdarstellung $\psi_0(x_0, t_0)$ des Anfangszustandes $|\psi_0\rangle$ wird durch einen **linearen** Integraloperator auf die Ortsdarstellung $\psi(x, t)$ des Endzustandes $|\psi(t)\rangle$ abgebildet. Da der dabei auftretende Integralkern $G(x, t; x_0, t_0)$ des linearen Integraloperators die Propagation, d. h. die zeitliche Weiterentwicklung des quantenmechanischen Zustandes festlegt, wird er als **Propagator** bezeichnet.

Spezialisiert man die zur Zeit t_0 vorgelegte Anfangsbedingung durch $\psi_0(x_0, t_0) = \delta(x_0 - x'_0)$ auf ein am Orte x'_0 lokalisiertes Teilchen, so folgt aus (3.17) nach der Ausführung der Integration über die Ortsvariable x_0 :

$$\psi(x, t) = G(x, t; x'_0, t_0). \quad (3.19)$$

(3.19) führt auf eine einfache **Interpretation** des Propagators $G(x, t; x'_0, t_0)$. Er beschreibt die Ortsdarstellung eines Zustandes zur Zeit t , der aus einer zur Zeit t_0 am Orte x'_0 deltaförmig lokalisierten Ortsdarstellung hervorgegangen ist.

Gleichung (3.17) stellt darüber hinaus den **Ausgangspunkt für die Umformulierung der Quantenmechanik durch Feynman** dar. In der von Schrödinger entdeckten, ursprünglichen Formulierung der Quantenmechanik steht die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ im Mittelpunkt der Betrachtungen. Nach Max Born (1882–1970) kommt dabei dem Betragsquadrat der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ eine statistische Interpretation zu. Aus der formalen Lösung (3.17) des durch (3.2) beziehungsweise durch (3.16) definierten Schrödingerschen Anfangswertproblems geht nun aber hervor, daß man für jede Anfangsverteilung $\psi_0(x_0, t_0)$ die Lösung $\psi(x, t)$ durch eine einfache Integration berechnen kann, sofern der Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ des Systems bekannt ist. Dieser Umstand führt in der von Feynman vorgenommenen Formulierung der Quantenmechanik dazu, daß statt des zeitlich und räumlich lokalen Zustandes $\psi(x, t)$ vielmehr dessen globale zeitliche Weiterentwicklung zwischen zwei

Raum–Zeit–Punkten und damit der Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ näher betrachtet wird.

Nach (3.18) ist der Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ mit der **Ortsdarstellung des Zeitentwicklungsoperators** $\hat{U}(t, t_0)$ identisch. Setzt man ferner (3.3) in (3.18) ein, so gewinnt man eine direkte Beziehung zwischen dem Hamiltonoperator \hat{H} und dem Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \langle x | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) \right\} | x_0 \rangle. \quad (3.20)$$

3.2.4 Die Eigenschaften des Propagators

Aus den bisherigen Überlegungen lassen sich unmittelbar einige wesentliche Eigenschaften des Propagators ableiten.

3.2.4.1 Die Homogenität bezüglich der Zeit

Die **Homogenität** des Zeitentwicklungoperators $\hat{U}(t, t_0)$ **bezüglich der Zeit** überträgt sich wegen (3.4) und (3.18) auch auf den Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$:

$$G(x, t; x_0, t_0) = G(x, t + T; x_0, t_0 + T) \quad \text{für alle } T. \quad (3.21)$$

Wählt man in (3.21) speziell die Zeittranslation $T = -t_0$, so kann die Anfangszeit im Propagator ohne Beschränkung der Allgemeinheit in den Ursprung verlegt werden. Damit hängt der Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ nur von der Differenz der beiden Zeiten t und t_0 ab:

$$G(x, t; x_0, t_0) = G(x, t - t_0; x_0, 0). \quad (3.22)$$

3.2.4.2 Die Spektraldarstellung

Auch die Eigenvektoren $|E_n\rangle$ des Hamiltonoperators \hat{H} bilden ein vollständiges Orthonormalsystem:

$$\hat{E}_n |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle, \quad (3.23)$$

$$\langle E_n | E'_n \rangle = \delta(E_n - E'_n), \quad (3.24)$$

$$\sum_n |E_n\rangle \langle E_n| = 1, \quad (3.25)$$

wobei die dabei auftretende Quantenzahl n entsprechend dem jeweiligen Energiespektrum diskret oder kontinuierlich zu wählen ist. Fügt man die Vollständigkeitsrelation (3.25) zweimal in (3.20) ein, so ergibt sich unter Ausnutzung des Eigenwertproblems (3.23), der Orthonormalität (3.24) und der Ortsdarstellung $\psi_n(x) = \langle x | E_n \rangle$ der Eigenvektoren $|E_n\rangle$ **die Spektraldarstellung des Propagators**:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \sum_n \psi_n(x) \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_n(t - t_0) \right\} \cdot \psi_n^*(x_0). \quad (3.26)$$

Diese Spektraldarstellung ermöglicht zwei unterschiedliche Anwendungen:

1. Sind die Energieeigenwerte E_n und die Ortsdarstellungen $\psi_n(x)$ der Energieeigenvektoren $|E_n\rangle$ bekannt, so kann man den Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ durch die Ausführung der Summation beziehungsweise der Integration über die Quantenzahl n berechnen. Diese Methode wurde beispielsweise angewendet, um die zeitliche Fouriertransformierte des Propagators vom Wasserstoffatom zu bestimmen [13].
2. Ist dagegen umgekehrt der Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ vorgegeben, so lassen sich aus ihm die Spektraldaten E_n und $\psi_n(x)$ des Hamiltonoperators \hat{H} rekonstruieren. Dies wird in den Abschnitten 3.4.8 und 3.4.9 am Beispiel des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere durchgeführt.

3.2.4.3 Das Schrödingersche Anfangswertproblem

Setzt man das Ergebnis (3.17) für die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ in das Schrödingersche Anfangswertproblem (3.16) ein, so erhält man auch für den Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ ein **Schrödingersches Anfangswertproblem**. Er genügt bezüglich seiner ersten beiden Argumente ebenfalls der Schrödinger-Gleichung (3.16) und besitzt eine Delta-Funktion als Anfangsbedingung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G(x, t; x_0, t_0) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} G(x, t; x_0, t_0), \quad (3.27)$$

$$G(x, t_0; x_0, t_0) = \delta(x - x_0). \quad (3.28)$$

3.2.4.4 Die Gruppeneigenschaft

Es seien (x_1, t_1) , (x_2, t_2) und (x_3, t_3) drei beliebige Raum-Zeit-Punkte. Dann gibt es zwei-erlei Möglichkeiten, eine Propagation der Wellenfunktion von $\psi(x_1, t_1)$ nach $\psi(x_3, t_3)$ zu beschreiben:

1. Die direkte Propagation ergibt nach (3.17):

$$\psi(x_3, t_3) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x_3, t_3; x_1, t_1) \cdot \psi(x_1, t_1) dx_1. \quad (3.29)$$

2. Die Wellenfunktion $\psi(x_1, t_1)$ kann aber auch zuerst nach $\psi(x_2, t_2)$ und dann nach $\psi(x_3, t_3)$ propagieren. Dann muß (3.17) zweimal iterativ angewendet werden:

$$\psi(x_3, t_3) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} G(x_3, t_3; x_2, t_2) \cdot G(x_2, t_2; x_1, t_1) dx_2 \right\} \cdot \psi(x_1, t_1) dx_1. \quad (3.30)$$

Setzt man (3.29) und (3.30) gleich, so folgt aus der Beliebigkeit der Wellenfunktion $\psi(x_1, t_1)$ eine Beziehung, in der nur noch die Propagatoren auftreten. Sie drückt die **Gruppeneigenschaft der Propagatoren** aus:

$$G(x_3, t_3; x_1, t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x_3, t_3; x_2, t_2) \cdot G(x_2, t_2; x_1, t_1) dx_2. \quad (3.31)$$

Aus (3.31) lassen sich die beiden entscheidenden Rechenregeln ablesen, die der Feynman'schen Formulierung der Quantenmechanik zugrunde liegen [42]. Wie schon erwähnt wurde, liegt der Schwerpunkt seiner Betrachtungen auf den Propagatoren, die die Entwicklung eines Zustandes zwischen zwei Raum–Zeit–Punkten charakterisieren. (3.31) legt nun fest, wie die Propagatoren bei Wegen, d. h. bei einer Abfolge von Raum–Zeit–Punkten, zueinander in Beziehung zu setzen sind (s. Abb. 3.1):

1. Liegen zwei Wege in dem Sinne **hintereinander**, daß der Endpunkt des einen mit dem Anfangspunkt des anderen übereinstimmt, so werden die dazugehörigen Propagatoren miteinander **multipliziert**. Dies führt in (3.31) zur Multiplikation der beiden Propagatoren $G(x_3, t_3; x_2, t_2)$ und $G(x_2, t_2; x_1, t_1)$.
2. Sind dagegen zwei Wege in dem Sinne zueinander **parallel**, daß deren jeweilige Anfangs- und Endpunkte miteinander übereinstimmen, so werden die entsprechenden Propagatoren **addiert**. Dies führt nach (3.31) zur Integration über die Ortsvariable x_2 .

Mit Hilfe des Konzeptes der Propagatoren läßt sich ein neuartiges Verständnis der Quantenmechanik erzielen. Letztendlich wird die quantenmechanische Theorie auf eine Isomorphie zwischen den Wegen in der physikalischen Raum–Zeit sowie zwischen den mathematischen Operationen der Addition und Multiplikation komplexer Zahlen reduziert.

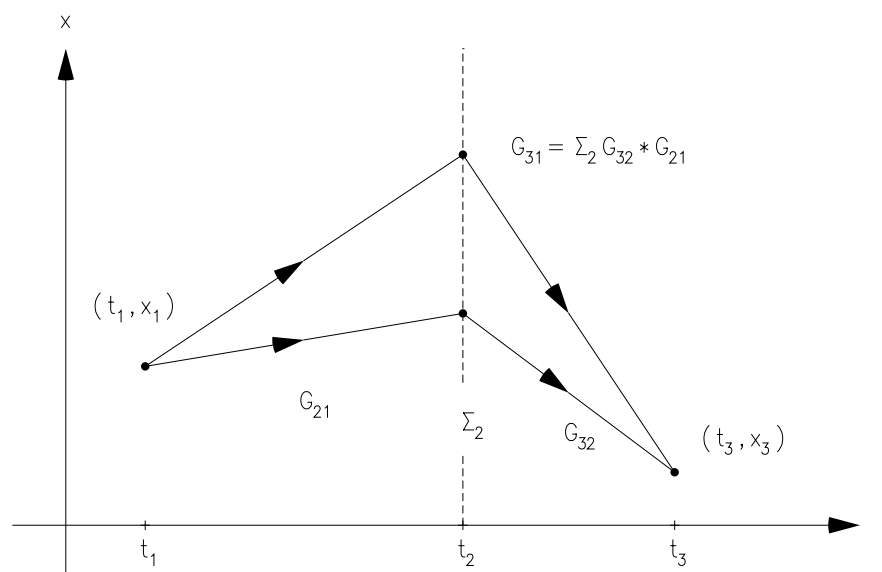


Abb. 3.1: Schematische Veranschaulichung der Gruppeneigenschaft (3.31) mit der Abkürzung $G_{ji} = G(x_j, t_j; x_i, t_i)$

3.2.5 Der Langzeit- und der Kurzzeitpropagator

Es sei $[t_0, t]$ ein fest vorgegebenes, endliches Zeitintervall, das in N äquidistante Teilintervalle $[t_n, t_{n+1}]$ für $n = 0, 1, \dots, N-1$ mit der Intervallbreite ϵ zerlegt wird. Mit den Setzungen $t_{n=0} = t_0$ und $t_{n=N} = t$ gilt dann:

$$\text{Intervallbreite: } \epsilon = \frac{t - t_0}{N} = t_{n+1} - t_n \quad \text{für } n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (3.32)$$

(3.32) ermöglicht es, den Exponentialfaktor von (3.20) in N identische Faktoren aufzuspalten:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \langle x | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon \right\} \cdot \dots \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon \right\} | x_0 \rangle. \quad (3.33)$$

In die $N-1$ Zwischenräume zwischen die N Exponentialoperatoren lassen sich $N-1$ Vollständigkeitsrelationen (3.7) einschieben. Berücksichtigt man daraufhin erneut (3.20), so erhält man ein Ergebnis, das sich auch durch $(N-1)$ -fache Iteration der Gruppeneigenschaft (3.31) ergibt:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) \right\}. \quad (3.34)$$

Nach (3.31) und (3.34) wird damit die Propagation eines quantenmechanischen Systems vom Anfangspunkt (x_0, t_0) zum Endpunkt (x, t) durch die Summe der Propatoren entlang aller diskreten Wege

$$(x_0, t_0) \rightarrow (x_1, t_1) \rightarrow \dots \rightarrow (x_{N-1}, t_{N-1}) \rightarrow (x, t) \quad (3.35)$$

beschrieben, die entsprechend der endlichen, äquidistanten Unterteilung (3.32) des Zeitintervalles $[t_0, t]$ überhaupt möglich sind.

In einem zweiten Schritt wird nun das Zeitintervall $[t_0, t]$ immer feiner unterteilt, indem der Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ untersucht wird. Nach (3.32) geht dann die Intervallbreite $\epsilon \rightarrow 0$, wobei aber $\epsilon N = t - t_0$ die endliche, vorgegebene Länge des betrachteten Zeitintervalles $[t_0, t]$ ist. Dieser in ϵ und N gekoppelte Grenzwertprozeß wird mit der Abkürzung

$$\lim_{\epsilon} \bullet = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty \\ \epsilon N = t - t_0}} \bullet \quad (3.36)$$

versehen und auf (3.34) angewendet:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \lim_{\epsilon} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) \right\}. \quad (3.37)$$

Der Grenzwertprozeß in (3.37) bewirkt nun, daß der Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ mit der Summe der Propagatoren entlang aller kontinuierlicher Wege

$$x(\tau) \in (-\infty, +\infty) \quad \text{für } \tau \in [t_0, t] \quad \text{mit } x(t_0) = x_0 \quad \text{und } x(t) = x \quad (3.38)$$

identisch ist. In (3.37) liegt damit ein **Wegintegral** oder ein **Pfadintegral** für den Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ vor.

In (3.37) gibt es zwei verschiedene Arten von Propagatoren, die die beiden folgenden Definitionen nahelegen:

1. Auf der linken Seite beschreibt der Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ die **Langzeitentwicklung** eines zur Anfangszeit deltaförmig lokalisierten Teilchens während der endlichen Zeit $t - t_0$. Deshalb wird er als **Langzeitpropagator** bezeichnet.
2. Auf der rechten Seite treten dagegen die Propagatoren $G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ auf. Da sie im Sinne des durchzuführenden Grenzwertprozesses die **Kurzzeitentwicklung** des quantenmechanischen Systems während der infinitesimalen Zeit ϵ charakterisieren, werden sie als **Kurzzeitpropagatoren** bezeichnet.

Ferner besagt (3.37), daß man aus den Kurzzeitpropagatoren $G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ durch Produktbildungen, Integrationen und dem Grenzübergang den dazugehörigen Langzeitpropagator $G(x, t; x_0, t_0)$ berechnen kann. Damit wird die Bestimmung des Langzeitpropagators $G(x, t; x_0, t_0)$ auf die der Kurzzeitpropagatoren $G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ zurückgeführt.

3.2.6 Der Satz über Kurzzeitpropagatoren

Der folgende Satz über Kurzzeitpropagatoren ist für die gesamte Pfadintegrationstheorie von zentraler Bedeutung. Er eröffnet die Möglichkeit, Kurzzeitpropagatoren zu manipulieren und damit das Pfadintegral (3.37) für den Langzeitpropagator zu vereinfachen:

Satz über Kurzzeitpropagatoren:

Alle Kurzzeitpropagatoren $G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$, die bis zur ersten Ordnung in ϵ übereinstimmen, liefern im Pfadintegral (3.37) nach dem Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0, N \rightarrow \infty, \epsilon N = t - t_0$ ein- und denselben Langzeitpropagator $G(x, t; x_0, t_0)$.

Durch diesen Satz wird auf der Menge aller Kurzzeitpropagatoren eine Äquivalenzrelation eingeführt. Zwei Kurzzeitpropagatoren $G_1(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ und $G_2(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ heißen zueinander äquivalent, wenn sie bis zur ersten Ordnung in ϵ übereinstimmen. In einem solchen Falle wird die folgende Notation verwendet:

$$G_1(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) \approx G_2(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0). \quad (3.39)$$

Der Satz über Kurzzeitpropagatoren läßt sich nun zweimal anwenden, um den zu (3.37) gehörigen Kurzzeitpropagator $G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ zu vereinfachen. Da sich nach (3.1) der Hamiltonoperator \hat{H} als Operator der Gesamtenergie additiv aus den Operatoren \hat{T} und \hat{V} der kinetischen und der potentiellen Energie zusammensetzt, gilt unter Beachtung von Gleichung (3.20):

$$\begin{aligned} G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) &= \langle x_{n+1} | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{T} \epsilon - \frac{i}{\hbar} \hat{V} \epsilon \right\} | x_n \rangle \\ &\approx \langle x_{n+1} | 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{T} \epsilon - \frac{i}{\hbar} \hat{V} \epsilon | x_n \rangle \approx \langle x_{n+1} | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{T} \epsilon \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{V} \epsilon \right\} | x_n \rangle. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Damit ermöglicht der Satz über Kurzzeitpropagatoren, eine Faktorisierung des Kurzzeitentwicklungsoperators innerhalb des Kurzzeitpropagators durchzuführen. Nach den Rechenregeln der Operatoralgebra ist eine Faktorisierung des Kurzzeitentwicklungspropagators entsprechend der **Baker–Hausdorff–Formel** eigentlich nur unter Berücksichtigung von zusätzlichen Termen der Ordnung ϵ^2 möglich [54, S. 64]:

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (\hat{T} + \hat{V}) \epsilon \right\} = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{T} \epsilon \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{V} \epsilon \right\} \cdot \exp \left\{ \hat{X} \right\} \quad \text{mit } O(\hat{X}) = \epsilon^2. \quad (3.41)$$

Wegen des in (3.37) durchzuführenden Grenzprozesses $\epsilon \rightarrow 0, N \rightarrow \infty, \epsilon N = t - t_0$ lassen sich aber diese zusätzlichen Terme der Ordnung ϵ^2 im Kurzzeitpropagator $G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ von (3.40) vernachlässigen. Damit entsprechen (3.37) und (3.40) der **Trotter–Produktformel** [57, S. 37].

3.2.7 Die Berechnung des Kurzzeitpropagators

In (3.40) wird in den Zwischenraum zwischen den beiden Exponentialoperatoren eine Vollständigkeitsrelation (3.7) der Ortseigenvektoren $|x\rangle$ eingeschoben:

$$G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x_{n+1} | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{T} \epsilon \right\} | x \rangle \cdot \langle x | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{V} \epsilon \right\} | x_n \rangle. \quad (3.42)$$

Die hierbei auftretenden Matrixelemente werden getrennt berechnet:

1. Beachtet man, daß der Operator \hat{V} der potentiellen Energie nach (3.1) durch $\hat{V} = V(\hat{x})$ gegeben ist, so erhält man unter Anwendung des Eigenwertproblems (3.5) und der Orthonormalitätsrelation (3.6):

$$\langle x | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{V} \epsilon \right\} | x_n \rangle = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} V(x_n) \epsilon \right\} \cdot \delta(x - x_n). \quad (3.43)$$

2. In das andere Matrixelement werden zwei Vollständigkeitsrelationen (3.12) der Impulseigenvektoren $|p\rangle$ eingeschoben:

$$\begin{aligned} \langle x_{n+1} | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{T} \epsilon \right\} | x_n \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp_n \int_{-\infty}^{+\infty} dp'_n \langle x_{n+1} | p_n \rangle \\ &\cdot \langle p_n | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{T} \epsilon \right\} | p'_n \rangle \cdot \langle p'_n | x_n \rangle. \end{aligned} \quad (3.44)$$

3. Mit der Definition des Operators \hat{T} der kinetischen Energie gemäß (3.1), dem Eigenwertproblem (3.10), der Orthonormalitätsrelation (3.11) und der Ortsdarstellung (3.15) der Impulseigenvektoren $|p\rangle$ folgt dann aus (3.44):

$$\begin{aligned} \langle x_{n+1} | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{T} \epsilon \right\} | x_n \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp_n \int_{-\infty}^{+\infty} dp'_n \delta(p_n - p'_n) \\ &\cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} - \frac{p_n^2}{2m} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Setzt man (3.43) und (3.45) in (3.42) ein und führt die Integrationen über p'_n und x durch, so gewinnt man für den Kurzzeitpropagator:

$$G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} - \left(\frac{p_n^2}{2m} + V(x_n) \right) \right] \right\}. \quad (3.46)$$

3.2.8 Das Hamiltonsche Pfadintegral

Der in (3.46) berechnete Kurzzeitpropagator wird nun in die Berechnungsvorschrift (3.37) für den Langzeitpropagator eingesetzt. Es entsteht dadurch ein Pfadintegral, in dem sowohl über die Orte als auch über die Impulse integriert wird. Gemäß dem Grundgedanken der von Sir William Rowan Hamilton (1805–1865) geprägten Formulierung der klassischen Mechanik, daß Orte und Impulse als voneinander unabhängige, gleichberechtigte Freiheitsgrade aufzufassen sind, bezeichnet man dieses Pfadintegral als **Hamiltonsche Pfadintegral**:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \lim_{\epsilon} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right\} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S^{(N)}[x_n, p_n] \right\}, \quad (3.47)$$

$$S^{(N)}[x_n, p_n] = \epsilon \cdot \sum_{n=0}^{N-1} \left\{ p_n \frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} - \left[\frac{p_n^2}{2m} + V(x_n) \right] \right\}. \quad (3.48)$$

Im Hamiltonschen Pfadintegral (3.47) werden die Orte und die Impulse aber nicht vollständig gleichberechtigt behandelt. Den N Impulsintegralen stehen nur $N-1$ Ortsintegrale gegenüber.

3.2.9 Das Langrangesche Pfadintegral

Die Impulsintegrale im Hamiltonschen Pfadintegral (3.47) sollen nun explizit durchgeführt werden. Hierzu muß das folgende Integral ausgewertet werden:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \left[-\frac{p_n^2}{2m} + p_n \frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} \right] \right\}. \quad (3.49)$$

Eine quadratische Ergänzung und eine Translation der Integrationsvariablen p_n führt (3.49) über in:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} \right)^2 \right\} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{i\epsilon}{2m\hbar} p_n^2 \right\} dp_n. \quad (3.50)$$

Bei dem noch verbleibenden Impulsintegral handelt es sich um ein sogenanntes Fresnelintegral [12, S. 181]. Insgesamt erhält man als Ergebnis einer Nebenrechnung:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \epsilon \left\{ -\frac{p_n^2}{2m} + p_n \frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} \right\} \right] \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \frac{m}{2} \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Setzt man (3.51) in das Hamiltonsche Pfadintegral (3.47) für jedes der N Impulsintegrale ein, so entsteht ein neues Pfadintegral, in dem nur noch über die Orte zu integrieren ist. Entsprechend dem Grundgedanken der nach Joseph Louis Lagrange (1736–1813) benannten Formulierung der klassischen Mechanik, daß nur die Orte als unabhängige Freiheitsgrade aufzufassen sind, wird dieses Pfadintegral als **Lagrangesches Pfadintegral** bezeichnet:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \lim_{\epsilon} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right\} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S^{(N)}[x_n] \right\}, \quad (3.52)$$

$$S^{(N)}[x_n] = \epsilon \sum_{n=0}^{N-1} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} \right)^2 - V(x_n) \right\}. \quad (3.53)$$

Bei der expliziten Auswertung dieses Lagrangeschen Pfadintegrales muß beachtet werden, daß die $\epsilon^{\frac{N}{2}}$ -fache Singularität in (3.52) zunächst durch $N-1$ Integrationen geglättet werden muß. Erst dann kann der Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0, N \rightarrow \infty, \epsilon N = t - t_0$ durchgeführt werden.

3.2.10 Die Verbindungen zur klassischen Mechanik

Sowohl im Hamiltonschen als auch im Lagrangeschen Pfadintegral (3.47) und (3.52) sind die Argumente der dort jeweils auftretenden Exponentialfunktionen einer anschaulichen, physikalischen Interpretation zugänglich. In beiden Fällen tritt nämlich eine Größe auf, die in der klassischen Mechanik als Ausgangspunkt für verschiedene Variationsverfahren dient: die **Wirkung**.

In der Lagrangeschen Mechanik werden diejenigen Kurven $x = x(\tau)$ im **Konfigurationsraum** betrachtet, die die Randbedingungen $x_0 = x(t_0)$ und $x = x(t)$ erfüllen. Die Wirkung $S = S[x(\tau)]$ als Funktional dieser Kurven $x = x(\tau)$ ergibt sich als das Zeitintegral über die Lagrangefunktion $L = L(x(\tau), \dot{x}(\tau))$:

$$S[x(\tau)] = \int_{t_0}^t L(x(\tau), \dot{x}(\tau)) d\tau \quad \text{mit} \quad L = L(x, \dot{x}) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x). \quad (3.54)$$

Nimmt man in (3.54) entsprechend (3.32) eine Diskretisierung des Zeitintervalles $[t_0, t]$ vor, so läßt sich das Integral z. B. durch eine Untersumme approximieren:

$$S[x(\tau)] \approx \epsilon \sum_{n=0}^{N-1} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} \right)^2 - V(x_n) \right\} = S^{(N)}[x_n]. \quad (3.55)$$

Damit tritt die diskretisierte Form $S^{(N)}[x_n]$ der Wirkung $S = S[x(\tau)]$ aus der Lagrange-schen Mechanik im Lagrangeschen Pfadintegral (3.52) auf.

In der Hamiltonschen Mechanik werden diejenigen Kurven $x = x(\tau), p = p(\tau)$ im **Pha-senraum** berücksichtigt, die den Randbedingungen $x_0 = x(t_0)$ und $x = x(t)$ genügen. Der Impulsfunktion $p = p(\tau)$ wird dabei keine Randbedingung auferlegt. Die Hamilton-funktion $H = H(x(\tau), p(\tau))$ in der Hamiltonschen Mechanik ergibt sich durch eine von Adrien Marie Legendre (1752–1833) entwickelte Transformation aus der Lagrange-funktion $L = L(x(\tau), \dot{x}(\tau))$. Die dazugehörige Wirkung $S = S[x(\tau), p(\tau)]$ als Funktional der Kurven $x = x(\tau), p = p(\tau)$ lautet dann:

$$S[x(\tau), p(\tau)] = \int_{t_0}^t \left[\frac{\partial L(x(\tau), \dot{x}(\tau))}{\partial \dot{x}(\tau)} \cdot \dot{x}(\tau) - H(x(\tau), p(\tau)) \right] d\tau \quad \text{mit} \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = p. \quad (3.56)$$

Die Diskretisierung (3.32) des Zeitintervalles $[t_0, t]$ führt dann (3.56) über in:

$$S[x(\tau), p(\tau)] \approx \epsilon \sum_{n=0}^{N-1} \left\{ p_n \frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} - \left[\frac{p_n^2}{2m} + V(x_n) \right] \right\} = S^{(N)}[x_n, p_n]. \quad (3.57)$$

Damit tritt die diskretisierte Form $S^{(N)}[x_n, p_n]$ der Wirkung $S = S[x(\tau), p(\tau)]$ aus der Hamiltonschen Mechanik im Hamiltonschen Pfadintegral (3.47) auf.

Die in (3.55) und in (3.57) erzielten Ergebnisse legen nun eine weitere Schreibweise für das Lagrangesche und das Hamiltonsche Pfadintegral (3.52) und (3.47) nahe:

Das Lagrangesche Pfadintegral (3.52) läßt sich als ein Funktionalintegral auffassen, bei dem die Exponentialfunktion eines Funktionales über alle möglichen Funktionen $x = x(\tau)$ im Konfigurationsraum integriert wird, die die Randbedingungen $x_0 = x(t_0)$ und $x = x(t)$ erfüllen:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(\tau)] \right\}. \quad (3.58)$$

Hierbei werden die in (3.52) auftretenden Faktoren vor der Exponentialfunktion in dem Integrationssymbol $\mathcal{D}x(\tau)$ zusammengefaßt. Das in (3.58) auftretende Funktional der Wirkung $S[x(\tau)]$ ist dabei durch (3.54) definiert.

Das Hamiltonsche Pfadintegral (3.47) ist ebenfalls einer Interpretation als Funktionalinte-gral zugänglich. Die Exponentialfunktion eines Funktionales wird hier über alle möglichen

Funktionen $x = x(\tau), p = p(\tau)$ im Phasenraum integriert, die $x_0 = x(t_0)$ und $x = x(t)$ erfüllen:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(\tau) \int \mathcal{D}'p(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(\tau), p(\tau)] \right\}. \quad (3.59)$$

Hierbei ist das Funktional der Wirkung $S[x(\tau), p(\tau)]$ in (3.59) durch (3.56) gegeben. Die in der diskreten Form (3.47) des Hamiltonschen Pfadintegrals auftretende Unsymmetrie zwischen den Integrationen über die Orte und denen über die Impulse wird in der kontinuierlichen Form des Hamiltonschen Pfadintegrals durch die Einführung der unterschiedlichen Integrationssymbole $\mathcal{D}x(\tau)$ und $\mathcal{D}'p(\tau)$ zum Ausdruck gebracht.

Die in diesem Abschnitt zusammengetragenen Ergebnisse legen die folgende Definition nahe. (3.52) und (3.47) beziehungsweise (3.58) und (3.59) werden als die **diskrete** beziehungsweise die **kontinuierliche** Form des Lagrangeschen beziehungsweise des Hamiltonschen Pfadintegrals bezeichnet.

3.3 Die Herleitung der Schrödinger–Gleichung aus dem Lagrangeschen Pfadintegral

Während im vorangegangenen Abschnitt die Feynmansche Quantenmechanik aus der Schrödingerschen Quantenmechanik abgeleitet wurde, soll nun der umgekehrte Weg beschritten werden. Aus dem Lagrangeschen Pfadintegral des Langzeitpropagators wird die Schrödinger–Gleichung der Wellenfunktion abgeleitet. Damit erweisen sich die von Schrödinger und Feynman gefundenen Formulierungen der Quantenmechanik als zueinander mathematisch äquivalent.

3.3.1 Die Langzeit- und die Kurzzeitentwicklung

Es sei das Lagrangesche Pfadintegral für den Langzeitpropagator $G(x, t; x_0, t_0)$ gegeben, der die **Langzeitentwicklung** einer quantenmechanischen Wellenfunktion während der endlichen Zeit $t - t_0$ beschreibt:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, t; x_0, t_0) \cdot \psi(x_0, t_0) dx_0, \quad (3.60)$$

$$\text{mit } G(x, t; x_0, t_0) = \lim_{\epsilon} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right\} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} \right)^2 - V(x_n) \right] \right\}. \quad (3.61)$$

Gesucht ist nun diejenige partielle Differentialgleichung, der die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ aus (3.60) genügt. Deshalb wird im folgenden deren erste Zeitableitung berechnet, die im Rahmen einer Diskretisierung als der Grenzwert eines Differenzenquotienten definiert ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\psi(x, t + \epsilon) - \psi(x, t)}{\epsilon}. \quad (3.62)$$

Um (3.62) berechnen zu können, muß man die **Kurzzeitentwicklung** der Wellenfunktion kennen, die durch den Kurzzeitpropagator $G(x, \epsilon; x_0, 0)$ charakterisiert wird. Für eine infinitesimale Zeit ϵ geht (3.60) über in:

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, \epsilon; x_0, 0) \cdot \psi(x_0, t) dx_0. \quad (3.63)$$

Der in (3.63) auftretende Kurzzeitpropagator $G(x, \epsilon; x_0, 0)$ ist dabei durch den Langzeitpropagator $G(x, t; x_0, t_0)$ in (3.61) festgelegt. Beachtet man nämlich den allgemeinen, durch (3.37) gegebenen Zusammenhang zwischen Langzeit- und Kurzzeitpropagatoren, so folgt unmittelbar aus (3.61):

$$G(x, \epsilon; x_0, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} \right)^2 - V(x_n) \right] \right\} \quad (3.64)$$

(3.63) und (3.64) ergeben dann nach einer Substitution der Integrationsvariablen durch $\xi(x_0) = x_0 - x$:

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2i \hbar \epsilon} \xi^2 \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon V(x + \xi) \right\} \cdot \psi(x + \xi, t) d\xi. \quad (3.65)$$

3.3.2 Die Entwicklung nach ϵ

Der in (3.62) durchzuführende Grenzwertprozeß $\epsilon \rightarrow 0$ bestimmt das weitere Vorgehen. Da nach der Division durch ϵ die höheren Ordnungen in ϵ im Grenzwertprozeß $\epsilon \rightarrow 0$ gegen null gehen, muß die Wellenfunktion $\psi(x, t + \epsilon)$ und damit das Integral in (3.65) nur bis zur ersten Ordnung in ϵ berechnet werden.

Hierzu werden die letzten beiden Faktoren des Integranden von (3.65) in eine Potenzreihe nach ξ entwickelt. Wegen der anschließend noch durchzuführenden Integration über ξ muß man dabei beachten, daß

1. ungerade Potenzen in ξ keinen Beitrag liefern,
2. bei geraden Potenzen in ξ jeder Faktor ξ vor der Gaußfunktion einem Faktor $\epsilon^{\frac{1}{2}}$ entspricht, denn es gilt

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \xi^{2n} \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2i \hbar \epsilon \xi^2} \right\} = \frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2n - 1)}{2^n} \cdot \left(\frac{2i \hbar \epsilon}{m} \right)^n. \quad (3.66)$$

Damit geht (3.65) über in:

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \left\{ \psi(x, t) - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(x) \psi(x, t) + \frac{1}{2} \xi^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \right\} \cdot \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2i \hbar \epsilon} \xi^2 \right\}. \quad (3.67)$$

Die Integration über ξ liefert dann unter Berücksichtigung der Integrationsformeln (3.66) das folgende Ergebnis für $\psi(x, t + \epsilon)$:

$$\psi(x, t + \epsilon) = \psi(x, t) - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(x) \psi(x, t) + \frac{i \hbar \epsilon}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t). \quad (3.68)$$

Setzt man (3.68) in (3.62) ein, führt den Grenzwertprozeß $\epsilon \rightarrow 0$ aus und multipliziert die entstehende Gleichung mit $i \hbar$ durch, so erhält man die Schrödinger-Gleichung (3.16) für die Wellenfunktion $\psi(x, t)$.

3.4 Der harmonische Oszillator mit Zentrifugalbarriere

Im folgenden soll an Hand eines nichttrivialen Beispiels demonstriert werden, wie die Methode der Pfadintegrale zur Lösung quantenmechanischer Probleme herangezogen werden kann. Da der Propagator des harmonischen Oszillators in Abschnitt 5.6.3 behandelt werden soll, bietet es sich an, hier eine verallgemeinerte Problemstellung zu betrachten.

Wählt man bei der Beschreibung des dreidimensionalen harmonischen Oszillators Kugelkoordinaten, so kann man eine Separation in den Radial- und den Winkelanteil durchführen. Dadurch erhält man für die Radialkoordinate x das eindimensionale, reduzierte Problem des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere. Es ist durch das Potential

$$V_D = V_D(x) = \frac{m}{2} \omega^2 x^2 + \frac{g}{x^2} \quad \text{mit} \quad x \in [0, \infty) \quad (3.69)$$

definiert, wobei der Parameter g die Abweichung dieses Systems vom harmonischen Oszillator beschreibt (s. Abb. 3.2).

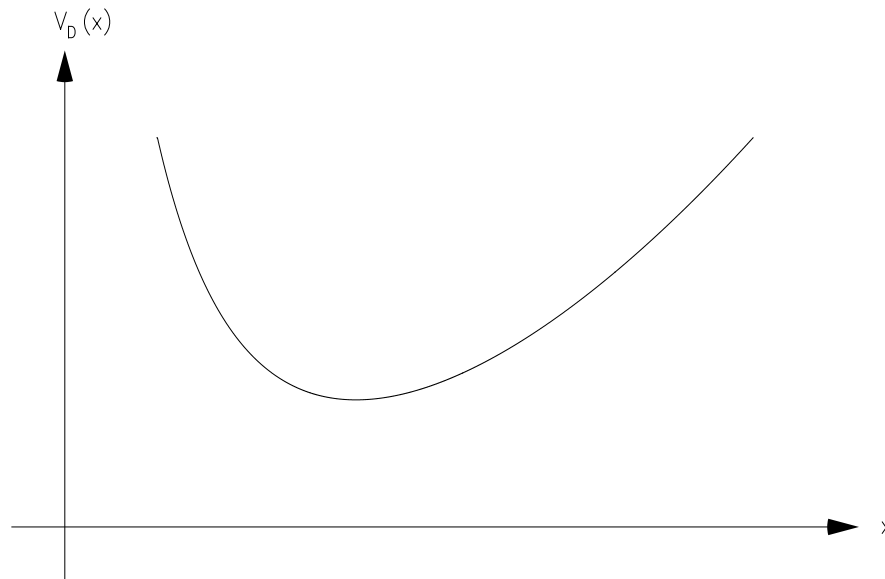


Abb. 3.2: Potential des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere (3.69)

3.4.1 Die Lösung des Newtonschen Anfangswertproblems

Zur Vorbereitung der Lösung des quantenmechanischen Problems wird zunächst das zu (3.69) gehörige klassische System betrachtet. Das Newtonsche Anfangswertproblem besteht dabei aus der Newton-Gleichung (3.70) und den beiden Anfangsbedingungen (3.71):

$$m \cdot \ddot{x}(t) = -\frac{\partial}{\partial x(t)} V_D(x(t)), \quad (3.70)$$

$$x(0) = x_0 \quad \text{und} \quad \dot{x}(0) = 0. \quad (3.71)$$

Multipliziert man die Newton-Gleichung (3.70) mit der Geschwindigkeit $\dot{x}(t)$ und integriert man über die Zeit t , so gewinnt man den Energieerhaltungssatz. Eine Einarbeitung der Anfangsbedingungen (3.71) bestimmt dabei die zeitlich konstante Gesamtenergie E zu:

$$E = V_D(x_0) = \frac{m}{2} \omega^2 x_0^2 + \frac{g}{x_0^2}. \quad (3.72)$$

Nimmt man im Energieerhaltungssatz eine Separation der Variablen vor, führt dies auf eine elementare Quadratur. Die Auswertung ergibt unter Berücksichtigung von (3.72) die folgende Lösung des zu (3.69) gehörenden Newtonschen Anfangswertproblems:

$$x(t) = \sqrt{x_0^2 \cdot \cos^2(\omega t) + \frac{2g}{m\omega^2 x_0^2} \cdot \sin^2(\omega t)}. \quad (3.73)$$

Wie zu erwarten ist, reduziert sich (3.73) im Grenzfalle $g \rightarrow 0$ auf die Lösung des Newtonschen Anfangswertproblems für den harmonischen Oszillator. Bemerkenswert ist dagegen, daß die Frequenz der zeitlich oszillierenden Lösung (3.73) sowohl von der Anfangsauslenkung x_0 als auch von dem Einfluß der Zentrifugalbarriere, der durch den Parameter g beschrieben wird, unabhängig bleibt. Deshalb ist aufgrund des Bohrschen Korrespondenzprinzips zu vermuten, daß die Energieeigenwerte des zu (3.69) gehörenden quantenmechanischen Systems zumindest für große Quantenzahlen vom Parameter g unabhängig sind (vgl. S. 37).

3.4.2 Die Dirichlet–Propagatoren

Bei den bisherigen Überlegungen wurde vorausgesetzt, daß der Definitionsbereich der Ortskoordinate x mit der gesamten reellen Achse zusammenfällt. Demgegenüber ist beim harmonischen Oszillator mit Zentrifugalbarriere der zugrunde liegende Definitionsbereich auf die positive reelle Achse beschränkt, da der Zentrifugalterm in (3.69) zu einem unendlich hohen Potentialberg an der Stelle $x = 0$ führt.

In der Schrödingerschen Formulierung der Quantenmechanik wird ein solches Problem dadurch berücksichtigt, daß die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ an der Stelle $x = 0$ verschwinden soll. Damit liegt an der Stelle $x = 0$ eine Randbedingung vor, wie sie erstmals von Peter Gustav Dirichlet (1805–1859) im Bereich der Potentialtheorie näher untersucht worden ist:

$$\psi(0, t) = 0 \quad \text{für alle } t. \quad (3.74)$$

Die Lösung des durch (3.16) und (3.74) definierten Schrödingerschen Anfangs- und Randwertproblems läßt sich mit Hilfe des **Dirichlet–Propagators** $G_D(x, t; x_0, t_0)$ angeben:

$$\psi(x, t) = \int_0^{+\infty} G_D(x, t; x_0, t_0) \cdot \psi_0(x_0, t_0) dx_0. \quad (3.75)$$

Analog zu (3.31) genügt der Dirichlet–Propagator $G_D(x, t; x_0, t_0)$ einer Gruppeneigenschaft auf dem zugrunde liegenden Definitionsbereich $[0, +\infty)$:

$$G_D(x_3, t_3; x_1, t_1) = \int_0^{+\infty} G_D(x_3, t_3; x_2, t_2) \cdot G_D(x_2, t_2; x_1, t_1) dx_2. \quad (3.76)$$

Deren iterative Anwendung ermöglicht eine Pfadintegraldarstellung für den Dirichlet–Propagator $G_D(x, t; x_0, t_0)$. Sie dient als Ausgangspunkt für die Behandlung des Problems (3.69) in der Feynmanschen Formulierung der Quantenmechanik:

$$G_D(x, t; x_0, t_0) = \lim_{\epsilon} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_0^{+\infty} dx_n \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) \right\}. \quad (3.77)$$

Nach (3.77) wird die Berechnung des **Dirichlet–Langzeitpropagators** $G_D(x, t; x_0, t_0)$ auf die Bestimmung der **Dirichlet–Kurzzeitpropagatoren** $G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ zurückgeführt. Deshalb wird letzterer in den folgenden drei Abschnitten näher untersucht.

3.4.3 Das Spiegelungsprinzip

Ein quantenmechanisches Dirichlet–Problem sei ganz allgemein durch

$$V_D = V_D(x) \quad \text{mit} \quad x \in [0, +\infty) \quad (3.78)$$

gegeben. Seine Dynamik wird dann durch einen Dirichlet–Propagator $G_D(x, t; x_0, t_0)$ bestimmt, der nun berechnet werden soll.

Hierzu spiegelt man das Dirichlet–Potential V_D an der Achse $x = 0$, so daß ein auf der ganzen reellen Achse definiertes, gerades Potential V entsteht:

$$V = V(x) = \begin{cases} V_D(x) & ; \quad x \in [0, +\infty) \\ V_D(-x) & ; \quad x \in (-\infty, 0] \end{cases}. \quad (3.79)$$

Es wird angenommen, daß sich der Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ zum Potential V mit Hilfe der Methoden des Abschnittes 3.2 berechnen läßt.

Das sogenannte **Spiegelungsprinzip** [21, 24, 38] ermöglicht es, den gesuchten Dirichlet–Propagator $G_D(x, t; x_0, t_0)$ zum Dirichlet–Potential V_D aus dem als bekannt angenommenen Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ zu berechnen:

$$G_D(x, t; x_0, t_0) = G(x, t; x_0, t_0) - G(-x, t; x_0, t_0). \quad (3.80)$$

Hierbei ist aus (3.80) ersichtlich, daß der Dirichlet–Propagator $G_D(x, t; x_0, t_0)$ die Dirichlet–Bedingung (3.74) der Schrödingerschen Quantenmechanik an der Stelle $x = 0$ erfüllt:

$$G_D(0, t; x_0, t_0) = 0 \quad \text{für alle } t. \quad (3.81)$$

3.4.4 Die Anwendung des Spiegelungsprinzips

Das Spiegelungsprinzip wird dazu verwendet, den für das Pfadintegral in (3.77) benötigten Dirichlet–Kurzzeitpropagator $G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ zum Dirichlet–Potential V_D zu berechnen. Hierzu muß zunächst der Kurzzeitpropagator $G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ betrachtet werden. Er ergibt sich aus (3.46) und (3.51) zu:

$$G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2i \hbar \epsilon} (x_{n+1} - x_n)^2 \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon V(x_n) \right\}. \quad (3.82)$$

Setzt man diesen Kurzzeitpropagator $G(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ in das Spiegelungsprinzip (3.80) ein, so lautet der Dirichlet–Kurzzeitpropagator $G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ unter Berücksichtigung von (3.79):

$$\begin{aligned}
 G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \cdot \exp \left\{ +i \frac{m}{2\hbar \epsilon} (x_n^2 + x_{n+1}^2) \right\} \\
 &\cdot \left[\exp \left\{ +\frac{m}{i\hbar \epsilon} x_n x_{n+1} \right\} - \exp \left\{ -\frac{m}{i\hbar \epsilon} x_n x_{n+1} \right\} \right] \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon V_D(x_n) \right\}. \quad (3.83)
 \end{aligned}$$

In (3.83) kann eine vereinfachende Schreibweise eingeführt werden. Hierzu wird die modifizierte Besselsche Funktion erster Gattung der Ordnung $\nu = \frac{1}{2}$ verwendet:

$$I_{\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cdot \sinh x. \quad (3.84)$$

Mit (3.84) geht (3.83) über in

$$\begin{aligned}
 G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) &= \frac{m}{i\hbar \epsilon} \cdot \sqrt{x_n x_{n+1}} \cdot \exp \left\{ i \frac{m}{2\hbar \epsilon} (x_n^2 + x_{n+1}^2) \right\} \\
 &\cdot I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{m}{i\hbar \epsilon} x_n x_{n+1} \right) \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon V_D(x_n) \right\}. \quad (3.85)
 \end{aligned}$$

3.4.5 Die Anwendung des Satzes über Kurzzeitpropagatoren

In diesem Abschnitt soll untersucht werden, wie sich eine Zentrifugalbarriere auf den Dirichlet–Kurzzeitpropagator $G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ auswirkt. Hierzu wird im Hinblick auf (3.69) angenommen, daß sich das Dirichlet–Potential V_D aus einer Zentrifugalbarriere und einem Restpotential V_R zusammensetzt:

$$V_D = V_D(x) = V_R(x) + \frac{g}{x^2} \quad \text{für } x \in [0, +\infty). \quad (3.86)$$

Diese Spezialisierung bewirkt in (3.85):

$$\begin{aligned}
 G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) &= \frac{m}{i\hbar \epsilon} \cdot \sqrt{x_n x_{n+1}} \cdot \exp \left\{ i \frac{m}{2\hbar \epsilon} (x_n^2 + x_{n+1}^2) \right\} \\
 &\cdot I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{m}{i\hbar \epsilon} x_n x_{n+1} \right) \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon \frac{g}{x_n^2} \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon V_R(x_n) \right\}. \quad (3.87)
 \end{aligned}$$

Der ursprünglich für (3.37) formulierte Satz über Kurzzeitpropagatoren läßt sich auch auf das Pfadintegral (3.77) übertragen. Danach sind im Dirichlet–Kurzzeitpropagator $G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ nur Terme bis zur ersten Ordnung in ϵ relevant. Da im Grenzwertprozeß $\epsilon \rightarrow 0$ das Argument der modifizierten Besselfunktion erster Gattung $I_{\frac{1}{2}}$ in (3.87) gegen unendlich geht, benötigt man deren asymptotisches Verhalten für große Argumente. Nach [25, S. 345] gilt allgemein für eine beliebige Ordnung ν :

$$I_\nu(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi x}} \cdot \exp \left\{ x - \frac{1}{2} \left(\nu^2 - \frac{1}{4} \right) \frac{1}{x} + O\left(\frac{1}{x}\right) \right\} \quad \text{für } x \rightarrow +\infty. \quad (3.88)$$

Mit Hilfe dieses asymptotisches Verhalten kann man in (3.87) den Satz über Kurzzeitpropagatoren anwenden. Man erhält dadurch einen zu $G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0)$ äquivalenten Dirichlet–Kurzzeitpropagator:

$$\begin{aligned}
 G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) &\approx \frac{m}{i\hbar\epsilon} \cdot \sqrt{x_n x_{n+1}} \cdot \exp \left\{ i \frac{m}{2\hbar\epsilon} (x_n^2 + x_{n+1}^2) \right\} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{m}{i\hbar\epsilon} x_n x_{n+1}}} \\
 &\cdot \exp \left\{ + \frac{m}{i\hbar\epsilon} x_n x_{n+1} \right\} \cdot \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \epsilon \frac{g}{x_n^2} \right\} \cdot \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \epsilon V_R(x_n) \right\}. \quad (3.89)
 \end{aligned}$$

Da die potentielle Energie in (3.89) mit ϵ multipliziert wird, spielt es für die Terme bis zur ersten Ordnung in ϵ keine Rolle, an welcher Stelle des Intervalles $[x_n, x_{n+1}]$ das Potential im Kurzzeitpropagator ausgewertet wird. Dies ermöglicht es, im Zentrifugalterm von (3.89) eine bis zur ersten Ordnung in ϵ korrekte Symmetrisierung in x_n und x_{n+1} vorzunehmen:

$$\begin{aligned}
 G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) &\approx \frac{m}{i\hbar\epsilon} \cdot \sqrt{x_n x_{n+1}} \cdot \exp \left\{ i \frac{m}{2\hbar\epsilon} (x_n^2 + x_{n+1}^2) \right\} \cdot \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{m}{i\hbar\epsilon} x_n x_{n+1}}} \right. \\
 &\cdot \exp \left\{ + \frac{m}{i\hbar\epsilon} x_n x_{n+1} \right\} \cdot \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \epsilon \frac{g}{x_n x_{n+1}} \right\} \left. \right] \cdot \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \epsilon V_R(x_n) \right\}. \quad (3.90)
 \end{aligned}$$

Der in (3.90) auftretende Klammersausdruck kann unter Berücksichtigung von (3.88) als asymptotisches Verhalten einer modifizierten Besselfunktion erster Gattung mit der Ordnung

$$\nu = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{1 + \frac{8m}{\hbar^2} g} \quad (3.91)$$

interpretiert werden. Damit führt eine weitere Anwendung des Satzes über Kurzzeitpropagatoren zu:

$$\begin{aligned}
 G_D(x_{n+1}, \epsilon; x_n, 0) &\approx \frac{m}{i\hbar\epsilon} \cdot \sqrt{x_n x_{n+1}} \cdot \exp \left\{ i \frac{m}{2\hbar\epsilon} (x_n^2 + x_{n+1}^2) \right\} \\
 &\cdot I_\nu \left(\frac{m}{i\hbar\epsilon} x_n x_{n+1} \right) \cdot \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \epsilon V_R(x_n) \right\}, \quad (3.92)
 \end{aligned}$$

wobei die Ordnung ν durch (3.91) gegeben ist. Der Vergleich von (3.87) und (3.92) zeigt, daß sich eine Zentrifugalbarriere im Potential letztendlich auf die Ordnung der modifizierten Besselfunktion erster Gattung auswirkt:

$$V_D(x) = V_R(x) + \frac{g}{x^2} \implies V_R(x) \quad \equiv \quad I_{\frac{1}{2}} \implies I_{\frac{1}{2}} \cdot \sqrt{1 + \frac{8m}{\hbar^2} g}. \quad (3.93)$$

3.4.6 Der Dirichlet–Langzeitpropagator

Im Falle des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere in (3.69) muß das Restpotential V_R in (3.86) für den harmonischen Oszillator spezialisiert werden:

$$V_R = V_R(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad \text{für} \quad x \in [0, +\infty). \quad (3.94)$$

Verwendet man (3.92) und (3.94) in der Pfadintegraldarstellung (3.77) für den Dirichlet–Langzeitpropagator $G_D(x, t; x_0, t_0)$, so ist der Grenzwertprozeß

$$G_D(x, t; x_0, t_0) = \lim_{\epsilon} A_{N-1} \quad (3.95)$$

durchzuführen, wobei die Größen A_{N-1} durch

$$A_{N-1} = \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_0^{+\infty} dx_n \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \frac{m}{i\hbar\epsilon} \cdot \sqrt{x_n x_{n+1}} \cdot I_\nu \left(\frac{m}{i\hbar\epsilon} x_n x_{n+1} \right) \right. \\ \left. \cdot \exp \left\{ i \frac{m}{2\hbar\epsilon} \left[x_{n+1}^2 + (1 - \epsilon^2 \omega^2) x_n^2 \right] \right\} \right\} \quad (3.96)$$

gegeben sind. Für deren Berechnung benötigt man eine Integrationsformel, die sich aus den Gleichungen (6.729.1), (6.729.2) und (8.406.1) in [23] ableiten läßt:

$$\int_0^{+\infty} x \exp \{ i\alpha x^2 \} I_\nu \left(\frac{\beta x}{i} \right) I_\nu \left(\frac{\gamma x}{i} \right) dx = \frac{i}{2\alpha} \exp \left\{ -i \frac{\beta^2 + \gamma^2}{4\alpha} \right\} I_\nu \left(\frac{\beta\gamma}{2i\alpha} \right). \quad (3.97)$$

(3.97) besitzt die Eigenschaft, daß das Produkt einer Gaußfunktion mit zwei Besselfunktionen gleicher Ordnung durch einen Integrationsprozeß in das Produkt einer Gaußfunktion mit einer Besselfunktion derselben Ordnung überführt wird. Damit erhält dieser Integrationsprozeß die Funktionenform und verändert nur deren Argumente. Diese Eigenschaft der Integrationsformel (3.97) ermöglicht es, die $N-1$ Integrale in (3.96) rekursiv abzuarbeiten. Mit Hilfe von (3.97) kann gezeigt werden, daß all diese $N-1$ Integrale in (3.96) von der folgenden Form sind:

$$\int_0^{+\infty} dx_n \frac{m}{i\hbar\epsilon} \frac{m}{i\hbar\epsilon_{n-1}} \sqrt{x_n x_{n+1}} \sqrt{x_{n-1} x_n} I_\nu \left(\frac{m}{i\hbar\epsilon} x_n x_{n+1} \right) I_\nu \left(\frac{m}{i\hbar\epsilon_{n-1}} x_{n-1} x_n \right) \\ \cdot \exp \left\{ i \frac{m}{2\hbar\epsilon} \left[x_{n+1}^2 + (1 - \epsilon^2 \omega^2) x_n^2 \right] \right\} \exp \left\{ i \frac{m}{2\hbar\epsilon_{n-1}} \left[a_{n-1} x_{n+1}^2 + b_{n-1} x_n^2 \right] \right\} = \\ = \frac{m}{i\hbar\epsilon_n} \sqrt{x_{n-1} x_{n+1}} I_\nu \left(\frac{m}{i\hbar\epsilon_n} x_{n-1} x_{n+1} \right) \exp \left\{ i \frac{m}{2\hbar\epsilon_n} \left[a_n x_{n+1}^2 + b_n x_{n-1}^2 \right] \right\}. \quad (3.98)$$

Für die Größen ϵ_n , a_n und b_n resultiert eine Rekursionsformel:

$$\begin{aligned} \epsilon_n &= \epsilon_n(\epsilon_{n-1}, a_{n-1}, b_{n-1}) = \epsilon_{n-1}(1 - \epsilon^2 \omega^2) + \epsilon a_{n-1}, \\ a_n &= a_n(\epsilon_{n-1}, a_{n-1}, b_{n-1}) = a_{n-1} - \epsilon \omega^2 \epsilon_{n-1}, \\ b_n &= b_n(\epsilon_{n-1}, a_{n-1}, b_{n-1}) = (1 - \epsilon^2 \omega^2) b_{n-1} + (b_{n-1} a_{n-1} - 1) \frac{\epsilon}{\epsilon_{n-1}}. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Die zu diesen Rekursionsformeln gehörenden Anfangsbedingungen lassen sich aus (3.96) und (3.98) direkt ablesen:

$$\epsilon_0 = \epsilon, \quad a_0 = 1, \quad b_0 = 1. \quad (3.100)$$

Nach $(N-1)$ -facher, iterativer Anwendung von (3.98) erhält man dann die Größen A_{N-1} aus (3.96) mit $x_N = x$ zu:

$$A_{N-1} = \frac{m}{i\hbar\epsilon_{N-1}} \cdot \sqrt{x_0 x} \cdot I_\nu \left(\frac{m}{i\hbar\epsilon_{N-1}} x_0 x \right) \cdot \exp \left\{ i \frac{m}{2\hbar\epsilon_{N-1}} [a_{N-1} x^2 + b_{N-1} x_0^2] \right\}. \quad (3.101)$$

Setzt man (3.101) in den Grenzwertprozeß (3.95) ein, so ergibt sich der gesuchte Dirichlet–Langzeitpropagator:

$$G_D(x, t; x_0, t_0) = \frac{m}{i\hbar\epsilon(t, t_0)} \cdot \sqrt{x_0 x} \cdot I_\nu \left(\frac{m}{i\hbar\epsilon(t, t_0)} x_0 x \right) \cdot \exp \left\{ i \frac{m}{2\hbar\epsilon(t, t_0)} [a(t, t_0) x^2 + b(t, t_0) x_0^2] \right\}. \quad (3.102)$$

Hierbei wurden die folgenden Abkürzungen verwendet:

$$\epsilon(t, t_0) = \lim_{\epsilon} \epsilon_{N-1}, \quad a(t, t_0) = \lim_{\epsilon} a_{N-1}, \quad b(t, t_0) = \lim_{\epsilon} b_{N-1}. \quad (3.103)$$

Im Grenzwertprozeß $\epsilon \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$ und $\epsilon N = t - t_0$ gehen die Rekursionsformeln (3.99) in gewöhnliche Differentialgleichungen für die in (3.103) eingeführten Größen $\epsilon(t, t_0)$, $a(t, t_0)$ und $b(t, t_0)$ über:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \epsilon(t, t_0) &= a(t, t_0), \\ \frac{d}{dt} a(t, t_0) &= -\omega^2 \epsilon(t, t_0), \\ \frac{d}{dt} b(t, t_0) &= \frac{b(t, t_0) a(t, t_0) - 1}{\epsilon(t, t_0)}. \end{aligned} \quad (3.104)$$

Die Anfangsbedingungen (3.100) führen zu:

$$\epsilon(t, t_0) = 0, \quad a(t, t_0) = 1, \quad b(t, t_0) = 1. \quad (3.105)$$

Die Lösung des durch (3.104) und (3.105) eindeutig bestimmten Anfangswertproblems lautet:

$$\epsilon(t, t_0) = \frac{1}{\omega} \sin[\omega(t - t_0)], \quad a(t, t_0) = b(t, t_0) = \cos[\omega(t - t_0)]. \quad (3.106)$$

Aus (3.91), (3.102) und (3.106) resultiert der Dirichlet–Langzeitpropagator $G_D(x, t; x_0, t_0)$ des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere:

$$G_D(x, t; x_0, t_0) = \frac{m\omega}{i\hbar \sin[\omega(t - t_0)]} \cdot \sqrt{x_0 x} \cdot I_\nu \left(\frac{m\omega}{i\hbar \sin[\omega(t - t_0)]} x_0 x \right) \cdot \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2\hbar} \cot[\omega(t - t_0)] (x_0^2 + x^2) \right\} \quad \text{mit} \quad \nu = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{8m}{\hbar^2} g}. \quad (3.107)$$

Dieses Ergebnis stimmt mit dem in [17, 40] abgeleiteten überein.

3.4.7 Die Diskussion des Dirichlet–Langzeitpropagators

Es wird nun nachgeprüft, ob der in (3.107) angegebene Dirichlet–Langzeitpropagator $G_D(x, t; x_0, t_0)$ des quantenmechanischen Systems (3.69) denjenigen Eigenschaften genügt, die für einen Dirichlet–Propagator typisch sind:

1. Die modifizierten Besselfunktionen erster Gattung I_ν besitzen nach den Formeln (8.402) und (8.406.3) in [23] an der Stelle $x = 0$ die folgenden Funktionswerte:

$$I_\nu(0) = \begin{cases} 1 & ; \nu = 0 \\ 0 & ; \nu \in (0, \infty) \end{cases} \quad (3.108)$$

Damit erfüllt $G_D(x, t; x_0, t_0)$ die Dirichlet–Randbedingung (3.81).

2. Beim Grenzübergang $t \rightarrow t_0$ geht der Dirichlet–Langzeitpropagator $G_D(x, t; x_0, t_0)$ aus (3.107) mit Hilfe des asymptotischen Verhaltens (3.88) der modifizierten Besselfunktion erster Gattung I_ν über in:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} G_D(x, t; x_0, t_0) = \lim_{t \rightarrow t_0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t_0)}} \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2i \hbar (t - t_0)} (x - x_0)^2 \right\}. \quad (3.109)$$

Hieraus lassen sich die beiden Eigenschaften

$$G_D(x, t_0; x_0, t_0) = 0 \quad \text{für} \quad x \neq x_0 \quad \text{und} \quad \int_0^{+\infty} G_D(x, t_0; x_0, t_0) dx = 1 \quad (3.110)$$

ablesen, so daß $G_D(x, t; x_0, t_0)$ die Anfangsbedingung (3.28) aufweist.

3. Da $G_D(x, t; x_0, t_0)$ nur eine Funktion der Zeitdifferenz $t - t_0$ ist, liegt eine Homogenität in der Zeit entsprechend (3.21) vor.
4. Die Gruppeneigenschaft (3.76) für $G_D(x, t; x_0, t_0)$ läßt sich durch Verwendung der Integrationsformel (3.97) nachweisen.

Der Dirichlet–Langzeitpropagator $G_D(x, t; x_0, t_0)$ in (3.107) hängt von den beiden Parametern ω und g ab, die den Einfluß des harmonischen Oszillators beziehungsweise der Zentrifugalbarriere charakterisieren. Es werden nun diejenigen Spezialfälle betrachtet, bei denen einer dieser beiden Parameter gegen null geht:

1. Im Grenzübergang $\omega \rightarrow 0$ erhält man nach (3.86) und (3.94) das Dirichlet–Potential des freien Teilchens mit Zentrifugalbarriere:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} V_D(x) = \frac{g}{x^2} \quad \text{für} \quad x \in [0, +\infty). \quad (3.111)$$

Der dazugehörige Dirichlet–Langzeitpropagator resultiert im Grenzübergang $\omega \rightarrow 0$ aus (3.107):

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} G_D(x, t; x_0, t_0) = \frac{m}{i \hbar (t - t_0)} \cdot \sqrt{x_0 x} \cdot I_\nu \left(\frac{m}{i \hbar (t - t_0)} x_0 x \right)$$

$$\cdot \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar(t-t_0)} (x_0^2 + x^2) \right\}. \quad (3.112)$$

Der Vergleich von (3.92) für $V_R \equiv 0$ mit (3.112) zeigt, daß im Falle des freien Teilchens mit Zentrifugalbarriere der **Dirichlet–Kurzzeitpropagator** mit dem **Dirichlet–Langzeitpropagator** zusammenfällt.

2. Im Grenzübergang $g \rightarrow 0$ ergibt sich aus (3.86) und (3.94) der harmonische Oszillator mit Dirichlet–Randbedingung:

$$\lim_{g \rightarrow 0} V_D(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad \text{für } x \in [0, +\infty). \quad (3.113)$$

Derselbe Grenzübergang $g \rightarrow 0$ führt (3.107) in den entsprechenden Dirichlet–Langzeitpropagator über:

$$\begin{aligned} \lim_{g \rightarrow 0} G_D(x, t; x_0, t_0) &= \frac{m\omega}{i\hbar \sin[\omega(t-t_0)]} \cdot \sqrt{x_0 x} I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega}{i\hbar \sin[\omega(t-t_0)]} x_0 x \right) \\ &\cdot \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2\hbar} \cot[\omega(t-t_0)] (x_0^2 + x^2) \right\}. \end{aligned} \quad (3.114)$$

Beachtet man (3.84), so läßt sich der Dirichlet–Langzeitpropagator (3.114) des harmonischen Oszillators mit Dirichlet–Randbedingung mit Hilfe des **Spiegelungsprinzips** (3.80) direkt aus dem Langzeitpropagator (5.127) des harmonischen Oszillators ableiten.

3.4.8 Die Energieeigenwerte

Da das Dirichlet–Potential (3.69) des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere an den Rändern des Definitionsbereiches $[0, +\infty)$ gegen unendlich geht, besitzt dieses quantenmechanische System nur diskrete Energieeigenwerte. Sie lassen sich aus dem dazugehörigen Dirichlet–Langzeitpropagator $G_D(x, t; x_0, t_0)$ in (3.107) berechnen [25, Kapitel 7]. Hierzu setzt man den Anfangsort x_0 gleich dem Endort x und integriert $G_D(x, t; x, t_0)$ über den zugrunde liegenden Definitionsbereich $[0, +\infty)$ der Ortsvariable x . Nimmt man in dem dabei auftretenden Integral die Substitution $y = y(x) = x^2$ vor und benennt die neue Variable y in x um, so führt dies auf:

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} G_D(x, t; x, t_0) dx &= \frac{m\omega}{2i\hbar \sin[\omega(t-t_0)]} \cdot \int_0^{+\infty} I_\nu \left(\frac{m\omega}{i\hbar \sin[\omega(t-t_0)]} x \right) \\ &\cdot \exp \left\{ i \frac{m\omega}{\hbar} \cot[\omega(t-t_0)] x \right\} dx. \end{aligned} \quad (3.115)$$

Das noch verbleibende Integral läßt sich mit Hilfe einer Integrationsformel auswerten, die sich aus den Gleichungen (6.671.1), (6.671.2), (8.406.1) und (1.623.1) in [23] ergibt:

$$\int_0^{+\infty} I_\nu \left(\frac{\alpha x}{i} \right) \cdot \exp \{ i\beta x \} dx = \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}} \cdot \exp \left\{ -i\nu \arccos \frac{\beta}{\alpha} \right\} \quad \text{für } \beta < \alpha. \quad (3.116)$$

(3.115), (3.116) und die Anwendung der Eigenschaften der geometrischen Reihe ergeben dann als Ergebnis der Integration:

$$\int_0^{+\infty} G_D(x, t; x, t_0) dx = \sum_{n=0}^{+\infty} \exp \{-i\omega(2n + \nu + 1)t\}. \quad (3.117)$$

Nach [25, Kapitel 7] lassen sich hieraus direkt die diskreten Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere ablesen. Beachtet man den in (3.91) bestimmten Ausdruck für die Ordnung ν der modifizierten Besselfunktion erster Gattung I_ν , so gilt:

$$E_n = \hbar\omega \cdot \left(2n + 1 + \frac{1}{2} \cdot \sqrt{1 + \frac{8m}{\hbar^2} g} \right). \quad (3.118)$$

Das Energiespektrum erweist sich als äquidistant, wobei der Abstand $\Delta E_n = 2\hbar\omega$ zwischen zwei benachbarten Energieniveaus nur von der Frequenz ω des harmonischen Oszillators und nicht vom Parameter g der Zentrifugalbarriere abhängt. Dieses Ergebnis stimmt mit den Überlegungen zum Bohrschen Korrespondenzprinzip in Abschnitt 3.4.1 überein.

Der Einfluß der Zentrifugalbarriere auf das Energiespektrum besteht darin, daß sie eine Modifikation der Nullpunktsenergie bewirkt. Vernachlässigt man die Zentrifugalbarriere, so erhält man im Grenzübergang $g \rightarrow 0$ aus (3.118) die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators mit einer Dirichlet-Randbedingung an der Stelle $x = 0$:

$$\lim_{g \rightarrow 0} E_n = \hbar\omega \cdot (2n + 1). \quad (3.119)$$

Diese Energieeigenwerte stimmen mit denen des harmonischen Oszillators für die ungeraden Quantenzahlen überein, da durch die Hinzunahme der Dirichlet-Randbedingung an der Stelle $x = 0$ die Energieeigenfunktionen des harmonischen Oszillators mit den geraden Quantenzahlen entfallen.

3.4.9 Die Energieeigenfunktionen

Es sollen nun die Energieeigenfunktionen des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere aus dem in (3.107) angegebenen Dirichlet-Langzeitpropagator berechnet werden. Hierzu muß man versuchen, $G_D(x, t; x_0, t_0)$ aufgrund der Kenntnis der Energieeigenwerte (3.118) in seine Spektraldarstellung zu zerlegen. Einige vorbereitende Umformungen führen (3.107) zunächst über in:

$$\begin{aligned} G_D(x, t; x_0, t_0) &= \sqrt{2 \frac{m\omega}{\hbar} x_0} \cdot \sqrt{2 \frac{m\omega}{\hbar} x} \cdot \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} x_0^2 - \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right\} \cdot \exp \{-i\omega(t - t_0)\} \\ &\cdot \left[\frac{1}{1 - \exp \{-2i\omega(t - t_0)\}} \cdot \exp \left\{ -\left(\frac{m\omega}{2\hbar} x_0^2 + \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) \cdot \frac{\exp \{-2i\omega(t - t_0)\}}{1 - \exp \{-2i\omega(t - t_0)\}} \right\} \right] \\ &\cdot I_\nu \left(2 \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar} x_0^2} \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar} x^2} \cdot \frac{\sqrt{\exp \{-2i\omega(t - t_0)\}}}{1 - \exp \{-2i\omega(t - t_0)\}} \right). \end{aligned} \quad (3.120)$$

Die Formel (8.976.1) in [23] ermöglicht es, den in (3.120) auftretenden Klammerausdruck in eine Reihe zu zerlegen:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{1-z} \cdot \exp \left\{ -(x+y) \cdot \frac{z}{1-z} \right\} \cdot I_\nu \left(2 \cdot \frac{\sqrt{xyz}}{1-z} \right) = \\ & = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+\nu+1)} \cdot (xyz)^{\frac{1}{2}\nu} \cdot L_n^{(\nu)}(x) \cdot L_n^{(\nu)}(y) \cdot z^n. \end{aligned} \quad (3.121)$$

$L_n^{(\nu)}$ sind hierbei die verallgemeinerten Laguerre–Polynome.

(3.120) und (3.121) ergeben durch Vergleich mit der Spektraldarstellung (3.26) von Propagatoren die folgenden Energieeigenfunktionen für den harmonischen Oszillator mit Zentrifugalbarriere:

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2 \cdot \Gamma(n+1)}{\Gamma(n+\nu+1)} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\nu+1}} \cdot x^{\nu+\frac{1}{2}} \cdot L_n^{(\nu)} \left(\frac{m\omega}{\hbar} x^2 \right) \cdot \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right\}, \\ & \text{mit } \nu = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{1 + \frac{8m}{\hbar^2} g}. \end{aligned} \quad (3.122)$$

Vernachlässigt man die Zentrifugalbarriere durch den Grenzübergang $g \rightarrow 0$ und beachtet man die Gleichung (8.892.3) in [23] sowie die Eigenschaft $\Gamma(1+x) = x \cdot \Gamma(x)$ der Gammafunktion, so geht (3.122) über in:

$$\begin{aligned} \lim_{g \rightarrow 0} \psi_n(x) &= (-1)^n \cdot \sqrt{2} \cdot \sqrt{\frac{1}{2^{2n+1}(2n+1)!}} \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \\ & \cdot H_{2n+1} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \cdot \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.123)$$

Bis auf den irrelevanten Phasenfaktor $(-1)^n$ sind dies gerade die Energieeigenfunktionen des harmonischen Oszillators mit der Dirichlet–Randbedingung an der Stelle $x = 0$.

Kapitel 4

Der Propagator der Fokker–Planck–Gleichung

4.1 Die Motivation

Die Fokker–Planck–Gleichung für stetige homogene Markov–Prozesse besitzt eine ähnliche mathematische Struktur wie die Schrödinger–Gleichung der Quantenmechanik. Deshalb läßt sich analog zum Schrödinger–Propagator des vorherigen Kapitels ein sogenannter Fokker–Planck–Propagator einführen, der zur Fokker–Planck–Gleichung mathematisch äquivalent ist. Darüber hinaus wird eine Lösungsstrategie entwickelt, mit deren Hilfe die Fokker–Planck–Propagatoren stochastischer Prozesse mit multiplikativem Rauschen durch Transformationen aus entsprechenden quantenmechanischen Propagatoren berechnet werden können. Ein nichttriviales Beispiel illustriert am Ende des Kapitels diese Lösungsstrategie.

4.2 Das Fokker–Planck–Anfangs- und Randwertproblem

In der Wahrscheinlichkeitstheorie wird der stochastische Prozeß für einen Zufallsvektor $\vec{x}(t)$ durch die Wahrscheinlichkeitsdichte $f(\vec{x}, t)$ beschrieben. Für einen **homogenen Markov–Prozeß** genügt diese Wahrscheinlichkeitsdichte nach der **Kramers–Moyal–Entwicklung** einer linearen partiellen Differentialgleichung [51, S. 21]. Das **Pawula–Theorem** legt es nahe, hierbei speziell diejenigen **stetigen** homogenen Markov–Prozesse zu betrachten, bei denen die Kramers–Moyal–Entwicklung exakt nach dem zweiten Term abbricht [47, S. 70]. Die so entstehende **Fokker–Planck–Gleichung** lautet im **eindimensionalen** Fall:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) = \hat{L}(x) f(x, t). \quad (4.1)$$

Der in (4.1) auftretende **Fokker–Planck–Operator** \hat{L} ist ein linearer Differentialoperator zweiter Ordnung in der Variablen x und enthält als einzige Kramers–Moyal–Koeffizienten den **Driftkoeffizienten** K sowie den **Diffusionskoeffizienten** D :

$$\hat{L}(x) \bullet = -\frac{\partial}{\partial x} \{K(x) \bullet\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \{D(x) \bullet\}. \quad (4.2)$$

Damit die Lösung der durch (4.1) und (4.2) gegebenen Fokker-Planck-Gleichung eindeutig bestimmt ist, muß man noch zusätzlich die **Anfangsbedingung**

$$f(x_0, t_0) = f_0(x_0, t_0) \quad (4.3)$$

und die **Randbedingungen**

$$f(x, t) = 0 \text{ für } x \in \partial I \text{ und } I \subset (-\infty, +\infty), \quad (4.4)$$

$$\int_I x^n \cdot f(x, t) dx < +\infty \text{ für alle } t \geq t_0 \text{ und für alle } n \quad (4.5)$$

fordern. Dabei legen diese Randbedingungen den zugrunde liegenden Funktionenraum fest.

Der zum Fokker-Planck-Operator \hat{L} **adjungierte Fokker-Planck-Operator** \hat{L}^\dagger ist definiert durch

$$\int_I g(x) \cdot \{\hat{L}(x)h(x)\} dx = \int_I \{\hat{L}^\dagger(x)g(x)\} \cdot h(x) dx \text{ für alle } g \text{ und } h. \quad (4.6)$$

Setzt man (4.2) in (4.6) ein und führt man partielle Integrationen unter Beachtung der Randbedingung (4.4) durch, so erweist sich der adjungierte Fokker-Planck-Operator \hat{L}^\dagger ebenfalls als ein linearer Differentialoperator zweiter Ordnung in der Variablen x :

$$\hat{L}^\dagger(x) \bullet = K(x) \frac{\partial}{\partial x} \bullet + \frac{1}{2} D(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \bullet. \quad (4.7)$$

Der Vergleich von (4.2) mit (4.7) zeigt, daß der Fokker-Planck-Operator \hat{L} nicht selbstadjungiert ist:

$$\hat{L} \neq \hat{L}^\dagger. \quad (4.8)$$

Deshalb erweist es sich als notwendig, die Eigenwertprobleme zu beiden Operatoren \hat{L} und \hat{L}^\dagger zu betrachten:

$$\hat{L} f_n(x) = -\lambda_n f_n(x) \text{ mit } f_n(x) = 0 \text{ für } x \in \partial I, \quad (4.9)$$

$$\hat{L}^\dagger f_n^\dagger(x) = -\lambda_n^\dagger f_n^\dagger(x) \text{ mit } f_n^\dagger(x) = 0 \text{ für } x \in \partial I. \quad (4.10)$$

Nach [47, Kapitel 7] besitzen dabei die Eigenwerte $\lambda_n, \lambda_n^\dagger$ und die Eigenfunktionen f_n, f_n^\dagger die folgenden Eigenschaften:

1. Die Eigenwerte λ_n und λ_n^\dagger sind reell:

$$(\lambda_n)^* = \lambda_n \text{ und } (\lambda_n^\dagger)^* = \lambda_n^\dagger. \quad (4.11)$$

2. Jeder Eigenwert von \hat{L} ist auch ein Eigenwert von \hat{L}^\dagger und umgekehrt. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit gilt daher:

$$\lambda_n = \lambda_n^\dagger. \quad (4.12)$$

3. f_n und f_n^\dagger bilden einen biorthonormalen Satz von Eigenfunktionen:

$$\int_I f_n^\dagger(x) \cdot f_m(x) dx = \delta(n - m). \quad (4.13)$$

Diese Orthonormalitätsrelation dient im Spezialfall $n = m$ zur Normierung des Produktes $f_n^\dagger \cdot f_n$. Da die dabei auftretende Normierungskonstante wahlweise auf beide Faktoren verteilt werden kann, sind die Eigenfunktionen f_n und f_n^\dagger jeweils nur bis auf einen konstanten, eventuell von n abhängigen Faktor eindeutig bestimmt.

4. Der biorthonormale Satz von Eigenfunktionen erfüllt die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_n f_n^\dagger(x) \cdot f_n(x') = \delta(x - x'). \quad (4.14)$$

5. Ein Eigenwert ist immer null:

$$\lambda_0 = 0. \quad (4.15)$$

6. Die Eigenfunktionen f_0 und f_0^\dagger zu diesem Eigenwert $\lambda_0 = 0$ lauten:

$$f_0(x) = f_{st}(x) \quad \text{und} \quad f_0^\dagger(x) = 1. \quad (4.16)$$

Hierbei bezeichnet f_{st} die **stationäre Lösung** der Fokker-Planck-Gleichung (4.1).

In [47, Kapitel 7] wird eine formale Lösung des durch (4.1) bis (4.5) eindeutig gestellten Fokker-Planck-Anfangs- und Randwertproblems abgeleitet. Entsprechend der Linearität des Fokker-Planck-Operators \hat{L} hängt die Lösung f über eine einfache Integration linear von der Anfangsverteilung f_0 ab:

$$f(x, t) = \int_I G_F(x, t; x_0, t_0) \cdot f_0(x_0, t_0) dx_0. \quad (4.17)$$

Der dabei auftretende Integrand $G_F(x, t; x_0, t_0)$ wird als **Fokker-Planck-Propagator** bezeichnet. Für ihn erhält man eine Spektraldarstellung, in der die Spektraldaten $\lambda_n, f_n, f_n^\dagger$ der beiden Operatoren \hat{L} und \hat{L}^\dagger eingehen:

$$G_F(x, t; x_0, t_0) = \sum_n f_n(x) \cdot \exp\{-\lambda_n(t - t_0)\} \cdot f_n^\dagger(x_0). \quad (4.18)$$

Bei den meisten Anwendungsbeispielen ist nun gewährleistet, daß die Eigenwerte des Fokker-Planck-Operators \hat{L} nicht negativ sind:

$$\lambda_n \geq 0 \quad \text{für alle } n. \quad (4.19)$$

Unter der Voraussetzung (4.19) bewirkt ein Grenzübergang für große Zeiten t in der Spektraldarstellung (4.18), daß nur der Beitrag des dann tiefsten Eigenwertes $\lambda_0 = 0$ bestehen bleibt. Berücksichtigt man (4.16), so läßt sich mit Hilfe dieses Grenzüberganges die stationäre Lösung f_{st} der Fokker-Planck-Gleichung (4.1) aus dem Fokker-Planck-Propagator ableiten:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} G_F(x, t; x_0, t_0) = f_{st}(x) \quad \text{für } t > t_0. \quad (4.20)$$

Das Schrödinger- sowie das Fokker-Planck-Anfangs- und Randwertproblem besitzen aufgrund der **Linearität** der zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen dieselbe formale Lösungsstruktur. In beiden Fällen wird die zeitliche Entwicklung der jeweils betrachteten Funktion durch einen entsprechenden Propagator bestimmt. Neben dieser auffälligen Gemeinsamkeit treten aber auch bedeutende Unterschiede zutage.

Der Hamiltonoperator \hat{H} der Schrödinger-Gleichung ist im Hilbertraum der komplexwertigen, quadratintegriblen Funktionen hermitesch, so daß dessen Eigenfunktionen als orthonormierte, vollständige Basisfunktionen verwendet werden können. Darüber hinaus bewirkt diese Selbstadjungiertheit des Hamiltonoperators \hat{H} , daß die Lösungen des Schrödinger-Anfangs- und Randwertproblems zeitumkehrinvariant sind und damit die Eigenschaft

$$\psi_S(x, -t) = \psi_S^*(x, t) \quad (4.21)$$

aufweisen. Auf der Beschreibungsebene der Propagatoren führt dies dazu, daß man für den Schrödinger-Propagator G_S aus dessen Spektraldarstellung die folgende Symmetrierelation ableiten kann:

$$G_S(x, t; x_0, t_0) = G_S(x_0, t_0; x, t)^*. \quad (4.22)$$

Demgegenüber ist der Fokker-Planck-Operator \hat{L} nach (4.8) im Hilbertraum der reellwertigen, quadratintegriblen Funktionen nicht selbstadjungiert. Dies führt zum einen dazu, daß als Basisfunktionen der vollständige, biorthonormale Satz von Eigenfunktionen zu den Operatoren \hat{L} und \hat{L}^\dagger verwendet werden muß. Ferner gibt es wegen der nicht vorhandenen Selbstadjungiertheit des Fokker-Planck-Operators \hat{L} keine Analoga zu (4.21) und (4.22) für die Wahrscheinlichkeitsdichte f und den Fokker-Planck-Propagator G_F .

4.3 Der Zusammenhang zwischen Langevin- und Fokker-Planck-Gleichung

Im vorangegangenen Abschnitt stand eine besondere Klasse von homogenen kontinuierlichen Markov-Prozessen für die Zufallsvariable $x(t)$ im Mittelpunkt der Betrachtungen. Es wurde vorausgesetzt, daß die lineare **partielle Differentialgleichung** der Kramers-Moyal-Entwicklung für die Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x, t)$ exakt nach dem zweiten Term abbricht und so in eine Fokker-Planck-Gleichung übergeht. Für diese Klasse von stochastischen Prozessen kann nun eine weitere, dazu vollständig äquivalente Charakterisierung

gewonnen werden.

Hierzu sei $F(t)$ die Zufallsvariable eines Wiener-Prozesses [51, S. 20], der durch die Vorgabe der ersten beiden Kumulanten gemäß

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle F(t)F(t') \rangle = \delta(t - t') \quad (4.23)$$

eindeutig festgelegt ist. Es handelt sich um einen **delta-korrelierten Gauß-Prozeß mit verschwindendem ersten Moment**.

Diejenigen homogenen Markov-Prozesse der Zufallsvariablen $x(t)$, für die die Kramers-Moyal-Entwicklung nach dem zweiten Term abbricht, lassen sich nun durch eine Abbildung aus dem in (4.23) vorgegebenen Gauß-Prozeß für die Zufallsvariable $F(t)$ gewinnen:

$$\text{Zufallsvariable } F(t) \quad \xrightarrow{\text{Abbildung}} \quad \text{Zufallsvariable } x(t). \quad (4.24)$$

Diese Abbildung wird durch eine im allgemeinen nichtlineare **gewöhnliche Differentialgleichung** für die Zufallsvariable $x(t)$ realisiert, bei der die Zufallsvariable $F(t)$ eine stochastische Inhomogenität erzeugt. Die nach Paul Langevin (1872–1946) benannte Gleichung lautet:

$$\frac{d}{dt} x(t) = N(x(t)) + \sqrt{Q} \cdot B(x(t)) \cdot F(t). \quad (4.25)$$

Der deterministische Teil der stochastischen Differentialgleichung wird durch die nichtlineare Funktion $N = N(x)$ modelliert. $B = B(x)$ legt dagegen den Einfluß der Zufallsvariablen $F(t)$ auf die stochastische Dynamik der Zufallsvariablen $x(t)$ fest und wird daher als **Rauschstärke** bezeichnet. Es können zwei unterschiedliche Rauschprozesse auftreten:

1. Ist die Rauschstärke von der Zufallsvariablen x unabhängig, so liegt **additives Rauschen** vor. Es tritt häufig in einer phänomenologischen Theorie auf, bei der man zu der deterministischen Evolutionsgleichung für die makroskopische Variable x noch einen stochastischen Term hinzufügt, der die Unkenntnis über die vielen internen mikroskopischen Freiheitsgrade modellhaft beschreiben soll.
2. Hängt dagegen die Rauschstärke von der Zufallsvariablen x ab, so spricht man vom **multiplikativen Rauschen**. Es entsteht in der Regel durch die adiabatische Elimination schneller Variablen und kommt daher häufig in solchen Langevin-Gleichungen vor, die stochastische Ordnungsparametergleichungen darstellen.

Die beiden Gleichungen (4.23) und (4.25) führen nun jedoch nicht zu einer eindeutigen Definition der in (4.24) angestrebten Abbildung zwischen der einen Zufallsvariablen $F(t)$ und der anderen Zufallsvariablen $x(t)$. Da die Korrelationszeit von $F(t)$ verschwindet, ist bei einer diskreten Formulierung der Langevin - Gleichung (4.25) nicht festgelegt, zu welcher Zeit die Zufallsvariable $x(t)$ im Argument der Rauschstärke abzugreifen ist. Bei einer Unterteilung des Zeitintervalles $[t_0, t]$ in die N Teilintervalle $[t_n, t_{n+1}]$ mit $n = 0, 1, \dots, N - 1$ gibt es deshalb ein einparametriges Kontinuum von diskreten Versionen der Langevin-Gleichung (4.25), das sich durch den Parameter $\alpha \in [0, 1]$ charakterisieren läßt:

$$\frac{x(t_{n+1}) - x(t_n)}{t_{n+1} - t_n} = N(x(t_n)) + \sqrt{Q} \cdot B(\alpha \cdot x(t_n) + (1 - \alpha) \cdot x(t_{n+1})) \cdot F(t_n). \quad (4.26)$$

Zwischen der Lösung $x(t)$ der diskreten Formulierung (4.26) der **Langevin-Gleichung** im Grenzübergang unendlich vieler Teilintervalle und der Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x, t)$, die einer **Fokker-Planck-Gleichung** genügt, besteht ein eindeutiger Zusammenhang. Er lautet nach [31, (6.78)]:

$$f(x, t) = \langle \delta(x - x(t)) \rangle. \quad (4.27)$$

Dabei gewinnt man die folgenden Beziehungen zwischen dem deterministischen Teil $N(x)$ und der Rauschstärke $B(x)$ der Langevin-Gleichung sowie dem Driftkoeffizienten $K(x)$ und dem Diffusionskoeffizienten $D(x)$ der Fokker-Planck-Gleichung:

$$K(x) = N(x) + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\alpha}{2} \cdot Q \cdot B(x)^2 \right\} \quad \text{und} \quad D(x) = Q \cdot B(x)^2. \quad (4.28)$$

Die Eindeutigkeit der Abbildung zwischen der Zufallsvariablen $F(t)$ und der Zufallsvariablen $x(t)$ wird damit nur im Falle eines multiplikativen Rauschens zerstört. Beim Übergang von der Langevin-Gleichung (4.25) auf die Fokker-Planck-Gleichung (4.1) wirkt sich dies auf den Driftkoeffizienten $K(x)$ dadurch aus, daß der zusätzliche Parameter α dort auftritt. Welche Wahl von α dabei den physikalisch richtigen Driftkoeffizienten $K(x)$ liefert, kann wegen des delta-korrelierten Rauschens der Zufallsvariablen $F(t)$ nicht von vorneherein entschieden werden. Zur Festlegung von α darf man die Langevin-Gleichung (4.25) nicht einfach von einem phänomenologischen Standpunkt aus postulieren, sondern man muß sie eigentlich aus einer rein mikroskopischen Betrachtungsweise ableiten. Dennoch kommen aus rein phänomenologischer Sicht zwei verschiedenen Spezialfällen des Parameter α eine besondere Bedeutung zu.

Im **Itô-Kalkül** wird durch die Wahl $\alpha = 0$ gewährleistet, daß der Driftkoeffizient $K(x)$ von der Rauschstärke $B(x)$ unabhängig wird. Neben einer rein rechnerischen Vereinfachung führt dies darüber hinaus dazu, daß der deterministische Teil der stochastischen Dynamik von $x(t)$ auf den beiden Beschreibungsebenen der Langevin- und der Fokker-Planck-Gleichung alleine durch die Funktion $N = N(x)$ beschrieben wird.

Demgegenüber wird im **Stratonovich-Kalkül** die folgende physikalische Überlegung angestellt. Bei einem Gauß-Prozeß mit einer endlichen Korrelationszeit T für die Zufallsvariable $F(t)$ erweist sich der Übergang von der Langevin-Gleichung (4.25) zur Fokker-Planck-Gleichung (4.1) als eindeutig. Betrachtet man daraufhin den Grenzübergang $T \rightarrow 0$ einer verschwindenden Korrelationszeit, so wird man ganz automatisch auf die Wahl $\alpha = \frac{1}{2}$ in Gleichung (4.28) geführt [32, S. 210].

4.4 Die Transformation einer Fokker-Planck-Gleichung für multiplikatives Rauschen in eine für additives Rauschen

Bei multiplikativen Rauschprozessen wird von nun an generell das Stratonovich-Kalkül allen anderen, ebenfalls möglichen Interpretationen einer Langevin-Gleichung mit delta-korrelierter Rauschkraft $F(t)$ vorgezogen. Das Stratonovich-Kalkül erweist sich dabei nicht nur wegen der physikalischen Überlegung am Ende des vorangegangenen Abschnittes als besonders günstig. Ein weiterer, analytischer Vorteil besteht nämlich darin, daß bei einer nicht explizit von der Zeit abhängigen **Transformation der Zufallsvariablen** zwischen den entsprechenden Langevin- und Fokker-Planck-Gleichungen eine **Kommutativität** im Sinne von Abb. 4.1 vorliegt [20]:

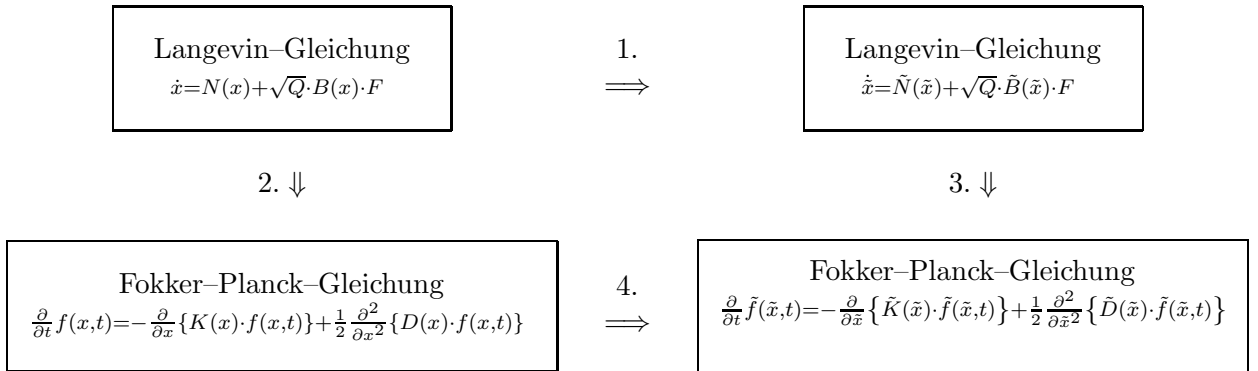


Abbildung 4.1: Eine Transformation der Zufallsvariablen führt zu einer Kommutativität zwischen den entsprechenden Langevin- und Fokker-Planck-Gleichungen, falls die Stratonovich-Interpretation verwendet wird.

1. Die Transformation $x = h(\tilde{x})$ der Zufallsvariablen bildet die vorgegebene Langevin-Gleichung auf eine neue Langevin-Gleichung ab. Dabei werden die deterministischen Anteile und die Rauschkräfte ineinander übergeführt:

$$\tilde{N}(\tilde{x}) = \frac{1}{h'(\tilde{x})} \cdot N(h(\tilde{x})) \quad \text{und} \quad \tilde{B}(\tilde{x}) = \frac{1}{h'(\tilde{x})} \cdot B(h(\tilde{x})). \quad (4.29)$$

2. Das Stratonovich-Kalkül verbindet die vorgegebene Langevin-Gleichung mit der entsprechenden Fokker-Planck-Gleichung:

$$K(x) = N(x) + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{Q}{4} \cdot B(x)^2 \right\} \quad \text{und} \quad D(x) = Q \cdot B(x)^2. \quad (4.30)$$

3. Das Stratonovich-Kalkül führt auch von der neuen Langevin-Gleichung zu der dazugehörigen Fokker-Planck-Gleichung:

$$\tilde{K}(\tilde{x}) = \tilde{N}(\tilde{x}) + \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left\{ \frac{Q}{4} \cdot \tilde{B}(\tilde{x})^2 \right\} \quad \text{und} \quad \tilde{D}(\tilde{x}) = Q \cdot \tilde{B}(\tilde{x})^2. \quad (4.31)$$

4. Die mit (4.30) und (4.31) festgelegten Fokker-Planck-Gleichungen werden durch die Transformation $x = h(\tilde{x})$ der Zufallsvariablen und eine lineare Transformation der Wahrscheinlichkeitsdichte gemäß

$$\tilde{f}(\tilde{x}, t) = h'(\tilde{x}) \cdot f(h(\tilde{x}), t) \quad (4.32)$$

aufeinander abgebildet. Dabei ist die lineare Transformation (4.32) der Wahrscheinlichkeitsdichte gerade so gewählt, daß die Normierungsbedingung erhalten bleibt:

$$\int_{\tilde{I}} \tilde{f}(\tilde{x}, t) d\tilde{x} = \int_I f(x, t) dx = 1 \quad \text{für alle } t. \quad (4.33)$$

Es wird nun untersucht, wie sich diese spezielle Abbildung einer vorgegebenen Fokker-Planck-Gleichung in eine andere auf die entsprechenden Propagatoren auswirkt. Hierzu geht man von der Lösung der neuen Fokker-Planck-Gleichung aus:

$$\tilde{f}(\tilde{x}, t) = \int_{\tilde{I}} \tilde{G}_F(\tilde{x}, t; \tilde{x}_0, t_0) \cdot \tilde{f}_0(\tilde{x}_0, t_0) d\tilde{x}_0. \quad (4.34)$$

Macht man hierin die Transformation $x = h(\tilde{x})$ der Zufallsvariablen und die lineare Transformation (4.32) der Wahrscheinlichkeitsdichte rückgängig, so erhält man die Lösung der vorgegebenen Fokker-Planck-Gleichung:

$$f(x, t) = \int_I G_F(x, t; x_0, t_0) \cdot f_0(x_0, t_0) dx_0. \quad (4.35)$$

Zwischen den beiden Propagatoren G_F und \tilde{G}_F gewinnt man dabei die folgende Beziehung:

$$G_F(x, t; x_0, t_0) = \frac{1}{h'(h^{-1}(x))} \cdot \tilde{G}_F(h^{-1}(x), t; h^{-1}(x_0), t_0). \quad (4.36)$$

Aus dieser Transformation zwischen den Fokker-Planck-Propagatoren läßt sich nun eine wesentliche Schlußfolgerung ziehen. Geht man in (4.36) zu der Spektraldarstellung (4.18) der Fokker-Planck-Propagatoren über, so lassen sich die Spektraldaten der ursprünglichen Operatoren \hat{L}, \hat{L}^\dagger und die Spektraldaten der aus den obigen Transformationen hervorgegangenen Operatoren $\hat{\tilde{L}}, \hat{\tilde{L}}^\dagger$ ineinander überführen:

$$\hat{L} : \lambda_n = \tilde{\lambda}_n \quad \text{und} \quad f_n(x) = \frac{1}{h'(h^{-1}(x))} \cdot \tilde{f}_n(h^{-1}(x)), \quad (4.37)$$

$$\hat{L}^\dagger : \lambda_n^\dagger = \tilde{\lambda}_n^\dagger \quad \text{und} \quad f_n^\dagger(x) = \tilde{f}_n^\dagger(h^{-1}(x)). \quad (4.38)$$

Damit besitzen die vorgegebene und die neue Fokker-Planck-Gleichung **ein- und dasselbe Spektrum**.

Die bisherigen ganz allgemein gehaltenen Ausführungen zur Transformation von Langevin-Gleichungen und den im Sinne von Stratonovich dazugehörigen Fokker-Planck-Gleichungen lassen sich für eine Lösungsstrategie nutzbringend anwenden [47, S. 44]. Hierzu sei eine beliebige Fokker-Planck-Gleichung für multiplikatives Rauschen vorgegeben. Dann lassen sich die Transformation $x = h(\tilde{x})$ der Zufallsvariablen und die nachgeschaltete lineare Transformation (4.32) der Wahrscheinlichkeitsdichte so wählen, daß die neue Fokker-Planck-Gleichung nur ein additives Rauschen beinhaltet. Aus (4.29) ergibt sich hierzu die Bedingung:

$$\tilde{B}(\tilde{x}) = \frac{1}{h'(\tilde{x})} \cdot B(h(\tilde{x})) = \text{konstant} . \quad (4.39)$$

Dies stellt eine Differentialgleichung für die Transformation $x = h(\tilde{x})$ der Zufallsvariablen dar. Mit Hilfe der Methode der Separation der Variablen ergibt sich hieraus unmittelbar eine implizite Bestimmungsgleichung für die gesuchte Funktion h :

$$\tilde{x} = \int \frac{dy}{B(y)} . \quad (4.40)$$

Mit Hilfe der durch (4.40) festgelegten Funktion h und den Gleichungen (4.29) sowie (4.31) läßt sich dann die transformierte Fokker-Planck-Gleichung angeben, die nach Konstruktion nur ein additives Rauschen beschreibt.

4.5 Die Transformation einer Fokker-Planck-Gleichung für additives Rauschen in eine Schrödinger-Gleichung

Im vorangegangenen Abschnitt wurde ein Verfahren vorgestellt, mit dem eine Fokker-Planck-Gleichung für **multiplikatives Rauschen** in eine für **additives Rauschen** transformiert werden kann. Nun soll im folgenden gezeigt werden, daß eine so erhaltene Fokker-Planck-Gleichung für additives Rauschen anschließend in eine Schrödinger-Gleichung abgebildet werden kann. Hierzu erweist es sich als notwendig, eine **lineare Transformation der Wahrscheinlichkeitsdichte** mit der Einführung einer **imaginären Zeit** zu kombinieren [47, S. 107].

Den Ausgangspunkt der Überlegungen bildet eine Langevin-Gleichung für additives Rauschen, wie man sie beispielsweise aus den Überlegungen am Ende des vorhergehenden Abschnittes gewinnt:

$$\dot{\tilde{x}}(t) = \tilde{K}(\tilde{x}(t)) + \sqrt{Q} \cdot \tilde{B}(\tilde{x}(t)) \cdot F(t) \quad \text{mit} \quad \tilde{B}(\tilde{x}) = 1 , \quad (4.41)$$

wobei die Zufallsvariable $F(t)$ einem delta-korrelierten Gauß-Prozeß mit verschwindendem ersten Moment gemäß (4.23) unterworfen ist. Nach (4.31) läßt sich dann (4.41) eindeutig einer Fokker-Planck-Gleichung zuordnen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{f}(\tilde{x}, t) = -\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left\{ \tilde{K}(\tilde{x}) \cdot \tilde{f}(\tilde{x}, t) \right\} + \frac{Q}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \tilde{f}(\tilde{x}, t) . \quad (4.42)$$

Die allgemeinste lineare Transformation der Wahrscheinlichkeitsdichte $\tilde{f}(\tilde{x}, t)$ lautet:

$$\tilde{f}(\tilde{x}, t) = g(\tilde{x}) \cdot \psi(\tilde{x}, t). \quad (4.43)$$

Hierbei stellt $g = g(\tilde{x})$ eine noch frei wählbare Funktion dar. Mit (4.43) geht die Fokker-Planck-Gleichung (4.42) für additives Rauschen über in:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\tilde{x}, t) &= \left\{ -\tilde{K}'(\tilde{x}) - \tilde{K}(\tilde{x}) \cdot \frac{g'(\tilde{x})}{g(\tilde{x})} + \frac{Q}{2} \cdot \frac{g''(\tilde{x})}{g(\tilde{x})} \right\} \cdot \psi(\tilde{x}, t) + \\ &+ \left\{ -\tilde{K}(\tilde{x}) + Q \cdot \frac{g'(\tilde{x})}{g(\tilde{x})} \right\} \cdot \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \psi(\tilde{x}, t) + \frac{Q}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \psi(\tilde{x}, t). \end{aligned} \quad (4.44)$$

Um hieraus eine Schrödinger-Gleichung erhalten zu können, muß auf jeden Fall die erste partielle Ableitung nach der Variablen \tilde{x} in (4.44) verschwinden. Diese Bedingung liefert eine Differentialgleichung für die noch frei wählbare Funktion $g = g(\tilde{x})$:

$$\frac{g'(\tilde{x})}{g(\tilde{x})} = \frac{1}{Q} \cdot \tilde{K}(\tilde{x}). \quad (4.45)$$

Mit Hilfe der Methode der Separation der Variablen erhält man hieraus:

$$g(\tilde{x}) = \exp \left\{ -\frac{V(\tilde{x})}{Q} \right\} \quad \text{mit} \quad V(\tilde{x}) = - \int^{\tilde{x}} \tilde{K}(y) dy, \quad (4.46)$$

wobei man V als **Fokker-Planck-Potential** bezeichnet. Der Vergleich von (4.42) mit (4.46) zeigt, daß die so festgelegte Funktion $g = g(\tilde{x})$ gerade die Wurzel aus der stationären Lösung der zugrunde liegenden Fokker-Planck-Gleichung darstellt:

$$g(\tilde{x}) = \sqrt{f_{st}(\tilde{x})} \quad \text{mit} \quad f_{st}(\tilde{x}) = \exp \left\{ -2 \cdot \frac{V(\tilde{x})}{Q} \right\}. \quad (4.47)$$

Die Festlegung von $g = g(\tilde{x})$ entsprechend von (4.46) führt die partielle Differentialgleichung (4.44) für $\psi(\tilde{x}, t)$ über in:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\tilde{x}, t) = \frac{Q}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \psi(\tilde{x}, t) + \left\{ -\frac{1}{2Q} \cdot \tilde{K}(\tilde{x})^2 - \frac{1}{2} \cdot \tilde{K}'(\tilde{x}) \right\} \cdot \psi(\tilde{x}, t). \quad (4.48)$$

Die bisherigen Überlegungen werden nun zusätzlich mit der Einführung einer imaginären Zeit kombiniert, indem man von der Fokker-Planck-Zeit t zur Schrödinger-Zeit \tilde{t} übergeht:

$$\tilde{t} = (-i) \cdot t \quad (4.49)$$

Dabei induziert die Einführung einer imaginären Zeit auf natürliche Weise eine Transformation der betrachteten Funktion ψ in eine Schrödingersche Wellenfunktion ψ_S :

$$\psi_S(\tilde{x}, \tilde{t}) = \psi(\tilde{x}, i \cdot \tilde{t}). \quad (4.50)$$

Mit Hilfe von (4.49) und (4.50) geht dann die partielle Differentialgleichung (4.48) für ψ in eine Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \psi_S(\tilde{x}, \tilde{t}) = \hat{H}(\tilde{x}) \psi_S(\tilde{x}, \tilde{t}) \quad \text{mit} \quad \hat{H}(\tilde{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + V_S(\tilde{x}) \quad (4.51)$$

für ψ_S über, wenn man deren Parameter wie das Plancksche Wirkungsquantum $\hbar = 2\pi\hbar$ und das Schrödinger-Potential V_S entsprechend identifiziert. Dadurch ergibt sich insgesamt für die Transformation einer Fokker-Planck-Gleichung (4.42) für additives Rauschen in eine Schrödinger-Gleichung (4.51) eine für die späteren Anwendungen nützliche **Übersetzungstabelle**:

Fokker-Planck-Gleichung (4.42)	Schrödinger-Gleichung (4.51)
t	$\tilde{t} = (-i) \cdot t$
$\tilde{f}(\tilde{x}, t)$	$\psi_S(\tilde{x}, \tilde{t}) = \exp\left\{+\frac{V(\tilde{x})}{Q}\right\} \cdot \tilde{f}(\tilde{x}, i \cdot \tilde{t})$
Q	$\hbar = Q \cdot m$
$\tilde{K}(\tilde{x})$	$V_S(\tilde{x}) = \frac{m}{2} \cdot \tilde{K}(\tilde{x})^2 + \frac{\hbar}{2} \cdot \tilde{K}'(\tilde{x})$

Abbildung 4.2: Übersetzungstabelle für eine Transformation zwischen einer Fokker-Planck-Gleichung für additives Rauschen und einer Schrödinger-Gleichung

Die Transformation zwischen einer Fokker-Planck-Gleichung für additives Rauschen und einer Schrödinger-Gleichung führt zu einer analogen Transformation der jeweiligen Propagatoren. Geht man von der Lösung

$$\psi_S(\tilde{x}, \tilde{t}) = \int_{\tilde{I}} G_S(\tilde{x}, \tilde{t}; \tilde{x}_0, \tilde{t}_0) \cdot \psi_{S0}(\tilde{x}_0, \tilde{t}_0) d\tilde{x}_0 \quad (4.52)$$

des zu (4.51) gehörenden Schrödinger-Anfangs- und Randwertproblems aus, so läßt sich die Einführung einer imaginären Zeit in (4.49), (4.50) und die lineare Transformation (4.43), (4.46) der Wahrscheinlichkeitsdichte wieder rückgängig machen. Man erhält dadurch die Lösung

$$\tilde{f}(\tilde{x}, t) = \int_{\tilde{I}} \tilde{G}_F(\tilde{x}, t; \tilde{x}_0, t_0) \cdot \tilde{f}_0(\tilde{x}_0, t_0) d\tilde{x}_0 \quad (4.53)$$

des zu (4.42) gehörenden Fokker-Planck-Anfangs- und Randwertproblems, wobei zwischen den Propagatoren \tilde{G}_F und G_S die folgende Beziehung besteht:

$$\tilde{G}_F(\tilde{x}, t; \tilde{x}_0, t_0) = \exp\left\{-\frac{V(\tilde{x}) - V(\tilde{x}_0)}{Q}\right\} \cdot G_S(\tilde{x}, -i \cdot t; \tilde{x}_0, -i \cdot t_0). \quad (4.54)$$

Mit Hilfe der Spektraldarstellung der jeweiligen Propagatoren gewinnt man darüber hinaus einen unmittelbaren Zusammenhang zwischen den Eigenwerten E_n und den Eigenfunktio-

nen $\psi_{S,n}$ des Hamiltonoperators \hat{H} von (4.51) sowie den Eigenwerten $\tilde{\lambda}_n, \tilde{\lambda}_n^\dagger$ und den Eigenfunktionen $\tilde{f}_n, \tilde{f}_n^\dagger$ des Fokker-Planck-Operators \hat{L} bzw. des adjungierten Fokker-Planck-Operators \hat{L}^\dagger von (4.42). Dabei besitzen die Fokker-Planck-Gleichung (4.42) für additives Rauschen und die dazugehörige Schrödinger-Gleichung (4.51) **zueinander proportionale Spektren**:

$$\hat{L} : \quad \tilde{\lambda}_n = \frac{E_n}{\hbar} \quad \text{und} \quad \tilde{f}_n(\tilde{x}) = N_n \cdot \exp\left\{-\frac{V(\tilde{x})}{Q}\right\} \cdot \psi_{S,n}(\tilde{x}), \quad (4.55)$$

$$\hat{L}^\dagger : \quad \tilde{\lambda}_n^\dagger = \frac{E_n}{\hbar} \quad \text{und} \quad \tilde{f}_n^\dagger(\tilde{x}) = \frac{1}{N_n} \cdot \exp\left\{+\frac{V(\tilde{x})}{Q}\right\} \cdot \psi_{S,n}(\tilde{x}). \quad (4.56)$$

Die in (4.55) und (4.56) eingefügten Konstanten N_n tragen dem Umstand Rechnung, daß die Eigenfunktionen $\tilde{f}_n, \tilde{f}_n^\dagger$ nach den Überlegungen zu (4.13) nur bis auf einen eventuell von n abhängigen Faktor N_n eindeutig bestimmbar sind.

Zu der hiermit hergestellten Verbindung zwischen einer Fokker-Planck-Gleichung für additives Rauschen und einer Schrödinger-Gleichung werden nun noch einige abschließende Überlegungen angestellt:

1. Nach (4.15) besitzt der Fokker-Planck-Operator \hat{L} den Eigenwert $\tilde{\lambda}_0 = 0$, da dieser der stationären Lösung entspricht. Aufgrund der durch (4.55) und (4.56) gegebenen Proportionalität zwischen dem Fokker-Planck- und dem Schrödinger-Spektrum muß dann aber auch der Hamiltonoperator \hat{H} zum Schrödinger-Potential V_S den Eigenwert $E_0 = 0$ aufweisen. Die Existenz dieses Eigenwertes $E_0 = 0$ ist nun dadurch gegeben, daß das Eigenwertproblem

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{m}{2} \cdot \tilde{K}(\tilde{x})^2 + \frac{\hbar}{2} \cdot \tilde{K}'(\tilde{x}) \right\} \psi_{S,n}(\tilde{x}) = 0 \quad (4.57)$$

die Lösung

$$\psi_{S,n}(\tilde{x}) = \exp\left\{-\frac{m}{\hbar} V(\tilde{x})\right\} \quad (4.58)$$

besitzt, wobei V gemäß (4.46) definiert ist. Berücksichtigt man die Übersetzungstabelle in Abb. 4.2, so folgt aus (4.55), (4.56) und (4.58):

$$\hat{L} : \quad \tilde{\lambda}_0 = 0 \quad \text{und} \quad \tilde{f}_0(\tilde{x}) = \exp\left\{-\frac{2}{Q} V(\tilde{x})\right\}, \quad (4.59)$$

$$\hat{L}^\dagger : \quad \tilde{\lambda}_0^\dagger = 0 \quad \text{und} \quad \tilde{f}_0^\dagger(\tilde{x}) = 1. \quad (4.60)$$

Dieses Resultat ist konsistent mit (4.16) und (4.47).

2. Die bei vielen Anwendungen vorliegende Positivität des Fokker-Planck-Spektrums gemäß (4.19) erfordert nach (4.55) und (4.56) ein positives Schrödinger-Spektrum. Dies ist hinreichenderweise dann gegeben, wenn das zum Fokker-Planck-Operator \hat{L} gehörende Schrödinger-Potential V_S positiv definit ist:

$$V_S(\tilde{x}) \geq 0 \quad \text{für alle } \tilde{x} \quad \implies \quad \lambda_n \geq 0 \quad \text{für alle } n. \quad (4.61)$$

3. Die Übersetzungstabelle in Abb. 4.2 enthält eine Beziehung zwischen dem Driftkoeffizienten \tilde{K} einer Fokker-Planck-Gleichung für additives Rauschen und dem Potential V_S einer Schrödinger-Gleichung. Aus einem vorgegebenen Driftkoeffizienten \tilde{K} läßt sich demnach sofort das entsprechende Schrödinger-Potential V_S berechnen. Ist dagegen umgekehrt V_S gegeben, so stellt die Beziehung der Übersetzungstabelle in Abb. 4.2 eine Riccatische Differentialgleichung für \tilde{K} dar [49, S. 421]. Der Lösungsansatz

$$\tilde{K}(\tilde{x}) = \frac{\hbar}{m} \cdot \frac{\tilde{K}'_1(\tilde{x})}{\tilde{K}_1(\tilde{x})} \quad (4.62)$$

führt dann zum Eigenwertproblem des zum Potential V_S gehörenden Hamiltonoperators \hat{H} für den Eigenwert $E_0 = 0$:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + V_S(\tilde{x}) \right\} \tilde{K}_1(\tilde{x}) = 0. \quad (4.63)$$

4.6 Die Lösungsstrategie für Fokker-Planck-Gleichungen auf der Beschreibungsebene der Propagatoren

Die bisher in diesem Kapitel erzielten Ergebnisse lassen sich dahingehend zusammenfassen, daß sie zur Formulierung einer Lösungsstrategie für diejenigen homogenen Markov-Prozesse herangezogen werden, bei denen die Kramers-Moyal-Entwicklung exakt nach dem zweiten Term abbricht. Hierbei bedient sich das im folgenden vorgestellte dreistufige Lösungsverfahren im wesentlichen der Beschreibungsebene der Propagatoren.

Der Ausgangspunkt der Überlegungen besteht darin, daß der zu untersuchende homogene Markov-Prozeß durch eine Langevin-Gleichung für multiplikatives Rauschen entsprechend (4.23) und (4.25) definiert sei. Eine dazu äquivalente Charakterisierung des stochastischen Prozesses erfolgt im Rahmen der Stratonovich-Interpretation mit Hilfe der durch (4.1), (4.2) und (4.30) eindeutig bestimmten Fokker-Planck-Gleichung. Nach (4.17) kann sie als gelöst betrachtet werden, wenn ihr Propagator G_F bekannt ist.

In einem ersten Schritt wird durch (4.36) und (4.40) die Bestimmung dieses Propagators G_F für einen multiplikativen Rauschprozeß auf die Berechnung des Propagators \tilde{G}_F für einen additiven Rauschprozeß reduziert. Der zweite Schritt besteht dann darin, diesen Propagator \tilde{G}_F unter Verwendung der Übersetzungstabelle in Abb. 4.2 und der Gleichung (4.54)

auf den Propagator G_S eines quantenmechanischen Teilchens im Schrödinger-Potential V_S zurückzuführen. Durch diese Abbildung des zu untersuchenden stochastischen Prozesses auf ein entsprechendes quantenmechanisches Problem steht nun die fruchtbare Methode der Pfadintegrale aus dem vorangegangenen Kapitel zur Verfügung, um den quantenmechanischen Propagator G_S und damit auch den gesuchten stochastischen Propagator G_F in einem dritten Schritt zu berechnen. Damit ergibt sich insgesamt eine Lösungsstrategie, die in Abb. 4.3 zusammengefaßt ist:

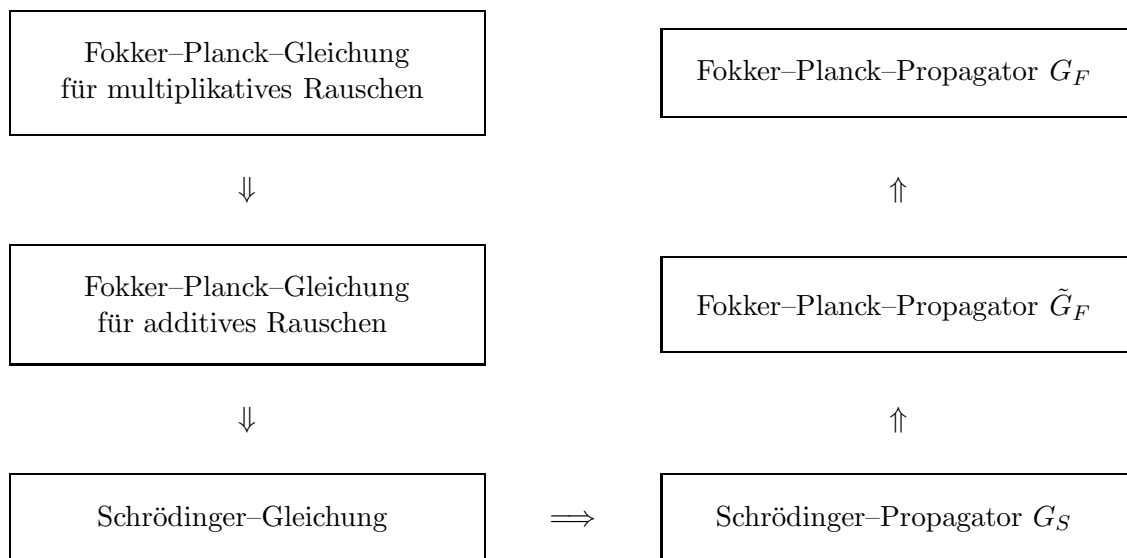


Abbildung 4.3: Eine Lösungsstrategie für Fokker-Planck-Gleichungen mit multiplikativem Rauschen

4.7 Ein nichttriviales Beispiel

Die Praktikabilität des im vorhergehenden Abschnittes skizzierten Lösungsverfahrens für stochastischen Prozesse mit multiplikativem Rauschen wird nun anhand eines nichttrivialen Beispiels demonstriert. Hierzu wird ein stochastischer Prozeß betrachtet, der im deterministischen Grenzfall einen Phasenübergang zweiter Ordnung aufweist.

Den Ausgangspunkt der Überlegungen bildet die Langevin-Gleichung, die durch

$$N(x) = a \cdot x - bQ \cdot x^3 \quad \text{und} \quad B(x) = x^2 \quad (4.64)$$

definiert ist. Hierbei sei $b \in (0, +\infty)$ und $a \in (-\infty, +\infty)$ der Kontrollparameter. Da sowohl die nichtlineare Funktion N als auch die Rauschstärke B an der Stelle $x = 0$ eine Nullstelle aufweisen, wird der Definitionsbereich der Zufallsvariablen x entweder auf die positive oder auf die negative reelle Achse eingeschränkt [20]. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird deshalb der Definitionsbereich für die folgenden Betrachtungen auf das Intervall

$$I = (-\infty, 0] \quad (4.65)$$

festgelegt. Verwendet man die Stratonovich-Interpretation, so gehört zu der durch (4.64) definierten Langevin-Gleichung eine Fokker-Planck-Gleichung mit

$$K(x) = a \cdot x + (Q - b) \cdot x^3 \quad \text{und} \quad D(x) = Q \cdot x^4. \quad (4.66)$$

Dieser stochastische Prozeß mit multiplikativem Rauschen wird nun durch eine Transformation der Zufallsvariablen gemäß

$$x = h(\tilde{x}) = -\frac{1}{\tilde{x}} \quad \text{mit} \quad \tilde{I} = [0, +\infty) \quad (4.67)$$

auf einen stochastischen Prozeß mit additivem Rauschen abgebildet. Er ist charakterisiert durch

$$\tilde{N}(\tilde{x}) = -a \cdot \tilde{x} + Qb \cdot \frac{1}{\tilde{x}} \quad \text{und} \quad \tilde{B}(\tilde{x}) = 1, \quad (4.68)$$

$$\tilde{K}(\tilde{x}) = -a \cdot \tilde{x} + Qb \cdot \frac{1}{\tilde{x}} \quad \text{und} \quad \tilde{D}(\tilde{x}) = Q. \quad (4.69)$$

Dieser stochastische Prozeß mit additivem Rauschen erweist sich nun als mathematisch äquivalent zum quantenmechanischen System (3.69) eines harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere, dessen Energieskala um den konstanten Wert V_0 verschoben ist:

$$V_S(\tilde{x}) = \frac{m}{2}\omega^2\tilde{x}^2 + \frac{g}{\tilde{x}^2} + V_0 \quad \text{mit} \quad \omega = a, \quad g = \frac{m}{2}b^2 - \frac{\hbar}{2}b, \quad V_0 = -mab - \frac{\hbar}{2}a. \quad (4.70)$$

Dank der Vorarbeiten in Abschnitt 3.4 läßt sich der Schrödinger-Propagator G_S zu (4.70) unmittelbar angeben:

$$G_S(\tilde{x}, \tilde{t}; \tilde{x}_0, \tilde{t}_0) = \frac{ma}{i\hbar \sin[a(\tilde{t} - \tilde{t}_0)]} \cdot \sqrt{\tilde{x}_0 \tilde{x}} \cdot I_{\frac{m}{\hbar}b - \frac{1}{2}} \left(\frac{ma}{i\hbar \sin[a(\tilde{t} - \tilde{t}_0)]} \tilde{x}_0 \tilde{x} \right) \\ \cdot \exp \left\{ i \frac{ma}{2\hbar} \cot[a(\tilde{t} - \tilde{t}_0)] (\tilde{x}_0^2 + \tilde{x}^2) \right\} \cdot \exp \left\{ ia \left(\frac{m}{\hbar}b + \frac{1}{2} \right) (\tilde{t} - \tilde{t}_0) \right\}. \quad (4.71)$$

Mit Hilfe des Fokker-Planck-Potentials

$$V(\tilde{x}) = \frac{1}{2}a \cdot \tilde{x}^2 - b \cdot \ln \tilde{x} \quad (4.72)$$

gewinnt man dann aus dem Schrödinger-Propagator G_S in (4.71) den zur Fokker-Planck-Gleichung (4.69) gehörenden Fokker-Planck-Propagator \tilde{G}_F :

$$\tilde{G}_F(\tilde{x}, t; \tilde{x}_0, t_0) = \frac{2a}{Q} \cdot \frac{\exp \left\{ a \left(\frac{b}{Q} - \frac{1}{2} \right) (t - t_0) \right\}}{1 - \exp \{-2a(t - t_0)\}} \cdot \tilde{x}^{\frac{b}{Q} + \frac{1}{2}} \cdot \tilde{x}_0^{-\frac{b}{Q} + \frac{1}{2}} \\ I_{\frac{b}{Q} - \frac{1}{2}} \left(\frac{2a}{Q} \frac{\exp \{-a(t - t_0)\}}{1 - \exp \{-2a(t - t_0)\}} \tilde{x}_0 \tilde{x} \right) \cdot \exp \left\{ -\frac{a}{Q} \frac{\tilde{x}^2 + \tilde{x}_0^2 \exp \{-2a(t - t_0)\}}{1 - \exp \{-2a(t - t_0)\}} \right\}. \quad (4.73)$$

Beachtet man die Asymptotik der modifizierten Besselfunktionen erster Gattung für kleine Argumente nach (8.445) in [23]

$$I_\nu(x) \approx \frac{1}{\Gamma(1+\nu)} \cdot \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \quad \text{für } x \rightarrow 0, \quad (4.74)$$

so geht der Fokker-Planck-Propagator \tilde{G}_F für $a > 0$ im Langzeitlimites in die stationäre Lösung \tilde{f}_{st} der Fokker-Planck-Gleichung (4.69) über:

$$\tilde{f}_{st}(\tilde{x}) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \tilde{G}_F(\tilde{x}, t; \tilde{x}_0, t_0) = 2 \cdot \frac{\left(\frac{a}{Q}\right)^{\frac{b}{Q} + \frac{1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{b}{Q} + \frac{1}{2}\right)} \cdot \tilde{x}^{2\frac{b}{Q}} \cdot \exp\left\{-\frac{a}{Q}\tilde{x}^2\right\}. \quad (4.75)$$

Aus dem Fokker-Planck-Propagator \tilde{G}_F für den additiven Rauschprozeß läßt sich dann der gesuchte Fokker-Planck-Propagator G_F für den multiplikativen Rauschprozeß (4.66) ableiten:

$$G_F(x, t; x_0, t_0) = 2 \frac{a}{Q} \cdot \frac{\exp\left\{a\left(\frac{b}{Q} - \frac{1}{2}\right)(t - t_0)\right\}}{1 - \exp\{-2a(t - t_0)\}} \cdot x_0^{\frac{b}{Q} - \frac{1}{2}} \cdot x^{-\frac{b}{Q} - \frac{5}{2}}$$

$$I_{\frac{b}{Q} - \frac{1}{2}} \left(2 \frac{a}{Q} \frac{\exp\{-a(t - t_0)\}}{1 - \exp\{-2a(t - t_0)\}} \frac{1}{x_0 x} \right) \cdot \exp\left\{-\frac{a}{Q} \frac{\frac{1}{x^2} + \frac{1}{x_0^2} \exp\{-2a(t - t_0)\}}{1 - \exp\{-2a(t - t_0)\}}\right\}. \quad (4.76)$$

Auch hier liefert der Langzeitlimites im Falle $a > 0$ unter Beachtung von (4.74) die stationäre Lösung f_{st} der entsprechenden Fokker - Planck - Gleichung (4.66):

$$f_{st}(x) = \lim_{t \rightarrow +\infty} G_F(x, t; x_0, t_0) = \frac{2 \cdot \left(\frac{a}{Q}\right)^{\frac{b}{Q} + \frac{1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{b}{Q} + \frac{1}{2}\right)} \cdot x^{-2\left(\frac{b}{Q} + 1\right)} \exp\left\{-\frac{a}{Q} \frac{1}{x^2}\right\}. \quad (4.77)$$

Der Vollständigkeit halber werden noch abschließend die jeweils auftretenden Eigenwerte und Eigenfunktionen angegeben. Sie lassen sich beispielsweise direkt aus den Spektraldarstellungen der Propagatoren ableiten. Für $n = 0, 1, 2, \dots$ gilt:

$$\hat{H} : \quad E_n = 2\hbar a \cdot n \quad \text{und} \quad \psi_{S,n}(\tilde{x}) = \sqrt{2 \cdot \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma\left(n + \frac{m}{\hbar}b + \frac{1}{2}\right)} \cdot \left(\frac{m}{\hbar}a\right)^{\frac{m}{\hbar}b + \frac{1}{2}}},$$

$$\cdot \tilde{x}^{\frac{m}{\hbar}b} \cdot L_n^{\left(\frac{m}{\hbar}b - \frac{1}{2}\right)}\left(\frac{m}{\hbar}a\tilde{x}^2\right) \cdot \exp\left\{-\frac{ma}{2\hbar}\tilde{x}^2\right\}, \quad (4.78)$$

$$\hat{L} : \quad \tilde{\lambda}_n = 2a \cdot n \quad \text{und} \quad \tilde{f}_n(\tilde{x}) = 2 \cdot \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma\left(n + \frac{b}{Q} + \frac{1}{2}\right)} \left(\frac{a}{Q}\right)^{\frac{b}{Q} + \frac{1}{2}}$$

$$\cdot \tilde{x}^{2\frac{b}{Q}} \cdot L_n^{\left(\frac{b}{Q} - \frac{1}{2}\right)}\left(\frac{a}{Q}\tilde{x}^2\right) \cdot \exp\left\{-\frac{a}{Q}\tilde{x}^2\right\}, \quad (4.79)$$

$$\hat{L}^\dagger : \quad \tilde{\lambda}_n^\dagger = 2a \cdot n \quad \text{und} \quad \tilde{f}_n^\dagger(\tilde{x}) = L_n^{\left(\frac{b}{Q} - \frac{1}{2}\right)}\left(\frac{a}{Q}\tilde{x}^2\right), \quad (4.80)$$

$$\hat{L} : \quad \lambda_n = 2a \cdot n \text{ und } f_n(x) = 2 \cdot \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n + \frac{b}{Q} + \frac{1}{2})} \left(\frac{a}{Q}\right)^{\frac{b}{Q} + \frac{1}{2}} \cdot x^{-2(\frac{b}{Q} + 1)} \cdot L_n^{(\frac{b}{Q} - \frac{1}{2})} \left(\frac{a}{Q} \frac{1}{x^2}\right) \cdot \exp\left\{-\frac{a}{Q} \frac{1}{x^2}\right\}, \quad (4.81)$$

$$\hat{L}^\dagger : \quad \lambda_n = 2a \cdot n \text{ und } f_n^\dagger(x) = L_n^{(\frac{b}{Q} - \frac{1}{2})} \left(\frac{a}{Q} \frac{1}{x^2}\right). \quad (4.82)$$

Diese Ergebnisse sind zum einen konsistent mit (4.37), (4.38) und (4.55), (4.56), wenn man

$$N_n = \sqrt{2 \cdot \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n + \frac{b}{Q} + \frac{1}{2})} \left(\frac{a}{Q}\right)^{\frac{b}{Q} + \frac{1}{2}}} \quad (4.83)$$

setzt. Ferner stimmen sie für den jeweils tiefsten Eigenwert bei $n = 0$ mit (4.16), (4.75) und (4.77) überein, da für die verallgemeinerten Laguerre-Polynome nach (8.973.1) in [23] gilt:

$$L_0^{(\nu)}(x) = 1 \quad \text{für alle } \nu. \quad (4.84)$$

Kapitel 5

Verallgemeinerung der Duru–Kleinert– Propagatortransformationen

5.1 Die Motivation

In den Kapiteln 3 und 4 wurden zwei wichtige **Anwendungsmöglichkeiten** von quantenmechanischen Propagatoren herausgearbeitet. Zunächst eröffnen sie einen alternativen Zugang zur Berechnung von Energieeigenwerten und Energieeigenfunktionen quantenmechanischer Systeme. Ferner lassen sie sich auf stochastische Propagatoren abbilden und dienen somit dazu, homogene, stetige Markov–Prozesse zu lösen. Darüber hinaus kann man aber auch mit Hilfe quantenmechanischer Propagatoren die Dichtematrizen der Quantenstatistik gewinnen [59], wenn man durch eine sogenannte Wick–Rotation von der reellen Zeit zu einer imaginären Zeit übergeht [26, S. 212].

Es stellt sich die Frage, wie quantenmechanische Propagatoren für vorgegebene Systeme berechnet werden können. Die hierzu von Feynman entwickelten **Pfadintegrale** erweisen sich als so kompliziert, daß es beispielsweise zunächst nicht gelungen ist, mit dieser Methode das Wasserstoffatom zu behandeln. Tatsächlich konnte man beim Wasserstoffatom einen analytischen Ausdruck für die Fouriertransformierte des Propagators bezüglich der Zeit, die sogenannte Resolvente, erst dadurch ableiten, daß man die von der Schrödinger–Gleichung her bekannten Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen in die Spektraldarstellung einsetzte [13].

Diese Schwierigkeiten führten dazu, daß Hagen Kleinert und I.U. Duru 1979 eine neue Technik zur Berechnung quantenmechanischer Propagatoren entwickelten [54, Kapitel 14]. Sie konstruierten eine fruchtbare **Transformationsmethode**, mit der sich die Propagatoren quantenmechanischer Systeme aufeinander abbilden lassen. Durch die Anwendung dieser Transformationsmethode auf das noch ausstehende Problem des Wasserstoffatoms gelang es ihnen, die Kustaanheimo–Stiefel–Transformation der Himmelsmechanik [15] auf die Quantenmechanik auszudehnen. Auf diese Weise konnten sie das Wasserstoffatom auf

den harmonischen Oszillator abbilden und damit die Resolvente des Wasserstoffatoms berechnen [22, 27, 28, 29, 37].

Das vorliegende Kapitel dient dazu, eine **Verallgemeinerung der Duru-Kleinert-Transformationen** vorzustellen [60], die die Klasse der Propagatortransformationen ausdehnt. In dieser Verallgemeinerung ist neben den Duru-Kleinert-Transformationen noch die Abbildung des freien Teilchens auf den harmonischen Oszillator mitenthalten. Damit umfaßt diese Verallgemeinerung ein Ergebnis, das mit Hilfe der Duru-Kleinert-Transformationen nicht abgeleitet werden kann und das aber zuvor schon von A. Inomata et al. auf anderem Wege gefunden wurde [30, 41]. Es ist zu erwarten, daß es in naher Zukunft möglich sein wird, weitere Beispiele anzugeben, die ausschließlich im Rahmen dieser Verallgemeinerung behandelt werden können.

In den folgenden drei Abschnitten wird sukzessive die beabsichtigte Transformation des Propagators im Lagrangeschen Pfadintegral durchgeführt. Dabei basiert diese Transformation auf der Idee, daß jede physikalische Größe in der entsprechenden Schrödinger-Gleichung dadurch verändert werden kann, daß sie einer individuellen Abbildung unterworfen wird. Diese Beobachtung führt zu den **drei getrennten Transformationen der Zeitkoordinate, der Ortskoordinate und der Wellenfunktion**, bei denen jeweils eine zunächst **willkürliche Funktion** eingeführt wird. Die Hintereinanderausführung dieser drei einzelnen Transformationen macht es dann erforderlich, diese drei Funktionen **zwei Bedingungen** zu unterwerfen, damit man nach der Gesamttransformation wieder ein Lagrangesches Pfadintegral erhält. Am Ende von Abschnitt 5.4.5 kann dann das Ergebnis in Form einer **Transformationsformel für Propagatoren** angegeben werden. Im darauffolgenden Abschnitt werden die drei Transformationen der Zeitkoordinate, der Ortskoordinate und der Wellenfunktion auf der Ebene einer entsprechenden partiellen Differentialgleichung für Propagatoren durchgeführt, um die Transformationsformel für Propagatoren auf anderem Wege zu verifizieren. Der letzte Abschnitt behandelt schließlich die beiden schon oben angeführten Spezialfälle.

5.2 Die Transformation der Zeitkoordinate

In der Quantenmechanik betrachtet man die Zeit gewöhnlich als eine fest vorgegebene physikalische Größe. Im Unterschied hierzu wird die Zeit in diesem Abschnitt als ein zusätzlicher Freiheitsgrad aufgefaßt, der einer separaten Transformation unterworfen werden kann. Die gleichberechtigte Behandlung der Zeit t mit dem Ort x führt dabei zu einer neuen Parametrisierung von Zustandsvektoren im erweiterten Hilbertraum mit Hilfe der sogenannten Pseudozeit s . Die genaue Ausarbeitung dieser Idee mündet schließlich in eine lokale Transformation der physikalischen Zeit t in die Pseudozeit s .

5.2.1 Die Erweiterung des Hilbertraumes

Entsprechend Abschnitt 3.2 die möglichen Zustände eines quantenmechanischen Systems durch die Zustandsvektoren $|\psi\rangle$ eines Hilbertraumes \mathcal{H}_1 beschrieben, der von den Eigen-

vektoren $|x\rangle$ des Ortsoperators \hat{x} aufgespannt wird. Im Rahmen dieser Axiomatik dient die als fest vorgegeben betrachtete Zeit t ausschließlich dazu, die Abfolge von Zustandsvektoren $|\psi(t)\rangle$ im Laufe einer Dynamik zu parametrisieren.

In einer formalen Erweiterung dieses Konzeptes soll nun die Zeit t als eine zusätzliche Koordinate vollkommen gleichberechtigt zur Ortskoordinate x behandelt werden. Hierzu wird neben dem ursprünglichen Hilbertraum \mathcal{H}_1 ein neuer Hilbertraum \mathcal{H}_2 eingeführt, der von den Eigenvektoren $|t\rangle$ des Zeitoperators \hat{t} aufgespannt wird. Analog zu (3.5), (3.6) und (3.7) gelten dabei die Eigenschaften des Eigenwertproblems (5.1), der Orthonormalität (5.2) und der Vollständigkeit (5.3):

$$\hat{t}|t\rangle = t|t\rangle, \quad (5.1)$$

$$\langle t|t'\rangle = \delta(t-t'), \quad (5.2)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |t\rangle\langle t| dt = 1. \quad (5.3)$$

Um die angestrebte Gleichberechtigung der Zeit t mit dem Ort x auch explizit in der Notation zum Ausdruck zu bringen, wird die direkte Summe der beiden Hilberträume \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 gebildet. Der so entstehende erweiterte Hilbertraum \mathcal{H} besitzt als Basis die Eigenvektoren

$$|x, t\rangle = |x\rangle \cdot |t\rangle. \quad (5.4)$$

Die Zustände des quantenmechanischen Systems lassen sich nun auch durch die Zustandsvektoren $|\Psi\rangle$ im erweiterten Hilbertraum \mathcal{H} beschreiben. Um eine Dynamik durch eine Abfolge von Zustandsvektoren $|\Psi(s)\rangle$ charakterisieren zu können, führt man dann den neuen Parameter der Pseudozeit s ein. Die Ortszeitdarstellung dieser Zustandsvektoren $|\Psi(s)\rangle$ lautet mit Hilfe der Basis (5.4):

$$\langle x, t|\Psi(s)\rangle = \Psi(x, t, s). \quad (5.5)$$

5.2.2 Der kausale Propagator

In Abschnitt 3.2 wurde immer ein nicht explizit von der Zeit t abhängiger Hamiltonoperator \hat{H} betrachtet. Es wurde gezeigt, daß in diesem Falle die Dynamik der Zustandsvektoren $|\psi(t)\rangle$ aus \mathcal{H}_1 in der Ortsdarstellung durch den Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ gemäß (3.17) und (3.20) beschrieben wird. Dabei wurde nicht näher spezifiziert, ob hiermit eine zeitliche Entwicklung in die **Zukunft** ($t > t_0$) oder in die **Vergangenheit** ($t < t_0$) gemeint war. Deshalb besitzt dieser Propagator $G(x, t; x_0, t_0)$ die Symmetrie (4.22).

Möchte man nachträglich die **Kausalität bezüglich der Zeit** t in die Beschreibung einfügen, so muß man vom Propagator G zum **kausalen** Propagator G_c übergehen:

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = \Theta(t - t_0) \cdot G(x, t; x_0, t_0). \quad (5.6)$$

Hierbei wurde die Heaviside-Funktion Θ verwendet:

$$\Theta(t - t_0) = \begin{cases} 1 & ; \quad t > t_0 \\ 0 & ; \quad t \leq t_0 \end{cases} . \quad (5.7)$$

Kombiniert man (3.20) und (5.6), so erhält man eine direkte Beziehung zwischen dem kausalen Propagator G_c und dem Hamiltonoperator \hat{H} :

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = \Theta(t - t_0) \cdot \langle x | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) \right\} | x_0 \rangle . \quad (5.8)$$

5.2.3 Die Konsequenzen für den kausalen Propagator

Im weiteren wird gezeigt, wie sich die Erweiterung des Hilbertraumes auf der Beschreibungsebene der kausalen Propagatoren auswirkt. Durch die Anwendung einfacher Identitäten gewinnt man dabei eine Beziehung zwischen dem ursprünglichen kausalen Propagator G_c im Hilbertraum \mathcal{H}_1 und einem neuen kausalen Propagator $G_c^{(1)}$, der die Dynamik im erweiterten Hilbertraum \mathcal{H} bestimmt.

Zunächst wird die Deltafunktion entsprechend

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = \int_0^{+\infty} ds G_c(x, t; x_0, t_0) \cdot \delta(t - t_0 - s) \quad (5.9)$$

eingeführt. Um von dieser Identität profitieren zu können, werden die Eigenvektoren $|E\rangle$ des Energieoperators \hat{E} mit den Eigenschaften

$$\hat{E} |E\rangle = E |E\rangle , \quad (5.10)$$

$$\langle E | E' \rangle = \delta(E - E') , \quad (5.11)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |E\rangle \langle E| dE = 1 , \quad (5.12)$$

betrachtet. Die Energieeigenvektoren $|E\rangle$ besitzen die Zeitdarstellung

$$\langle t | E \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} Et \right\} . \quad (5.13)$$

Berücksichtigt man (5.10) bis (5.13), so läßt sich die in (5.9) auftretende Deltafunktion wie folgt darstellen:

$$\delta(t - t_0 - s) = \langle t | \exp \left\{ +\frac{i}{\hbar} \hat{E} s \right\} | t_0 \rangle . \quad (5.14)$$

Da der Hamiltonoperator \hat{H} nicht explizit von der Zeit t abhängen soll, kann man (5.8) und (5.14) verwenden, um die Identität (5.9) umzuschreiben:

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} ds \Theta(s) \cdot \langle x, t | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (\hat{H} - \hat{E}) s \right\} | x_0, t_0 \rangle . \quad (5.15)$$

Die Integration über die Pseudozeit s kann formal explizit ausgeführt werden:

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = \langle x, t | \hat{R} | x_0, t_0 \rangle, \quad (5.16)$$

$$\hat{R} = \frac{-i\hbar}{\hat{H} - \hat{E}}. \quad (5.17)$$

Der hierbei auftretende Operator \hat{R} ist im Sinne von

$$\hat{R} = \lim_{\eta \downarrow 0} \frac{-i\hbar}{\hat{H} - \hat{E} - i\eta} \quad (5.18)$$

aufzufassen, wobei die positive, reelle Größe η die Kausalität bezüglich der Pseudozeit s garantiert.

5.2.4 Die Bedeutung der Erweiterung des Hilbertraumes

Es seien \hat{f}_r und \hat{f}_l zunächst zwei invertierbare, aber ansonsten beliebige Operatoren. Dann ermöglicht die Operatoridentität

$$(\hat{A} \hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1} \hat{A}^{-1}, \quad (5.19)$$

daß die Gleichung (5.17) umgeschrieben werden kann:

$$\hat{R} = \hat{f}_r \cdot \frac{-i\hbar}{\hat{f}_l(\hat{H} - \hat{E})\hat{f}_r} \cdot \hat{f}_l. \quad (5.20)$$

Nun werden \hat{f}_r und \hat{f}_l auf invertierbare Funktionen des Ortsoperators \hat{x} und des Zeitoperators \hat{t} spezialisiert:

$$\hat{f}_r = f_r(\hat{x}, \hat{t}) \quad \text{und} \quad \hat{f}_l = f_l(\hat{x}, \hat{t}). \quad (5.21)$$

Durch die Kombination der Gleichungen (5.16), (5.20) und (5.21) läßt sich die Integration über die Pseudozeit s wieder zurückgewinnen:

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = f_r(x, t) f_l(x_0, t_0) \cdot \int_0^{+\infty} ds G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0), \quad (5.22)$$

$$G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0) = \Theta(s) \cdot \langle x, t | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{f}_l(\hat{H} - \hat{E})\hat{f}_r s \right\} | x_0, t_0 \rangle. \quad (5.23)$$

(5.22) stellt eine Beziehung zwischen dem kausalen Propagator $G_c(x, t; x_0, t_0)$ im ursprünglichen Hilbertraum \mathcal{H}_1 und einem neuen kausalen Propagator $G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0)$ im erweiterten Hilbertraum \mathcal{H} dar. Eine Verallgemeinerung der in Abschnitt 3.2 vorgenommenen Überlegungen führt darüber hinaus zu einer adäquaten Interpretation dieses neuen kausalen Propagators $G_c^{(1)}$ in (5.23). Demnach gehört $G_c^{(1)}$ zum Anfangswertproblem

$$i\hbar \partial_s |\Psi^{(1)}(s)\rangle = \hat{f}_l(\hat{H} - \hat{E})\hat{f}_r |\Psi^{(1)}(s)\rangle \quad \text{mit} \quad |\Psi^{(1)}(0)\rangle = |\Psi^{(1)}(0)\rangle \quad (5.24)$$

im erweiterten Hilbertraum \mathcal{H} und bildet die Raumzeitdarstellung der Anfangsbedingung $|\Psi^{(1)}(0)\rangle$ in die Raumzeitdarstellung der Lösung $|\Psi^{(1)}(s)\rangle$ ab:

$$\langle x, t | \Psi^{(1)}(s) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_0 G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0) \cdot \langle x_0, t_0 | \Psi^{(1)}(0) \rangle. \quad (5.25)$$

An dieser Stelle sei dabei noch auf eine wichtige Problematik hingewiesen, die in Abschnitt 5.4 wieder aufgegriffen werden soll. Der neue Hamiltonoperator $\hat{f}_r(\hat{H} - \hat{E})\hat{f}_l$, der nach (5.24) die Dynamik der Zustandsvektoren im erweiterten Hilbertraum \mathcal{H} bestimmt, ist wegen der allgemeinen Wahl der Operatoren \hat{f}_l und \hat{f}_r in (5.21) nicht notwendigerweise hermitesch. Deshalb muß man die Fragen aufwerfen,

- ob einer solchen, durch einen nicht hermiteschen Hamiltonoperator generierten Dynamik überhaupt eine physikalische Bedeutung zukommt und
- ob es spezielle Operatoren \hat{f}_r und \hat{f}_l gibt, so daß der neue Hamiltonoperator doch noch hermitesch wird.

In jedem Fall besteht die Bedeutung der Erweiterung des betrachteten Hilbertraumes darin, die Einführung von zusätzlichen, frei wählbaren Operatoren \hat{f}_r und \hat{f}_l zu ermöglichen. Im nächsten Abschnitt wird näher ausgeführt, wozu diese neuen Freiheitsgrade in der Rechnung benötigt werden.

5.2.5 Die Pfadintegraldarstellung des neuen kausalen Propagators

Es wird nun näher untersucht, wie sich die Erweiterung des Hilbertraumes sowie die Einführung der Operatoren \hat{f}_r und \hat{f}_l auf die Pfadintegraldarstellung des kausalen Propagators $G_c^{(1)}$ auswirkt. Hierzu muß zunächst das Intervall $[0, s]$ auf der Pseudozeitachse analog zu (3.32) in N äquidistante Teilintervalle der Länge ϵ_s zerlegt werden. Entsprechend zu (3.37) läßt sich dann der Langzeitpropagator $G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0)$ auf die Kurzzeitpropagatoren $G^{(1)}(x_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; x_n, t_n, 0)$ zurückführen:

$$G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0) = \Theta(s) \cdot \lim_{\epsilon_s} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \int_{-\infty}^{+\infty} dt_n \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} G^{(1)}(x_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; x_n, t_n, 0) \right\}. \quad (5.26)$$

Aus (5.23) kann man den Kurzzeitpropagator $G_c^{(1)}$ direkt ablesen:

$$G^{(1)}(x_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; x_n, t_n, 0) = \langle x_{n+1}, t_{n+1} | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \cdot \hat{f}_l (\hat{H} - \hat{E}) \hat{f}_r \cdot \epsilon_s \right\} | x_n, t_n \rangle. \quad (5.27)$$

Der Satz über Kurzzeitpropagatoren aus Abschnitt 3.2.6 ermöglicht nun weitere Vereinfachungen. Wegen des Grenzüberganges in (5.26) kann man zu anderen Kurzzeitpropagatoren übergehen, die mit $G^{(1)}$ bis zur ersten Ordnung in ϵ_s übereinstimmen. Verwendet man für \hat{H} den Hamiltonoperator (3.1), so führen analoge Überlegungen wie in Abschnitt 3.2.7 zu:

$$\begin{aligned}
 G^{(1)}(x_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; x_n, t_n, 0) &\approx \langle x_{n+1}, t_{n+1} | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} f_l(x_{n+1}, t_{n+1}) \right. \\
 &\cdot \frac{\hat{p}^2}{2m} \cdot f_r(x_n, t_n) \epsilon_s \left. \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} f_l(x_{n+1}, t_{n+1}) V(x_n) f_r(x_n, t_n) \epsilon_s \right\} \\
 &\cdot \exp \left\{ +\frac{i}{\hbar} f_l(x_{n+1}, t_{n+1}) \hat{E} f_r(x_n, t_n) \epsilon_s \right\} | x_n, t_n \rangle. \quad (5.28)
 \end{aligned}$$

Der nächste Schritt besteht darin, die verbleibenden Operatoren durch ihre Eigenwerte zu ersetzen. Zu diesem Zweck erweist es sich als notwendig, eine andere Basis des erweiterten Hilbertraumes \mathcal{H} einzuführen, die von den Eigenvektoren $|p\rangle$ und $|E\rangle$ des Impulsoperators \hat{p} und des Energieoperators \hat{E} gebildet wird:

$$|p, E\rangle = |p\rangle \cdot |E\rangle. \quad (5.29)$$

Eine zweifache Anwendung der Vollständigkeitsrelation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} dE |p, E\rangle \langle p, E| = 1, \quad (5.30)$$

die Raumzeitdarstellung der Basisvektoren $|p, E\rangle$ gemäß

$$\langle x, t | p, E \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \cdot \exp \left\{ +\frac{i}{\hbar} (px - Et) \right\}, \quad (5.31)$$

und die vollständige Integration über die Energieeigenwerte E führt den Kurzzeitpropagator in (5.28) über in

$$\begin{aligned}
 G^{(1)}(x_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; x_n, t_n, 0) &\approx \delta(t_{n+1} - t_n - \epsilon_s f_l(x_{n+1}, t_{n+1}) f_r(x_n, t_n)) \\
 &\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [p_n(x_{n+1} - x_n) - \epsilon_s f_l(x_{n+1}, t_{n+1}) H(p_n, x_n) f_r(x_n, t_n)] \right\}. \quad (5.32)
 \end{aligned}$$

Infolgedessen ergibt sich der Langzeitpropagator (5.26) zu

$$\begin{aligned}
 G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0) &= \Theta(s) \cdot \lim_{\epsilon_s} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \int_{-\infty}^{+\infty} dt_n \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right\} \\
 &\cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S^{(N)} \right\} \cdot \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \delta(t_{n+1} - t_n - \epsilon_s f_l(x_{n+1}, t_{n+1}) f_r(x_n, t_n)) \right\}, \quad (5.33)
 \end{aligned}$$

mit

$$S^{(N)} = \epsilon_s \sum_{n=0}^{N-1} \left\{ p_n \frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon_s} - f_l(x_{n+1}, t_{n+1}) H(p_n, x_n) f_r(x_n, t_n) \right\}. \quad (5.34)$$

Die beiden Gleichungen (5.33) und (5.34) stellen ein wichtiges Zwischenergebnis dar. Die N Deltafunktionen führen zu den Beziehungen

$$\epsilon = \epsilon_s \cdot f_l(x_{n+1}, t_{n+1}) \cdot f_r(x_n, t_n) \quad \text{für } n = 0, 1, \dots, N-1 \quad (5.35)$$

zwischen dem Element ϵ der physikalischen Zeit t und dem Element ϵ_s der Pseudozeit s . Im Grenzübergang unendlich vieler Teilintervalle gehen diese Differenzengleichungen in eine entsprechende Differentialgleichung über:

$$\frac{d}{ds} t(s) = f_l(x(s), t(s)) \cdot f_r(x(s), t(s)). \quad (5.36)$$

Gleichung (5.36) definiert eine Zeittransformation zwischen t und s [54, (12.41)]. Während bei der physikalischen Zeit t jeder Raumpunkt mit derselben Zeitskala ausgestattet ist, wird dagegen die Skala der Pseudozeit s ortsabhängig. Deshalb bezeichnet man (5.36) auch als eine **lokale** Zeittransformation.

5.2.6 Die Vereinfachung

Um die weiteren Rechnungen zu vereinfachen, wird auf einen der beiden zusätzlichen Freiheitsgrade von \hat{f}_r und \hat{f}_l verzichtet:

$$f_l(x, t) = f(x, t) \quad \text{and} \quad f_r(x, t) = 1. \quad (5.37)$$

Die Einarbeitung dieser Spezialisierung in die obigen Formeln ermöglicht es, die bisherige Vorgehensweise kurz zusammenzufassen. Zunächst wurde eine Erweiterung des zugrundeliegenden Hilbertraumes vorgenommen, so daß der ursprüngliche kausale Propagator G_c im Hilbertraum \mathcal{H}_1 zu einem neuen kausalen Propagator $G_c^{(1)}$ im erweiterten Hilbertraum \mathcal{H} in Beziehung gesetzt werden konnte. Aus (5.22) und (5.37) folgt

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = f(x_0, t_0) \cdot \int_0^{+\infty} ds G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0). \quad (5.38)$$

Die Zerlegung des Intervalles $[0, s]$ auf der Pseudozeitachse führte dann zu einer Pfadintegraldarstellung des neuen kausalen Propagators $G_c^{(1)}$. Integriert man in (5.33) und (5.34) über die Momente, so führt die Spezialisierung (5.37) zum folgenden Lagrangeschen Pfadintegral:

$$\begin{aligned} G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0) &= \Theta(s) \cdot \lim_{\epsilon_s} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \int_{-\infty}^{+\infty} dt_n \right\} \\ &\left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s f(x_{n+1}, t_{n+1})}} \cdot \delta(t_{n+1} - t_n - \epsilon_s f(x_{n+1}, t_{n+1})) \right\} \\ &\cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} f(x_{n+1}, t_{n+1}) \epsilon_s \cdot \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{f(x_{n+1}, t_{n+1}) \epsilon_s} \right)^2 - V(x_n) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.39)$$

5.3 Die Transformation der Ortskoordinate

Im Anschluß an die soeben durchgeführte Transformation der Zeitkoordinate dient der folgende Abschnitt der Entwicklung einer weiteren Transformation, von der die Ortskoordinate betroffen ist. Das Ziel besteht darin, eine möglicherweise explizit von der Zeit t abhängige Abbildung der ursprünglichen Ortskoordinate x in eine neue Ortskoordinate q durchzuführen. Im Rahmen der Lagrangeschen Form (5.39) eines Pfadintegrals wird dies durch eine explizit von der Zeit t abhängige Punkttransformation im Konfigurationsraum gemäß

$$x = h(q, t) \quad (5.40)$$

erreicht, wobei h eine beliebige, aber invertierbare Funktion darstellt [50].

5.3.1 Die Konsequenzen für den kausalen Propagator

Setzt man Gleichung (5.40) in den Ausdruck (5.39) für den kausalen Propagator $G_c^{(1)}$ ein, so folgt:

$$\begin{aligned} G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0) &= \frac{\Theta(s)}{h'(h^{-1}(x_0, t_0), t_0)} \cdot \lim_{\epsilon_s} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_n \int_{-\infty}^{+\infty} dt_n \right\} \\ &\left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s}} \cdot \frac{h'(q_{n+1}, t_{n+1})}{\sqrt{f(h(q_{n+1}, t_{n+1}), t_{n+1})}} \cdot \delta(t_{n+1} - t_n - f(h(q_{n+1}, t_{n+1}), t_{n+1}) \epsilon_s) \right. \\ &\quad \left. \cdot \frac{h'(q_n, t_n)}{h'(q_{n+1}, t_{n+1})} \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} f(h(q_{n+1}, t_{n+1}), t_{n+1}) \epsilon_s \right. \\ &\quad \left. \cdot \left[\frac{m}{2} \left(\frac{h(q_{n+1}, t_{n+1}) - h(q_n, t_n)}{f(h(q_{n+1}, t_{n+1}), t_{n+1}) \epsilon_s} \right)^2 - V(h(q_n, t_n)) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Dabei stellt h' eine Abkürzung für die partielle Ableitung der Funktion h bezüglich der ersten Variablen q dar und h^{-1} bezeichnet das Inverse der Punkttransformation (5.40) mit

$$q = h^{-1}(x, t). \quad (5.42)$$

In (5.41) erscheint das Reziproke von $h'(h^{-1}(x_0, t_0), t_0)$ als Faktor vor dem Grenzwertprozeß. Dies legt es nahe, die Punkttransformation (5.40) im Konfigurationsraum mit einer entsprechenden Abbildung auf der Beschreibungsebene der kausalen Propagatoren zu kombinieren. Dabei soll der bisher betrachtete kausale Propagator $G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0)$ in einen neuen kausalen Propagator $G_c^{(2)}(q, t, s; q_0, t_0, 0)$ gemäß

$$G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0) = \frac{1}{h'(h^{-1}(x_0, t_0), t_0)} \cdot G_c^{(2)}(h^{-1}(x, t), t, s; h^{-1}(x_0, t_0), t_0, 0) \quad (5.43)$$

überführt werden. Aus den beiden Gleichungen (5.41) und (5.43) ersieht man unmittelbar, daß dann auch der neue kausale Propagator $G_c^{(2)}$ von Kurzzeitpropagatoren $G^{(2)}$ aufgebaut wird:

$$G_c^{(2)}(q, t, s; q_0, t_0, 0) = \Theta(s) \cdot \lim_{\epsilon_s} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_n \int_{-\infty}^{+\infty} dt_n \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} G^{(2)}(q_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; q_n, t_n, 0) \right\}. \quad (5.44)$$

Dabei läßt sich der Kurzzeitpropagator $G^{(2)}$ aus (5.41) ablesen:

$$G^{(2)}(q_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; q_n, t_n, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s}} \cdot \delta(t_{n+1} - t_n - f(h(q_{n+1}, t_{n+1}), t_{n+1}) \epsilon_s) \cdot \frac{h'(q_n, t_n)}{h'(q_{n+1}, t_{n+1})} \cdot \frac{h'(q_{n+1}, t_{n+1})}{\sqrt{f(h(q_{n+1}, t_{n+1}), t_{n+1})}} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} f(h(q_{n+1}, t_{n+1}), t_{n+1}) \epsilon_s \right. \\ \left. \cdot \left[\frac{m}{2} \left(\frac{h(q_{n+1}, t_{n+1}) - h(q_n, t_n)}{f(h(q_{n+1}, t_{n+1}), t_{n+1}) \epsilon_s} \right)^2 - V(h(q_n, t_n)) \right] \right\}. \quad (5.45)$$

5.3.2 Die Entwicklung des Kurzzeitpropagators

Es wird nun im folgenden angestrebt, den Ausdruck (5.45) schrittweise weiter zu vereinfachen. Hierzu bietet es sich an, die nach Abschnitt 3.3 bestehende Äquivalenz zwischen einem Kurzzeitpropagator und einer entsprechenden partiellen Differentialgleichung auszunutzen. Um jedoch die Ableitung der zu (5.45) gehörigen partiellen Differentialgleichung vorzubereiten, benötigt man beim Kurzzeitpropagator $G^{(2)}$ nur die jeweiligen Beiträge bis zur ersten Ordnung in ϵ_s . Hierbei muß man berücksichtigen, daß auch die Differenzen in der neuen Koordinate $q_{n+1} - q_n$ und der Zeit $t_{n+1} - t_n$ zu einer Potenzreihenentwicklung nach ϵ_s beitragen. Es gelten nämlich die Regeln:

1. Die Deltafunktion in (5.45) bewirkt

$$\Delta t_n = t_{n+1} - t_n \sim \epsilon_s. \quad (5.46)$$

2. Wie durch die explizite Auswertung der Integrale (3.66) gezeigt wird, gilt ferner

$$\Delta q_n = q_{n+1} - q_n \sim \epsilon_s^{\frac{1}{2}}. \quad (5.47)$$

Da sich die Ausführung der Entwicklung nach Potenzen von ϵ_s als eine langwierige, aber direkt ausführbare Rechnung erweist, soll hier nur das Endergebnis angegeben werden. Um eine kompakte Notation zu erreichen, werden hierzu zusätzliche Abkürzungen für die partiellen Ableitungen der Funktion h nach beiden Variablen q und t eingeführt:

$$h' = \frac{\partial}{\partial q_{n+1}} h(q_{n+1}, t_{n+1}) \quad \text{and} \quad \dot{h} = \frac{\partial}{\partial t_{n+1}} h(q_{n+1}, t_{n+1}). \quad (5.48)$$

Dann lautet der Kurzzeitpropagator:

$$\begin{aligned}
 G^{(2)}(q_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; q_n, t_n, 0) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s}} \cdot \delta(\Delta t_n - f(h, t_{n+1}) \epsilon_s) \cdot \frac{h'}{\sqrt{f(h, t_{n+1})}} \\
 &\cdot \left\{ 1 - \frac{h''}{h'} \cdot \Delta q_n + \frac{1}{2} \frac{h'''}{h'} \cdot \Delta q_n^2 - \frac{\dot{h}'}{h'} \cdot \Delta t_n \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2i\hbar \epsilon_s} \cdot \frac{h'^2}{f(h, t_{n+1})} \right. \\
 &\cdot \left[\Delta q_n^2 - \frac{h''}{h'} \cdot \Delta q_n^3 + \left(\frac{1}{3} \frac{h'''}{h'} + \frac{1}{4} \frac{h''^2}{h'^2} \right) \cdot \Delta q_n^4 + 2 \frac{\dot{h}}{h'} \cdot \Delta q_n \Delta t_n - 2 \frac{\dot{h}'}{h'} \cdot \Delta q_n^2 \Delta t_n \right. \\
 &\left. \left. - \frac{\dot{h}h''}{h'^2} \cdot \Delta q_n^2 \Delta t_n + \frac{\dot{h}^2}{h'^2} \cdot \Delta t_n^2 \right] - \frac{i}{\hbar} f(h, t_{n+1}) \epsilon_s V(h) \right\}. \quad (5.49)
 \end{aligned}$$

5.3.3 Die erste Bedingung

Bisher wurden f und h als invertierbare, aber ansonsten beliebige Funktionen von x, t und q, t angesehen. Gleichung (5.49) läßt sich nun aber in zweifacher Hinsicht entscheidend vereinfachen, wenn man zwischen f und h eine Beziehung fordert, die als **erste Bedingung** bezeichnet werden soll:

$$f(h(q, t), t) = h'(q, t)^2. \quad (5.50)$$

Mit (5.50) und der Substitution $\Delta t_n = \epsilon_s h'^2$ entsprechend der Anforderung der Deltafunktion geht (5.49) über in

$$\begin{aligned}
 G^{(2)}(q_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; q_n, t_n, 0) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s}} \cdot \delta(\Delta t_n - \epsilon_s h'^2) \cdot \left\{ 1 - \frac{h''}{h'} \cdot \Delta q_n \right. \\
 &+ \left. \frac{1}{2} \frac{h'''}{h'} \cdot \Delta q_n^2 - \dot{h}' h' \epsilon_s \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2i\hbar \epsilon_s} \cdot \left[\Delta q_n^2 - \frac{h''}{h'} \cdot \Delta q_n^3 + \left(\frac{1}{3} \frac{h'''}{h'} + \frac{1}{4} \frac{h''^2}{h'^2} \right) \cdot \Delta q_n^4 \right. \right. \\
 &\left. \left. + 2\dot{h}h' \cdot \Delta q_n \epsilon_s - 2\dot{h}'h' \cdot \Delta q_n^2 \epsilon_s - \dot{h}h'' \cdot \Delta q_n^2 \epsilon_s + \dot{h}^2 h'^2 \epsilon_s^2 \right] - \frac{i}{\hbar} \epsilon_s h'^2 V(h) \right\}. \quad (5.51)
 \end{aligned}$$

Dabei besteht die entscheidende Bedeutung der ersten Bedingung (5.50) darin, daß man im ersten Term der Exponentialfunktion von (5.51) den Ausdruck für das freie Teilchen bezüglich der neuen Koordinate q erhält. Dies kann als ein erster Schritt dafür angesehen werden, daß man nach den einzelnen Transformationen das Lagrangesche Pfadintegral wieder zurückgewinnt. Darüber hinaus gestattet der obige Ausdruck für das freie Teilchen, daß man im nächsten Abschnitt die für die Entwicklungsregel (5.47) notwendigen Integrale (3.66) erhält. Damit stellt diese erste Bedingung (5.50) letztendlich eine **Konsistenzbedingung** dar, die die schon durchgeführte Potenzreihenentwicklung nach ϵ_s im nachhinein rechtfertigt.

Der kausale Langzeitpropagator $G_c^{(2)}$ kann abschließend aus den Gleichungen (5.44) und (5.51) abgeleitet werden:

$$\begin{aligned}
 G_c^{(2)}(q, t, s; q_0, t_0, 0) &= \Theta(s) \cdot \lim_{\epsilon_s} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_n \int_{-\infty}^{+\infty} dt_n \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s}} \right. \\
 &\cdot \delta(\Delta t_n - \epsilon_s h'^2) \cdot \left\{ 1 - \frac{h''}{h'} \cdot \Delta q_n + \frac{1}{2} \frac{h'''}{h'} \cdot \Delta q_n^2 - \dot{h}' h' \epsilon_s \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2i \hbar \epsilon_s} \right. \\
 &\cdot \left[\Delta q_n^2 - \frac{h''}{h'} \cdot \Delta q_n^3 + \left(\frac{1}{3} \frac{h'''}{h'} + \frac{1}{4} \frac{h''^2}{h'^2} \right) \cdot \Delta q_n^4 + 2 \dot{h}' h' \cdot \Delta q_n \epsilon_s - 2 \dot{h}' h' \cdot \Delta q_n^2 \epsilon_s \right. \\
 &\quad \left. \left. - \dot{h}' h'' \cdot \Delta q_n^2 \epsilon_s + \dot{h}^2 h'^2 \epsilon_s^2 \right] - \frac{i}{\hbar} \epsilon_s h'^2 V(h) \right\} \left. \right\}. \tag{5.52}
 \end{aligned}$$

$G_c^{(2)}$ ist der Propagator der Wellenfunktion

$$\langle q, t | \Psi^{(2)}(s) \rangle = \Psi^{(2)}(q, t, s) \tag{5.53}$$

und vermittelt in Analogie zu Gleichung (5.25) zwischen Zuständen mit aufeinanderfolgenden Werten der Pseudozeit s :

$$\Psi^{(2)}(q, t, s) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_0 G_c^{(2)}(q, t, s; q_0, t_0, 0) \cdot \Psi^{(2)}(q_0, t_0, 0). \tag{5.54}$$

5.4 Die Transformation der Wellenfunktion

Wenn man direkt die zu (5.51) gehörige partielle Differentialgleichung berechnet, stößt man auf zwei Probleme:

1. Wegen der Transformation der Zeitkoordinate muß der neue Hamiltonoperator nicht mehr hermitesch sein.
2. Der neue Hamiltonoperator kann eine einfache partielle Ableitung bezüglich der neuen Ortskoordinate q enthalten.

Um zumindest eines dieser beiden Probleme zu erledigen, wird in diesem Abschnitt eine beliebige, komplexwertige Funktion $g = g(q, t)$ im Zusammenhang mit einer weiteren Transformation der Wellenfunktion eingeführt.

5.4.1 Die Einführung einer neuen Funktion

Neben einer Transformation der Zeit- und der Ortskoordinate soll nun auch noch eine Transformation der Wellenfunktion durchgeführt werden. Damit die axiomatisch geforderte **lineare** Struktur der Quantenmechanik hierdurch nicht zerstört wird, kommt nur eine **lineare** Abbildung der bisherigen Wellenfunktion $\Psi^{(2)}$ von Gleichung (5.53) in eine neue Wellenfunktion $\Psi^{(3)}$ in Frage. Hierbei tritt eine beliebige, komplexwertige Funktion g als neuer Freiheitsgrad auf:

$$\Psi^{(2)}(q, t, s) = g(q, t) \cdot \Psi^{(3)}(q, t, s). \quad (5.55)$$

Setzt man (5.55) in die Evolution (5.54) von $\Psi^{(2)}$ ein, so erhält man die entsprechende Zeitentwicklung von $\Psi^{(3)}$:

$$\Psi^{(3)}(q, t, s) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_0 \left\{ \frac{g(q_0, t_0)}{g(q, t)} \cdot G_c^{(2)}(q, t, s; q_0, t_0, 0) \right\} \cdot \Psi^{(3)}(q_0, t_0, 0). \quad (5.56)$$

Damit führt die lineare Transformation der Wellenfunktion (5.55) zu einer entsprechenden Transformation der kausalen Propagatoren von $G_c^{(2)}$ nach $G_c^{(3)}$:

$$G_c^{(3)}(q, t, s; q_0, t_0, 0) = \frac{g(q_0, t_0)}{g(q, t)} \cdot G_c^{(2)}(q, t, s; q_0, t_0, 0). \quad (5.57)$$

5.4.2 Die Berechnung des Kurzzeitpropagators

Die unmittelbar einsichtige Identität

$$1 = \frac{g(q, t)}{g(q_0, t_0)} \cdot \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \frac{g(q_n, t_n)}{g(q_{n+1}, t_{n+1})} \right\} \quad (5.58)$$

wird nun in Gleichung (5.52) verwendet. Vergleicht man das Resultat mit der Beziehung (5.57) zwischen den kausalen Langzeitpropagatoren $G_c^{(2)}$ und $G_c^{(3)}$, so gewinnt man eine ähnliche Beziehung zwischen den entsprechenden Kurzzeitpropagatoren $G^{(2)}$ und $G^{(3)}$:

$$G^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; q_n, t_n, 0) = \frac{g(q_n, t_n)}{g(q_{n+1}, t_{n+1})} \cdot G^{(2)}(q_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; q_n, t_n, 0). \quad (5.59)$$

Auch hier ist man an dem Kurzzeitpropagator $G^{(3)}$ nur bis zur ersten Ordnung in ϵ_s interessiert. Da $G^{(2)}$ daraufhin schon in (5.51) untersucht worden ist, muß man nur noch den Quotienten $g(q_n, t_n)/g(q_{n+1}, t_{n+1})$ betrachten. Wendet man die beiden Entwicklungsregeln (5.46) und (5.47) an, so erhält man mit den analogen Abkürzungen wie in (5.48):

$$\frac{g(q_n, t_n)}{g(q_{n+1}, t_{n+1})} = 1 - \frac{g'}{g} \cdot \Delta q_n + \frac{1}{2} \frac{g''}{g} \cdot \Delta q_n^2 - \frac{\dot{g}}{g} \cdot h'^2 \epsilon_s. \quad (5.60)$$

Die Kombination der Gleichungen (5.51), (5.59) und (5.60) führt dann direkt auf einen bis zur ersten Ordnung in ϵ_s exakten Ausdruck für den Kurzzeitpropagator $G^{(3)}$:

$$\begin{aligned} G^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; q_n, t_n, 0) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s}} \cdot \delta(\Delta t_n - \epsilon_s h'^2) \cdot \left\{ 1 - \frac{g'}{g} \cdot \Delta q_n + \frac{1}{2} \frac{g''}{g} \cdot \Delta q_n^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{\dot{g}}{g} \cdot h'^2 \epsilon_s \right\} \cdot \left\{ 1 - \frac{h''}{h'} \cdot \Delta q_n + \frac{1}{2} \frac{h'''}{h'} \cdot \Delta q_n^2 - \dot{h}' h' \epsilon_s \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2i \hbar \epsilon_s} \left[\Delta q_n^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{h''}{h'} \cdot \Delta q_n^3 + \left(\frac{1}{3} \frac{h'''}{h'} + \frac{1}{4} \frac{h''^2}{h'^2} \right) \cdot \Delta q_n^4 + 2 \dot{h}' h' \cdot \Delta q_n \epsilon_s - 2 \dot{h}' h' \cdot \Delta q_n^2 \epsilon_s \right] \right\} \end{aligned}$$

$$-\dot{h}h'' \cdot \Delta q_n^2 \epsilon_s + \dot{h}^2 h'^2 \epsilon_s^2 \left] - \frac{i}{\hbar} \epsilon_s h'^2 V(h) \right\}. \quad (5.61)$$

5.4.3 Die Bestimmung der partiellen Differentialgleichung

Nach all diesen vorbereitenden Überlegungen wird nun diejenige partielle Differentialgleichung für die neue Wellenfunktion $\Psi^{(3)}$ abgeleitet, die dem Kurzzeitpropagator $G^{(3)}$ entspricht. Dabei wird die partielle Ableitung der Wellenfunktion $\Psi^{(3)}$ bezüglich der Pseudozzeit s wie gewöhnlich als der Grenzwert eines Differenzenquotienten definiert:

$$\frac{\partial}{\partial s} \Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s) = \lim_{\epsilon_s \rightarrow 0} \frac{\Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s + \epsilon_s) - \Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s)}{\epsilon_s}. \quad (5.62)$$

Um (5.62) auswerten zu können, muß man berücksichtigen, daß die beiden Wellenfunktionen $\Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s)$ und $\Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s + \epsilon_s)$ über die Kurzzeitentwicklung

$$\Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s + \epsilon_s) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq_n \int_{-\infty}^{+\infty} dt_n G^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, \epsilon_s; q_n, t_n, 0) \cdot \Psi^{(3)}(q_n, t_n, s) \quad (5.63)$$

miteinander verknüpft sind. Deshalb wird der Kurzzeitpropagator (5.61) in (5.63) eingesetzt und eine Substitution der Integrationsvariablen gemäß

$$\xi_n(q_n) = q_n - q_{n+1} = -\Delta q_n \quad \text{und} \quad \tau_n(t_n) = t_n - t_{n+1} = -\Delta t_n \quad (5.64)$$

vorgenommen. Wendet man die beiden durch (5.46) und (5.47) gegebenen Entwicklungsregeln an, so läßt sich mit Ausnahme des Beitrages vom freien Teilchen der vollständige Integrand in eine Potenzreihe von ϵ_s entwickeln. Führt man darüber hinaus noch die Integration über die Zeitdifferenzen τ_n explizit aus, so erhält man als Zwischenergebnis bis zur ersten Ordnung in ϵ_s

$$\begin{aligned} \Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s + \epsilon_s) = & \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s}} \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2i \hbar \epsilon_s} \xi^2 \right\} \cdot \left[1 - \frac{m}{2i \hbar \epsilon_s} \cdot \right. \\ & \left. \left\{ \frac{h''}{h'} \xi^3 + \left(\frac{1}{3} \frac{h'''}{h'} + \frac{5}{4} \frac{h''^2}{h'^2} \right) \xi^4 - 2\dot{h}h'\xi\epsilon_s - 2\dot{h}'h'\xi^2\epsilon_s - 3\dot{h}h''\xi^2\epsilon_s + \dot{h}^2 h'^2 \epsilon_s^2 \right\} \right. \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{m}{2i \hbar \epsilon_s} \right)^2 \cdot \left\{ \frac{h''^2}{h'^2} \xi^6 - 4\dot{h}h''\xi^4\epsilon_s + 4\dot{h}^2 h'^2 \xi^2 \epsilon_s^2 \right\} - \frac{i}{\hbar} \epsilon_s h'^2 V(h) + 1 + \frac{g'}{g} \xi \\ & + \left(\frac{1}{2} \frac{g''}{g} + \frac{g'}{g} \frac{h''}{h'} \right) \xi^2 - \frac{\dot{g}}{g} h'^2 \epsilon_s - \frac{m}{2i \hbar \epsilon_s} \cdot \left\{ \frac{g'}{g} \frac{h''}{h'} \xi^4 - 2\frac{g'}{g} \dot{h}h'\xi^2\epsilon_s \right\} + \frac{h''}{h'} \xi + \frac{1}{2} \frac{h'''}{h'} \xi^2 \\ & \left. - \dot{h}'h'\epsilon_s \right] \cdot \left\{ 1 + \xi \cdot \frac{\partial}{\partial q_{n+1}} + \frac{1}{2} \xi^2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial q_{n+1}^2} - h'^2 \epsilon_s \cdot \frac{\partial}{\partial t_{n+1}} \right\} \Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s). \quad (5.65) \end{aligned}$$

Die verbleibenden Integrale sind von der Form (3.66), so daß die Entwicklungsregel (5.47) gerechtfertigt ist. Verwendet man die Gleichungen (5.62), (5.65) und (3.66), so kann man schließlich die partielle Differentialgleichung für $\Psi^{(3)}$ angeben

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s) = & \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial q_{n+1}^2} - \frac{\hbar^2}{m} \left[\frac{g'}{g} - \frac{1}{2} \frac{h''}{h'} - \frac{im}{\hbar} \dot{h}h' \right] \cdot \frac{\partial}{\partial q_{n+1}} + \right. \\
 & \left. + V^{(3)} - i\hbar h'^2 \cdot \frac{\partial}{\partial t_{n+1}} \right\} \Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s), \quad (5.66)
 \end{aligned}$$

wobei das Potential $V^{(3)}$ als Abkürzung eingeführt wurde:

$$V^{(3)} = h'^2 V(h) - i\hbar \frac{\dot{g}}{g} h'^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left\{ \frac{g''}{g} - \frac{g'}{g} \cdot \left[\frac{h''}{h} + \frac{2im}{\hbar} h' \dot{h} \right] \right\}. \quad (5.67)$$

5.4.4 Die zweite Bedingung

Bisher wurde die erstmals in (5.55) eingeführte komplexwertige Funktion g nicht weiter spezifiziert. Um nun jedoch formal eine Schrödinger-Gleichung für die neue Wellenfunktion $\Psi^{(3)}$ ableiten zu können, muß die erste partielle Ableitung bezüglich der neuen Ortskoordinate q_{n+1} in (5.66) verschwinden. Deshalb muß man die sogenannte **zweite Bedingung** fordern, die als eine partielle Differentialgleichung für die komplexwertige Funktion g aufgefaßt werden kann:

$$\frac{g'}{g} = \frac{1}{2} \frac{h''}{h'} + \frac{im}{\hbar} \dot{h}h'. \quad (5.68)$$

Führt man die Integration dieser partiellen Differentialgleichung aus, so gewinnt man eine Beziehung zwischen der Transformation der Ortskoordinate und der Transformation der Wellenfunktion:

$$g(q, t) = \sqrt{h'(q, t)} \cdot \exp \left\{ \frac{im}{\hbar} \int^q \dot{h}(\tilde{q}, t) h'(\tilde{q}, t) d\tilde{q} \right\}. \quad (5.69)$$

Mit Hilfe von (5.69) gehen dann die partiellen Differentialgleichung (5.66) und das Potential (5.67) über in

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s) = & \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial q_{n+1}^2} + V^{(3)} \right. \\
 & \left. - i\hbar h'^2 \cdot \frac{\partial}{\partial t_{n+1}} \right\} \Psi^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}, s), \quad (5.70)
 \end{aligned}$$

$$V^{(3)} = h'^2 \int h' \left\{ m\ddot{h} + \frac{\partial V(h)}{\partial h} \right\} dq_{n+1} - i\hbar \dot{h}'h' + \frac{\hbar^2}{m} \left\{ \frac{3}{8} \frac{h''^2}{h'^2} - \frac{1}{4} \frac{h'''}{h'} \right\}. \quad (5.71)$$

5.4.5 Die Transformationsformel für Propagatoren

Als nächstes vollzieht man wieder den Übergang von der Beschreibungsebene der partiellen Differentialgleichung zu der der Pfadintegrale. Wendet man die in [16] ausführlich dargelegten Techniken an, so lautet das zu (5.70) gehörige Pfadintegral für den kausalen Propagator $G_c^{(3)}$:

$$G_c^{(3)}(q, t, s; q_0, t_0, 0) = \Theta(s) \lim_{\epsilon_s} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_n \int_{-\infty}^{+\infty} dt_n \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \delta(t_{n+1} - t_n - \epsilon_s h'(q_{n+1}, t_{n+1})^2) \right. \\ \left. \cdot \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s}} \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon_s \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_s} \right)^2 - V^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}) \right] \right\}. \quad (5.72)$$

Damit sind im Laufe der bisherigen Rechnungen alle Vorteile ausgenutzt worden, die sich durch die Erweiterung des ursprünglichen Hilbertraumes \mathcal{H}_1 zu dem neuen Hilbertraum \mathcal{H} ergeben haben. Es wird nun notwendig, an dieser Stelle die vorgenommene Erweiterung rückgängig zu machen, um letztendlich wieder ein gewöhnliches Lagrangesches Pfadintegral zu erhalten. Hierzu werden die Zeitintegrale in (5.72) ausgewertet.

Zunächst führen die N Deltafunktionen dazu, daß ein Satz von Differenzgleichungen entsteht, der mit (5.35), der Spezialisierung $f_l = f, f_r = 1$ in (5.37) und der ersten Bedingung (5.50) konsistent ist:

$$t_{n+1} - t_n = \epsilon_s \cdot h'(q_{n+1}, t_{n+1})^2 \quad \text{for } n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (5.73)$$

Diese N Differenzgleichungen werden sukzessive von $n = N-1$ bis $n = 0$ gelöst. Man gewinnt einen Iterationsprozeß, der die Werte von t_n in Abhängigkeit von ϵ_s und der als vorgegeben betrachteten Endzeit t festlegt:

$$t_n = t_n(\epsilon_s, t) \quad \text{for } n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (5.74)$$

Die Lösung dieser Iteration (5.73) lautet

$$t - t_n = \sum_{m=n}^{N-1} \epsilon_s \cdot h'(q_{m+1}, t_{m+1})^2 \quad \text{for } n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (5.75)$$

In (5.72) übertrifft die Anzahl der Deltafunktionen die Anzahl der Zeitintegrale genau um eins. Dies hat zur Folge, daß eine einzige Deltafunktion die $N-1$ Zeitintegrale überlebt. Wählt man für diese verbleibende Deltafunktion die Fourierdarstellung, so gilt

$$G_c^{(3)}(q, t, s; q_0, t_0, 0) = \Theta(s) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi \hbar} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E(t - t_0) \right\} \lim_{\epsilon_s} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_n \right\} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s} \right)^{\frac{N}{2}} \\ \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon_s \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_s} \right)^2 - V^{(3)}(q_{n+1}, t_{n+1}) + E \cdot h'(q_{n+1}, t_{n+1})^2 \right] \right\}, \quad (5.76)$$

wobei t_n durch (5.75) gegeben ist.

Kombiniert man die aufeinanderfolgenden Transformationen des Propagators (5.38), (5.43) und (5.57) mit (5.76), so läßt sich das Gesamtergebnis in Form einer Transformationsformel für Propagatoren festhalten. Der ursprüngliche Propagator G_c bezüglich der Ortskoordinate x und der Zeitkoordinate t wird in einen neuen kausalen Propagator $G_{c,E}^{(4)}$ bezüglich der Ortskoordinate q und der Pseudozeit s abgebildet:

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = F(x, t; x_0, t_0) \cdot \int_0^{+\infty} ds \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)\right\} \cdot G_{c,E}^{(4)}(h^{-1}(x, t), s; h^{-1}(x_0, t_0), 0). \quad (5.77)$$

Der Vergleich mit (5.69) liefert dabei den Vorfaktor F zu

$$F(x, t; x_0, t_0) = \sqrt{h'(h^{-1}(x, t), t) \cdot h'(h^{-1}(x_0, t_0), t_0)} \cdot \exp\left\{\frac{im}{\hbar} \cdot \left[\int^{h^{-1}(x, t)} \dot{h}(q, t)h'(q, t) dq - \int^{h^{-1}(x_0, t_0)} \dot{h}(q, t_0)h'(q, t_0) dq \right]\right\}. \quad (5.78)$$

Für den kausalen Propagator $G_{c,E}^{(4)}$ gewinnt man eine Darstellung in Form eines gewöhnlichen Lagrangeschen Pfadintegrals mit dem Potential $V_E^{(4)}$. Dessen diskrete Version lautet:

$$G_{c,E}^{(4)}(q, s; q_0, 0) = \Theta(s) \cdot \lim_{\epsilon_s} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_n \right\} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s} \right)^{\frac{N}{2}} \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \epsilon_s \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_s} \right)^2 - V_E^{(4)}(q_{n+1}, t_{n+1}) \right]\right\}. \quad (5.79)$$

Dabei erhält man aus (5.71) das Potential $V_E^{(4)}$ (vgl. [50])

$$V_E^{(4)} = h'^2 \left[\int h' \left\{ m\ddot{h} + \frac{\partial V(h)}{\partial h} \right\} dq_{n+1} - E \right] - i\hbar \dot{h}' h' + \frac{\hbar^2}{m} \left\{ \frac{3}{8} \frac{h''^2}{h'^2} - \frac{1}{4} \frac{h'''}{h'} \right\}, \quad (5.80)$$

wobei die in (5.48) eingeführte Abkürzungen verwendet wurden und t_n durch (5.75) gegeben ist.

Die Beziehung (5.80) zwischen dem ursprünglichen Potential V und dem neuen Potential $V_E^{(4)}$ kann als eine Potenzreihenentwicklung nach dem Planckschen Wirkungsquantum $\hbar = 2\pi\hbar$ angesehen werden, die exakt nach der zweiten Ordnung abbricht. Dieses Ergebnis ist konsistent mit der Tatsache, daß auch die Schrödinger-Gleichung eine Potenzreihenentwicklung nach dem Planckschen Wirkungsquantum $\hbar = 2\pi\hbar$ darstellt, die exakt nach der

zweiten Ordnung abbricht.

Im Rahmen der Potenzreihenentwicklung (5.80) fällt insbesondere die Ordnung \hbar^0 auf. Dieser Term scheint die Gültigkeit der klassischen Newton-Gleichung für die noch willkürliche Funktion $h = h(q, t)$ zu verlangen. Die genaue physikalische Bedeutung dieses Termes ist derzeit jedoch unklar.

Die Ordnung \hbar^1 zeigt dagegen, daß das erste der beiden Probleme, die zu Beginn dieses Abschnittes angeführt worden sind, nicht beseitigt werden konnte. Einerseits wurde durch die Forderung der zweiten Bedingung (5.68) beziehungsweise (5.69) eine erste partielle Ableitung bezüglich der neuen Orskoordinate im entsprechenden Hamiltonoperator verhindert. Andererseits führt jedoch der möglicherweise imaginäre Beitrag im Potential $V_E^{(4)}$ dazu, daß der neue Hamiltonoperator im allgemeinen nicht hermitesch ist.

5.5 Die Transformation der entsprechenden partiellen Differentialgleichung

Die bisherige Herleitung der Transformationsformel für Propagatoren (5.77) beruhte auf der Anwendung der unterschiedlichen Methoden, die die globale Beschreibungsebene der Pfadintegrale zur Verfügung stellt. Im Unterschied zu diesem sehr aufwendigen Zugang soll nun gezeigt werden, daß dasselbe Ergebnis viel schneller auch auf der lokalen Beschreibungsebene der partiellen Differentialgleichungen gewonnen werden kann. In diesem Sinne wird im folgenden untersucht, wie sich die hintereinander auszuführenden Transformationen der Zeitkoordinate, der Ortskoordinate und der Wellenfunktion im einzelnen in die entsprechende Differentialgleichung einarbeiten lassen. Diese Betrachtungsweise eröffnet darüber hinaus die Möglichkeit, die verschiedenen aber mathematisch zueinander äquivalenten Berechnungsmethoden für kausale Propagatoren miteinander zu vergleichen (vgl. [53]).

5.5.1 Die Bewegungsgleichung

Aus der Definition (5.6) des kausalen Propagators G_c und dem Schrödinger-Anfangswertproblem (3.27), (3.28) für den Propagator G läßt sich direkt die Bewegungsgleichung für den kausalen Propagator G_c ableiten. Man erhält eine inhomogene partielle Differentialgleichung:

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x) \right\} G_c(x, t; x_0, t_0) = i\hbar \delta(x - x_0) \delta(t - t_0). \quad (5.81)$$

Dabei entspricht die linke Seite der Schrödinger-Gleichung (3.27) und die rechte Seite der Anfangsbedingung (3.28).

5.5.2 Die Transformation der Zeitkoordinate

Für die Einarbeitung der Transformation der Zeitkoordinate benötigt man zwei verschiedene Schritte. Zunächst wird eine beliebige Funktion f dadurch eingeführt, daß die Gleichung

(5.81) mit dem Quotienten $f(x, t)/f(x_0, t_0)$ durchmultipliziert wird. Aufgrund der Eigenschaften der Deltafunktion wird die Inhomogenität durch diese mathematische Operation nicht verändert:

$$f(x, t) \cdot \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x) \right\} \frac{G_c(x, t; x_0, t_0)}{f(x_0, t_0)} = i\hbar \delta(x - x_0) \delta(t - t_0). \quad (5.82)$$

Daraufhin wird die Dimension des Problems erweitert, indem als zusätzliche Größe die Pseudozeit s eingeführt wird. Hierzu betrachtet man die Bewegungsgleichung eines neuen kausalen Propagators $G_c^{(1)}$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0) = f(x, t) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right\} G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0) + i\hbar \delta(x - x_0) \delta(t - t_0) \delta(s). \quad (5.83)$$

Wertet man die Integration von (5.83) über die Pseudozeit s im Intervall $[0, +\infty)$ aus und verwendet man die gewöhnlichen Anfangs- und Randbedingungen für $G_c^{(1)}$ bezüglich s gemäß

$$G_c^{(1)}(x, t, 0; x_0, t_0, 0) = 0 \quad \text{für} \quad x \neq x_0, t \neq t_0, \quad (5.84)$$

$$G_c^{(1)}(x, t, +\infty; x_0, t_0, 0) = 0, \quad (5.85)$$

so erhält man:

$$f(x, t) \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x) \right\} \int_0^{+\infty} ds G_c^{(1)}(x, t, s; x_0, t_0, 0) = i\hbar \delta(x - x_0) \delta(t - t_0). \quad (5.86)$$

Der Vergleich von (5.82) mit (5.86) liefert dann eine Beziehung zwischen den beiden kausalen Propagatoren G_c und $G_c^{(1)}$, die mit (5.38) übereinstimmt.

5.5.3 Die Transformation der Ortskoordinate

Die beliebige Funktion h wird dadurch in die Rechnung eingeführt, daß die Transformation (5.40) der alten Ortskoordinate x in die neue Ortskoordinate q in (5.83) vorgenommen wird. Wenn die Eigenschaften der Deltafunktion sorgsam angewendet werden, führt eine etwas längere Rechnung zu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} G_c^{(1)}(h(q, t), t, s; h(q_0, t_0), t_0, 0) = \frac{f(h(q, t), t)}{h'(q, t)^2} \cdot \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left[\frac{h''(q, t)}{h'(q, t)} + \frac{2im}{\hbar} h'(q, t) \dot{h}(q, t) \right] \frac{\partial}{\partial q} + h'(q, t)^2 V(h(q, t)) - i\hbar h'(q, t)^2 \frac{\partial}{\partial t} \right\} G_c^{(1)}(h(q, t), t, s; h(q_0, t_0), t_0, 0) + i\hbar \frac{1}{h'(q_0, t_0)} \delta(q - q_0) \delta(t - t_0) \delta(s). \quad (5.87)$$

Zur Vereinfachung der Notation wird die Transformation des kausalen Propagators $G_c^{(1)}$ in den neuen kausalen Propagator $G_c^{(2)}$ gemäß (5.43) durchgeführt. Darüber hinaus wird die erste Bedingung (5.50) gefordert, um den Ausdruck für das freie Teilchen bezüglich der neuen Ortskoordinate q zu gewinnen. Die Bewegungsgleichung für den kausalen Propagator $G_c^{(2)}$ lautet dann:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial s} G_c^{(2)}(q, t, s; q_0, t_0, 0) = & \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{h''(q, t)}{h'(q, t)} \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{2im}{\hbar} h'(q, t) \dot{h}(q, t) \right] \frac{\partial}{\partial q} + h'(q, t)^2 V(h(q, t)) - i\hbar h'(q, t)^2 \frac{\partial}{\partial t} \right\} \\
 & G_c^{(2)}(q, t, s; q_0, t_0, 0) + i\hbar \delta(q - q_0) \delta(t - t_0) \delta(s). \tag{5.88}
 \end{aligned}$$

5.5.4 Die Transformation der Wellenfunktion

Der nächste Schritt besteht darin, die lineare Transformation der Wellenfunktion entsprechend (5.55) zu realisieren. Sie ist nach (5.57) mit einer Transformation des kausalen Propagators $G_c^{(2)}$ in $G_c^{(3)}$ verknüpft. Dann gewinnt man aus (5.57) und (5.88) eine partielle Differentialgleichung für $G_c^{(3)}$:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial s} G_c^{(3)}(q, t, s; q_0, t_0, 0) = & \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{\hbar^2}{m} \cdot \left[\frac{g'(q, t)}{g(q, t)} \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{1}{2} \frac{h''(q, t)}{h'(q, t)} - \frac{im}{\hbar} h'(q, t) \dot{h}(q, t) \right] \frac{\partial}{\partial q} + V^{(3)}(q, t) - i\hbar h'(q, t)^2 \frac{\partial}{\partial t} \right\} \\
 & G_c^{(3)}(q, t, s; q_0, t_0, 0) + i\hbar \delta(q - q_0) \delta(t - t_0) \delta(s), \tag{5.89}
 \end{aligned}$$

wobei $V^{(3)}$ durch (5.67) gegeben ist. Die zu (5.89) gehörige partielle Differentialgleichung für die Wellenfunktion $\Psi^{(3)}$ ist gerade (5.66) und (5.67). Deshalb lassen sich von nun an dieselben Überlegungen wie in den Abschnitten 5.4.4 und 5.4.5 vornehmen, so daß man letztendlich auch auf diesem Wege die Transformationsformel für Propagatoren (5.77) erhält.

5.6 Die Spezialfälle

Die Transformationsformel für Propagatoren (5.77) beschreibt eine ganze Familie von Abbildungen zwischen verschiedenen quantenmechanischen Systemen. Jede Funktion $h = h(q, t)$ erzeugt eine Transformation, die ein gegebenes quantenmechanisches System mit dem Potential V in neues überführt, das durch $V_E^{(4)}$ gemäß (5.80) definiert ist. Indem spezielle Funktionen $h = h(q, t)$ gewählt werden, lassen sich zwei interessante Situationen diskutieren, die im folgenden Sinne als zueinander dual angesehen werden können:

1. Spezialfall: Die Funktion h hängt nicht explizit von der Zeit t ab

$$h(q, t) = h(q), \tag{5.90}$$

so daß die rechte Seite der Differenzgleichungen (5.73) nur eine Funktion der neuen Ortsvariablen q darstellt

$$t_{n+1} - t_n = \epsilon_s \cdot h'(q_{n+1})^2 \quad \text{for } n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (5.91)$$

2. Spezialfall: Wenn die Funktion h linear von der Ortskoordinate q abhängt

$$h(q, t) = q \cdot c(t), \quad (5.92)$$

dann wird die rechte Seite der Differenzgleichung (5.73) ausschließlich eine Funktion der Zeit t

$$t_{n+1} - t_n = \epsilon_s \cdot c(t_{n+1})^2 \quad \text{for } n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (5.93)$$

5.6.1 Die Propagatortransformation von Duru und Kleinert

Im Falle der Spezialisierung (5.90) wird das transformierte Potential $V_E^{(4)}$ in (5.80) unabhängig von t_n . Deshalb erweist es sich als nicht notwendig, die explizite Lösung der Differenzgleichungen (5.91) in das Potential $V_E^{(4)}$ einzusetzen. Berücksichtigt man die Gleichungen von (5.77) bis (5.80), so erhält man aus (5.90) eine Familie von Transformationen, die in der Literatur als die Propagatortransformationen von Duru und Kleinert bekannt geworden sind [54, Kapitel 14]:

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = \sqrt{h'(h^{-1}(x)) \cdot h'(h^{-1}(x_0))} \cdot \int_0^{+\infty} ds \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0)\right\} \cdot G_{c,E}^{(4)}(h^{-1}(x), s; h^{-1}(x_0), 0), \quad (5.94)$$

$$G_{c,E}^{(4)}(q, s; q_0, 0) = \Theta(s) \cdot \lim_{\epsilon_s} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_n \right\} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s} \right)^{\frac{N}{2}} \cdot \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon_s \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_s} \right)^2 - V_E^{(4)}(q_{n+1}) \right] \right\}, \quad (5.95)$$

$$V_E^{(4)}(q) = h'(q)^2 \{V(h(q)) - E\} + \frac{\hbar^2}{m} \left\{ \frac{3}{8} \frac{h''(q)^2}{h'(q)^2} - \frac{1}{4} \frac{h'''(q)}{h'(q)} \right\}. \quad (5.96)$$

Da sich auf diese Weise die Propagatortransformationen von Duru und Kleinert als möglicher Spezialfall ergeben, erscheint es gerechtfertigt, die in diesem Kapitel abgeleiteten Transformationen als eine Verallgemeinerung dieser Propagatortransformationen von Duru und Kleinert zu bezeichnen.

5.6.2 Die Transformation auf das freie Teilchen

Bevor im nächsten Abschnitt der zweite Spezialfall näher diskutiert wird, soll zunächst der Frage nachgegangen werden, ob man prinzipiell ein quantenmechanisches System mittels einer Duru-Kleinert-Transformation auf das denkbar einfachste quantenmechanische System des freien Teilchens abbilden kann. Deshalb wird nun nach einer Funktion $h = h(q)$ gesucht, die ein vorgegebenes Potential V in das Potential

$$V_E^{(4)}(q) = 0 \quad (5.97)$$

des freien Teilchens überführt. Die Kombination der beiden Gleichungen (5.96) und (5.97) ergibt dann eine nichtlineare, gewöhnliche Differentialgleichung dritter Ordnung für diese gesuchte Funktion $h = h(q)$:

$$\frac{\hbar^2}{m} \cdot \left\{ \frac{3 h''(q)^2}{8 h'(q)^2} - \frac{1}{4} \frac{h'''(q)}{h'(q)} \right\} + h'(q)^2 \cdot V(h(q)) = h'(q)^2 \cdot E. \quad (5.98)$$

Da (5.98) nicht explizit von der Ortskoordinate q abhängt, kann deren Ordnung durch eine geschickte Transformation reduziert werden [49, S. 449]. Hierzu betrachtet man die gesamte Funktion $h = h(q)$ als eine neue Variable p :

$$p = h(q). \quad (5.99)$$

Die neue Funktion $h_1 = h_1(p)$ wird dann mit der ersten Ableitung der gesuchten Funktion $h = h(q)$ identifiziert:

$$h_1(p) = h'(q). \quad (5.100)$$

Ist die Funktion $h_1 = h_1(p)$ bekannt, so gehen (5.99) und (5.100) in eine gewöhnliche Differentialgleichung für die Funktion $h = h(q)$ über:

$$h_1(h(q)) = h'(q). \quad (5.101)$$

(5.99) und (5.100) dienen ferner dazu, die zweite und die dritte Ableitung der ursprünglichen Funktion $h = h(q)$ mit der neuen Funktion $h_1 = h_1(p)$ in Verbindung zu bringen. Wählt man die Abkürzungen

$$h'_1(p) = \frac{d}{dp} h_1(p) \quad \text{und} \quad h'(q) = \frac{d}{dq} h(q), \quad (5.102)$$

so gilt

$$\frac{h''(q)}{h'(q)} = h'_1(p) \quad \text{und} \quad \frac{h'''(q)}{h'(q)} = h'_1(p)^2 + h_1(p) h''_1(p). \quad (5.103)$$

(5.103) und (5.98) ergeben eine nichtlineare, gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung für die neue Funktion $h_1 = h_1(p)$:

$$\frac{\hbar^2}{8m} \cdot \frac{h'_1(p)^2}{h_1(p)^2} - \frac{\hbar^2}{4m} \cdot \frac{h''_1(p)}{h_1(p)} + V(p) = E. \quad (5.104)$$

Die weitere Transformation

$$h_1(p) = h_2(p)^2 \quad (5.105)$$

führt dann (5.104) in die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung bezüglich des ursprünglichen Potentials V über:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot h_2''(p) + V(p)h_2(p) = E \cdot h_2(p). \quad (5.106)$$

Damit wurde folgendes Resultat gewonnen. Versucht man eine Schrödinger-Gleichung dadurch zu lösen, daß man das quantenmechanische System mittels einer Duru-Kleinert-Transformation auf das freie Teilchen abbildet, so muß man die Lösung eben dieser Schrödinger-Gleichung kennen. Die Auflösung dieses Circulus vitiosus besteht darin, daß es letztendlich keinen Sinn macht, nach einer solchen Duru-Kleinert-Transformation auf das freie Teilchen zu fragen.

Im nächsten Abschnitt soll nun gezeigt werden, daß es im Spezialfalle des harmonischen Oszillators eine verallgemeinerte Duru-Kleinert-Transformation gibt, die eine Abbildung auf das freie Teilchen erlaubt.

5.6.3 Der harmonische Oszillator

Als zweiter Spezialfall wird das bekannte quantenmechanische System des harmonischen Oszillators betrachtet, das durch das Potential

$$V(x) = \frac{m}{2}\omega^2 x^2 \quad (5.107)$$

definiert ist. Hierzu wird (5.107) in den Ausdruck (5.80) für das transformierte Potential $V_E^{(4)}$ eingesetzt. Es bietet sich an, die dabei noch frei wählbare Funktion $h = h(q, t)$ dadurch festzulegen, daß man die Gültigkeit der klassischen Newton - Gleichung für den harmonischen Oszillator verlangt:

$$m \frac{\partial^2}{\partial t^2} h(q, t) = -\frac{\partial}{\partial h(q, t)} V(h(q, t)). \quad (5.108)$$

Dessen allgemeine Lösung ist durch (5.92) gegeben, wobei die Funktion $c = c(t)$ durch

$$c(t) = c_1 \cdot \cos(\omega t) + c_2 \cdot \sin(\omega t) \quad (5.109)$$

mit den Konstanten c_1, c_2 bestimmt ist.

Diese konkrete Festlegung der Funktion $h = h(q, t)$ entsprechend (5.92) und (5.109) hat den rechentechnischen Vorteil, daß man einen sehr einfachen Ausdruck für das transformierte Potential $V_E^{(4)}$ erhält:

$$V_E^{(4)}(q_{n+1}, t_{n+1}) = -i\hbar c(t_{n+1})\dot{c}(t_{n+1}) - Ec(t_{n+1})^2. \quad (5.110)$$

Verwendet man noch (5.93), so hat dies die folgenden Konsequenzen für das diskrete Pfadintegral (5.79) des neuen kausalen Propagators $G_{c,E}^{(4)}$:

$$G_{c,E}^{(4)}(q, s; q_0, 0) = \Theta(s) \cdot \lim_{\epsilon_s} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_n \right\} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon_s} \right)^{\frac{N}{2}} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon_s \sum_{n=0}^{N-1} \frac{m}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon_s} \right)^2 \right\} \\ \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left[\left(i \hbar \frac{\dot{c}(t_{n+1})}{c(t_{n+1})} - E \right) \cdot (t_{n+1} - t_n) \right] \right\}. \quad (5.111)$$

Hierbei hat man jedoch noch zu bedenken, daß die Größen t_n entsprechend (5.74) von ϵ_s und t abhängen und durch die Differenzgleichungen (5.93) definiert sind. In dem Limes $\epsilon_s \rightarrow 0, N \rightarrow \infty, \epsilon_s N = s$ gehen die diskreten Werte t_n in eine Funktion $t(\sigma)$ über, die von s und t abhängt:

$$t(\sigma) = t(\sigma, s, t) \quad \text{für } \sigma \in [0, s]. \quad (5.112)$$

Die Ausführung dieses Grenzüberganges in (5.93) liefert ein Anfangswertproblem für die Funktion $t(\sigma)$:

$$\frac{d}{d\sigma} t(\sigma) = c(t(\sigma))^2 \quad \text{für } \sigma \in [0, s] \quad \text{und} \quad t(s) = t. \quad (5.113)$$

Die Methode der Separation der Variablen ergibt

$$\int_{t(\sigma)}^t \frac{dt(\sigma)}{c(t(\sigma))^2} = \int_{\sigma}^s d\sigma \quad \text{für } \sigma \in [0, s]. \quad (5.114)$$

Verwendet man den konkreten Ausdruck (5.109) für die Funktion $c = c(t)$, so erhält man nach einer Integration eine implizite Bestimmungsgleichung für die Funktion $t(\sigma)$:

$$s - \sigma = \frac{\sin[\omega(t - t(\sigma))]}{\omega} \cdot \frac{1}{c(t)c(t(\sigma))} \quad \text{für } \sigma \in [0, s]. \quad (5.115)$$

Führt man den Grenzübergang $\epsilon_s \rightarrow 0, N \rightarrow \infty, \epsilon_s N = s$ im diskreten Pfadintegral (5.111) durch, dann lautet die kontinuierliche Form dieses Pfadintegrals für den kausalen Propagator $G_{c,E}^{(4)}$

$$G_{c,E}^{(4)}(q, s; q_0, 0) = \Theta(s) \cdot \int_{q(0)=q_0}^{q(s)=q} \mathcal{D}q(\sigma) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^s \frac{m}{2} \dot{q}(\sigma)^2 d\sigma \right\} \\ \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0(s)}^t \left[i \hbar \frac{\dot{c}(t(\sigma))}{c(t(\sigma))} - E \right] dt(\sigma) \right\}, \quad (5.116)$$

wobei $t_0(s)$ eine Abkürzung für $t(0, s, t)$ in (5.112) ist. Diese Größe ist in (5.115) für $\sigma = 0$ definiert:

$$s = \frac{\sin[\omega(t - t_0)]}{\omega} \cdot \frac{1}{c(t)c(t_0(s))}. \quad (5.117)$$

Die explizite Berechnung des Integrales über $t(\sigma)$ in (5.116) bewirkt, daß der kausale Propagator $G_{c,E}^{(4)}$ proportional zum Propagator G_{FP} des freien Teilchens wird:

$$G_{c,E}^{(4)}(q, s; q_0, 0) = \Theta(s) \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar}E(t - t_0(s))\right\} \cdot \frac{c(t_0(s))}{c(t)} \cdot G_{FP}(q, s; q_0, 0). \quad (5.118)$$

An dieser Stelle wird angenommen, daß der Propagator G_{FP} des freien Teilchens beispielsweise durch die Auswertung der diskreten Form des entsprechenden Pfadintegrales bekannt ist [25, (6.5)]:

$$G_{FP}(q, s; q_0, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar s}} \cdot \exp\left\{\frac{im}{2\hbar} \cdot \frac{(q - q_0)^2}{s}\right\}. \quad (5.119)$$

(5.118) wird dann in die Transformationsformel für Propagatoren (5.77) eingesetzt. Dadurch erhält man eine Abbildungsvorschrift, die den Propagator des freien Teilchens in den Propagator des harmonischen Oszillators überführt

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = F(x, t; x_0, t_0) \int_0^{+\infty} ds \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}E(t_0 - t_0(s))\right\} \cdot \Theta(s) \cdot \frac{c(t_0(s))}{c(t)} \cdot G_{FP}\left(\frac{x}{c(t)}, s; \frac{x_0}{c(t_0)}, 0\right), \quad (5.120)$$

wobei der Vorfaktor F durch (5.78) und durch die spezielle Wahl der Funktion $h = h(q, t)$ in (5.92) gegeben ist:

$$F(x, t; x_0, t_0) = \sqrt{c(t)c(t_0)} \cdot \exp\left\{\frac{im}{2\hbar} \left[\frac{\dot{c}(t)}{c(t)}x^2 - \frac{\dot{c}(t_0)}{c(t_0)}x_0^2\right]\right\}. \quad (5.121)$$

Die Ausführung der Integration über E in (5.120) ergibt eine Delta-Funktion:

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = F(x, t; x_0, t_0) \cdot \frac{c(t_0)}{c(t)} \int_0^{+\infty} ds \Theta(s) \cdot \delta(t_0 - t_0(s)) \cdot G_{FP}\left(\frac{x}{c(t)}, s; \frac{x_0}{c(t_0)}, 0\right). \quad (5.122)$$

Bei dem verbleibenden Integral über die Pseudozeit s wird eine Substitution der Integrationsvariablen von s nach $t_0(s)$ gemäß (5.117) vorgenommen:

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = F(x, t; x_0, t_0) \cdot \frac{c(t_0)}{c(t)} \Theta(t - t_0) \cdot \int_0^{+\infty} dt_0(s) \left(-\frac{ds}{dt_0(s)}\right) \cdot \delta(t_0 - t_0(s)) \cdot G_{FP}\left(\frac{x}{c(t)}, \frac{\sin[\omega(t - t_0(s))]}{\omega} \cdot \frac{1}{c(t)c(t_0(s))}; \frac{x_0}{c(t_0)}, 0\right). \quad (5.123)$$

Die Ableitung von $t_0(s)$ resultiert dabei unmittelbar aus (5.114) für $\sigma = 0$:

$$\frac{dt_0(s)}{ds} = -c(t_0(s))^2. \quad (5.124)$$

Mit Hilfe von (5.124) kann das verbleibende Integral über $t_0(s)$ in (5.123) berechnet werden:

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = \Theta(t - t_0) \cdot F(x, t; x_0, t_0) \cdot \frac{1}{c(t)c(t_0)} \cdot G_{FP} \left(\frac{x}{c(t)}, \frac{\sin[\omega(t - t_0)]}{\omega} \cdot \frac{1}{c(t)c(t_0)}; \frac{x_0}{c(t_0)}, 0 \right). \quad (5.125)$$

Setzt man ferner den Ausdruck (5.119) für den Propagator G_{FP} des freien Teilchens und den Vorfaktor F aus (5.121) in (5.125) ein, so folgt

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = \Theta(t - t_0) \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t - t_0)]}} \cdot \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \left[\frac{\dot{c}(t)}{c(t)} x^2 - \frac{\dot{c}(t_0)}{c(t_0)} x_0^2 + \frac{\omega}{\sin[\omega(t - t_0)]} c(t)c(t_0) \left(\frac{x}{c(t)} - \frac{x_0}{c(t_0)} \right)^2 \right] \right\}. \quad (5.126)$$

Im letzten Schritt wird nur noch die explizite Gestalt (5.109) der Funktion $c = c(t)$ in (5.126) verwendet. Dabei fallen die beliebigen Konstanten c_1, c_2 aus der Rechnung heraus. Als Endergebnis gewinnt man den bekannten Propagator des harmonischen Oszillators [26, (5.17)]:

$$G_c(x, t; x_0, t_0) = \Theta(t - t_0) \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t - t_0)]}} \cdot \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin[\omega(t - t_0)]} \cdot \left[(x_0^2 + x^2) \cos[\omega(t - t_0)] - 2x_0x \right] \right\}. \quad (5.127)$$

Kapitel 6

Der Fall des Morse–Potentials

6.1 Die Motivation

Im vorangegangenen Kapitel wurde eine ganze Klasse von Abbildungen zwischen eindimensionalen quantenmechanischen Systemen konstruiert, indem man die Zeitkoordinate, die Ortskoordinate und die Wellenfunktion jeweils separat einer einzelnen Transformation unterworfen hat. Anhand der Spektraldarstellung von Propagatoren (3.26) erkennt man dabei unmittelbar, daß die letzten beiden Transformationen das zugrundeliegende Energiespektrum invariant lassen. Im Gegensatz dazu eröffnet eine zusätzliche Transformation der Zeitkoordinate die Möglichkeit, auch quantenmechanische Systeme aufeinander abzubilden, die **topologisch verschiedene Spektren** aufweisen. Hierzu wurde bereits in Abschnitt 5.6.3 ein illustratives Beispiel vorgestellt: Das **kontinuierliche Spektrum** des freien Teilchens läßt sich mit Hilfe einer **globalen** Zeittransformation in das **diskrete Spektrum** des harmonischen Oszillators überführen.

Um die Anwendbarkeit der hier abgeleiteten Propagatortransformationen zu untersuchen, soll in diesem Kapitel als weiteres, nichttriviales Beispiel das Morse–Potential vorgestellt werden. Das Potential

$$V(x) = V_0 \cdot e^{-4\alpha x} - 2V_0 \cdot e^{-2\alpha x} \quad \text{mit} \quad \alpha, V_0 \in (0, +\infty) \quad \text{und} \quad x \in (-\infty, +\infty) \quad (6.1)$$

wurde erstmals von Philip M. Morse eingeführt, um die Schwingungen eines zweiatomigen Moleküls durch das Modell eines anharmonischen Oszillators beschreiben zu können [4]. Identifiziert man die Koordinate x mit der Differenz $r - r_0$ zwischen dem Abstand r beider Atome und dem Gleichgewichtsabstand r_0 , so besitzt das Morse–Potential (6.1) zwei realistische Eigenschaften (s. Abb. 6.1):

1. Für $x \rightarrow +\infty$ strebt es einem konstanten Wert zu, so daß dadurch die Dissoziation des Moleküls in zwei unabhängige Atome modelliert wird.
2. Für $x \rightarrow 0$ liegt ein Minimum vor, das die Stabilität des zweiatomigen Moleküls charakterisiert. Da das Minimum den Wert $V_{min} = -V_0$ annimmt, läßt sich ferner der Modellparameter V_0 als die Dissoziationsenergie des Moleküls interpretieren.

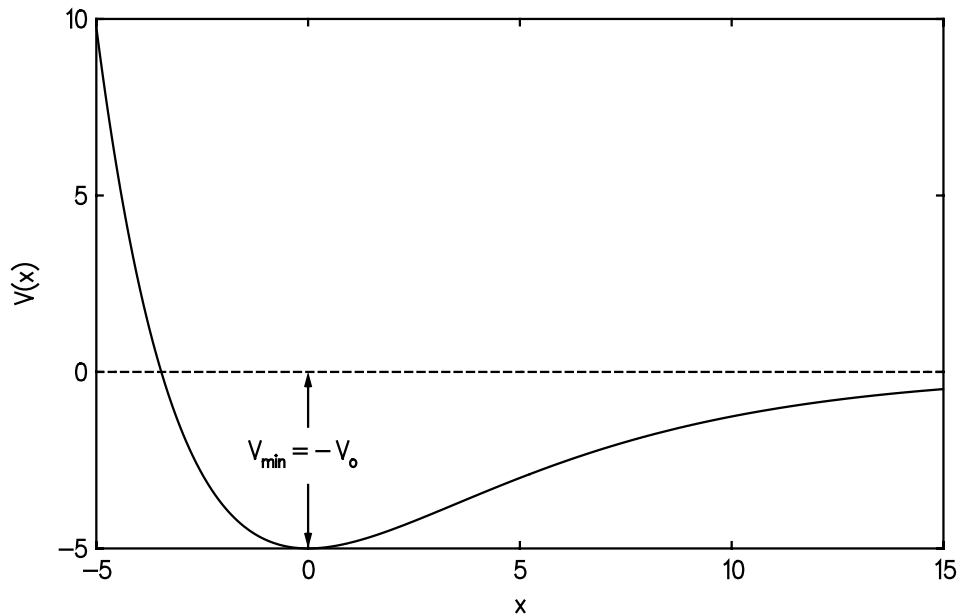


Abb. 6.1: Morsepotential (6.1) für $\alpha = 0.1$ und $V_0 = 5$

Das Modellpotential (6.1) weist aber auch eine unrealistische Eigenschaft auf. Für $x \rightarrow -r_0$ durchdringen sich beide Atome so sehr, daß wegen des von Wolfgang Pauli (1900–1958) aufgestellten **Ausschließungsprinzips** eigentlich ein unendlich hoher Potentialberg vorliegen müßte. Demgegenüber nimmt aber das Morse-Potential (6.1) für $x \rightarrow -r_0$ nur einen endlichen Wert an.

Im folgenden wird nun statt (6.1) die Verallgemeinerung

$$V_M(x) = V_0 \cdot e^{-4\alpha x} - 2\gamma V_0 \cdot e^{-2\alpha x} \quad \text{mit } \alpha, \gamma, V_0 \in (0, +\infty) \quad \text{und } x \in (-\infty, +\infty) \quad (6.2)$$

betrachtet. Sie geht im Spezialfall $\gamma = 1$ in das ursprünglich von Morse aufgestellte Potential (6.1) über. Durch die Einführung des neuen Parameters γ verschiebt sich dabei das Minimum von (6.2) gegenüber dem von (6.1) zu

$$x_{min} = -\frac{1}{2\alpha} \cdot \ln \gamma \quad \text{und} \quad V_{min} = -\gamma^2 V_0. \quad (6.3)$$

In diesem Kapitel werden zweierlei Methoden vorgestellt, die Energieeigenwerte und die Energieeigenfunktionen dieses verallgemeinerten Morse-Potentials (6.2) zu gewinnen. Dabei wird im folgenden (6.2) der Einfachheit halber kurz als Morse-Potential bezeichnet.

Zunächst erfolgt eine Beschreibung der konventionellen, auf Schrödinger zurückgehenden Methode. Sie beruht darauf, daß man in die allgemeine Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung die jeweiligen Randbedingungen für den diskreten beziehungsweise

den kontinuierlichen Teil des Spektrums einarbeitet [55, S. 131].

Anschließend wird gezeigt, daß sich die Spektraldaten des Morse-Potentials (6.2) auch durch Anwendung der von Duru und Kleinert entwickelten Methode der Propagatortransformationen ableiten lassen. Eine **lokale** Zeittransformation ermöglicht es, das schon in Abschnitt 3.4 diskutierte **diskrete Spektrum** des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere in das **gemischte Spektrum** des Morse-Potentials abzubilden [33, 34, 36, 46, 58].

6.2 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Die Energieeigenwerte E und die Energieeigenfunktionen $\psi(x)$ des Morse-Potentials (6.2) genügen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \cdot e^{-4\alpha x} - V_0 \gamma \cdot e^{-2\alpha x} \right] \psi(x) = E \cdot \psi(x). \quad (6.4)$$

Sie gilt es nun im weiteren zu lösen. Zunächst liegt es nahe, zur Vereinfachung der Notation zwei dimensionslose Größen

$$k = \sqrt{-\frac{E}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} \quad \text{und} \quad \beta = \sqrt{+\frac{\gamma^2 V_0}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} \quad (6.5)$$

einzuführen. Anschließend wird eine **Langer-Transformation** eingearbeitet, die die alte Ortskoordinate $x \in (-\infty, +\infty)$ in eine neue Ortskoordinate $y \in [0, +\infty)$ abbildet [6]:

$$y(x) = \frac{\beta}{\gamma} \cdot e^{-2\alpha x} \quad \Longleftrightarrow \quad x(y) = -\frac{1}{2\alpha} \cdot \ln \left\{ \frac{\gamma}{\beta} \cdot y \right\}. \quad (6.6)$$

Dabei bewirkt diese Langer-Transformation der Ortskoordinate eine entsprechende Transformation der Wellenfunktion:

$$\psi(x) = \phi(y(x)) \quad \Longleftrightarrow \quad \phi(y) = \psi(x(y)). \quad (6.7)$$

Eine asymptotische Diskussion der alten Wellenfunktion $\psi(x)$ für $x \rightarrow -\infty$ beziehungsweise $x \rightarrow +\infty$ führt nach (6.4) bis (6.7) zum folgenden Ansatz für die neue Wellenfunktion $\phi(y)$:

$$\phi(y) = y^{\frac{k}{2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{y}{2} \right\} \cdot f(y). \quad (6.8)$$

Hierbei beschreibt der erste Faktor das asymptotische Verhalten von $\phi(y)$ für $y \rightarrow 0$, während der zweite Faktor der Asymptotik von $\phi(y)$ für $y \rightarrow +\infty$ Rechnung trägt. Die in (6.8) neu eingeführte Funktion $f(y)$ genügt dann einer **Kummerschen Differentialgleichung**:

$$\left[y \cdot \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \left\{ (k+1) - y \right\} \cdot \frac{\partial}{\partial y} - \left\{ \frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} + \frac{k}{2} \right\} \right] f(y) = 0. \quad (6.9)$$

Nach (9.216.2) und (9.216.3) in [23] läßt sich die allgemeine Lösung dieser Kummer'schen Differentialgleichung mit Hilfe der in (9.210.1) von [23] definierten **entarteten hypergeometrischen Funktionen** ${}_1F_1$ angeben:

$$f(y) = A \cdot {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} + \frac{k}{2}; 1 + k; y\right) + B \cdot {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} - \frac{k}{2}; 1 - k; y\right) \cdot y^{-k}. \quad (6.10)$$

Durch (6.7), (6.8) und (6.10) wird dann die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung (6.4) zum Morse-Potential (6.2) festgelegt. Um aus ihr die Energieeigenwerte E und die Energieeigenfunktionen $\psi(x)$ zu gewinnen, müssen die jeweiligen Randbedingungen für den diskreten und den kontinuierlichen Teil des Spektrums eingearbeitet werden.

6.3 Die diskreten Spektraldaten

Der diskrete Teil des Spektrums besteht aus den gebundenen Zuständen mit $E < 0$, so daß der dimensionslose Parameter k nach (6.5) reell ist. Für die zugehörigen Energieeigenfunktionen $\psi(x)$ muß man verlangen, daß sie für $x \rightarrow -\infty$ beziehungsweise $x \rightarrow +\infty$ verschwinden:

$$\psi(-\infty) = 0 \quad \text{und} \quad \psi(+\infty) = 0. \quad (6.11)$$

Die Berücksichtigung dieser Randbedingungen (6.11) in die allgemeine Lösung (6.7), (6.8), (6.10) führt nach (9.210.1) in [23] und (13.1.4) in [39] zu einer Quantelung der gebundenen Zustände:

$$\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} + \frac{k_n}{2} = -n \quad \text{für} \quad n = 0, 1, 2, \dots. \quad (6.12)$$

Hieraus und aus $k_0 \geq 0$ liest man ab, daß das Morse-Potential (6.2) nur dann mindestens einen gebundenen Zustand besitzt, falls die Bedingung

$$\beta \geq 1 \quad (6.5) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \leq \gamma^2 V_0 \quad (6.13)$$

erfüllt ist. (6.13) besagt, daß der unterste Energieeigenwert eines effektiven Potentialtopfes der Länge $L = \frac{\pi}{\alpha}$ die maximal mögliche Bindungsenergie $\gamma^2 V_0$ des Morse-Potentials (6.2) nicht überschreiten darf.

Setzt man (6.5) in (6.12) ein, so ergeben sich die Energieeigenwerte der gebundenen Zustände zu:

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \cdot \left\{ \sqrt{\frac{\gamma^2 V_0}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}} - 1 - 2n} \right\}^2 \quad \text{für} \quad \sqrt{\frac{\gamma^2 V_0}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}} - 1 - 2n} \geq 0. \quad (6.14)$$

Die dazugehörigen Energieeigenfunktionen lauten nach (8.972.1) in [23] und unter Beachtung von (6.7):

$$\phi_n(y) = N_n \cdot y^{\frac{\beta}{2} - \frac{1}{2} - n} \cdot \exp\left\{-\frac{y}{2}\right\} \cdot L_n^{(\beta-1-2n)}(y), \quad (6.15)$$

wobei die $L_n^{(\nu)}$ die **verallgemeinerten Laguerre–Polynome** sind. Die Normierungskonstanten N_n werden mit (8.974.3) und (7.414.3) in [23] bestimmt zu:

$$N_n = \sqrt{2(\beta-1-2n) \cdot \frac{\Gamma(1+n)}{\Gamma(\beta-n)}}. \quad (6.16)$$

Nach (6.15), (6.16) und (9.220.2) in [23] sind die Energieeigenfunktionen der gebundenen Zustände proportional zu den **ersten Whittaker–Funktionen** $M_{\nu,\mu}$. Mit (6.7) gilt:

$$\phi_n(y) = \sqrt{2\alpha(\beta-1-2n) \cdot \frac{\Gamma(1+n)}{\Gamma(\beta-n)}} \cdot \frac{1}{\sqrt{y}} \cdot M_{\frac{\beta}{2}, \frac{\beta}{2} - \frac{1}{2} - n}(y). \quad (6.17)$$

6.4 Die kontinuierlichen Spektraldaten

Der kontinuierliche Teil des Spektrums entspricht den freien Zuständen, die durch $E \geq 0$ charakterisiert sind. Deshalb ist der dimensionslose Parameter k in (6.5) für diesen Fall imaginär:

$$k = i\kappa \quad \text{mit} \quad \kappa = \sqrt{+\frac{E}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}}. \quad (6.18)$$

Wie aus dem Verlauf des Morse–Potentials (6.2) hervorgeht, besitzen die Energieeigenfunktionen $\psi(x)$ der freien Zustände die Randbedingungen, daß sie für $x \rightarrow -\infty$ verschwinden und für $x \rightarrow +\infty$ in eine ebene Welle übergehen:

$$\psi(-\infty) = 0 \quad \text{und} \quad \psi(+\infty) = \lim_{x \rightarrow +\infty} [A \cdot e^{-i\kappa x} + B \cdot e^{+i\kappa x}]. \quad (6.19)$$

Die Einarbeitung von (6.19) in die allgemeine Lösung (6.7), (6.8), (6.10) führt dazu, daß es für den dimensionslosen Parameter κ keinerlei Einschränkungen gibt. Nach (6.18) lauten die Energieeigenwerte der freien Lösungen deshalb:

$$E_\kappa = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \quad \text{mit} \quad \kappa \in [0, +\infty). \quad (6.20)$$

Darüber hinaus ergeben sich die Koeffizienten A und B von (6.10) zu

$$A = N_\kappa \cdot \frac{\Gamma(1-i\kappa)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} - \frac{i\kappa}{2}\right)} \quad \text{und} \quad B = -N_\kappa \cdot \frac{\Gamma(1+i\kappa)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} + \frac{i\kappa}{2}\right)}. \quad (6.21)$$

Mit Hilfe von (6.19) und (6.1.23) in [39] läßt sich (6.21) dahingehend interpretieren, daß der **Reflexionskoeffizient** R für das Morse–Potential (6.2) gleich eins ist:

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = 1. \quad (6.22)$$

Aus (8.331), (9.220.2) und (9.220.4) in [23] folgt, daß die Energieeigenfunktionen der freien Zustände proportional zu den **zweiten Whittaker-Funktionen** $W_{\nu,\mu}$ sind:

$$\phi_\kappa(y) = N_\kappa \cdot \frac{1}{\sqrt{y}} \cdot W_{\frac{\beta}{2}, \frac{i\kappa}{2}}(y). \quad (6.23)$$

Die Orthonormalitätsbedingung dieser Energieeigenfunktionen lautet:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\kappa^*(x) \psi_{\kappa'}(x) dx = \delta(\kappa - \kappa'). \quad (6.24)$$

Die Langer-Transformation (6.6), sowie (6.7) und (6.23) führen dann (6.24) über in

$$\frac{N_\kappa^* N_{\kappa'}}{2\alpha} \cdot \int_0^{+\infty} \frac{1}{y^2} \cdot W_{\frac{\beta}{2}, -\frac{i\kappa}{2}}(y) W_{\frac{\beta}{2}, +\frac{i\kappa}{2}}(y) dy = \delta(\kappa - \kappa'). \quad (6.25)$$

Beachtet man, daß die zweiten Whittaker-Funktionen $W_{\nu,\mu}$ nach ihrer Definition (9.220.4) in [23] bezüglich des zweiten Index μ gerade sind und verwendet man die Integraldarstellung der Delta-Funktion in (A.5), so ergeben sich die Normierungskonstanten N_κ von (6.23) zu

$$N_\kappa = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} + \frac{i\kappa}{2}\right)}{\Gamma(i\kappa)}. \quad (6.26)$$

6.5 Die Resolvente

Die Spektraldaten eines quantenmechanischen Systems lassen sich nicht nur dadurch gewinnen, daß man die jeweiligen Randbedingungen in der allgemeinen Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung berücksichtigt. Eine weitere Methode, die Energieeigenwerte E und die Energieeigenfunktionen $\psi(x)$ eines vorgegebenen Potentials zu berechnen, bedient sich der in Kapitel 5 abgeleiteten Propagatortransformationen. Dabei versucht man durch die Wahl einer geeigneten Ortstransformation $x = h(q, t)$, das gegebene quantenmechanische System auf ein einfacheres abzubilden.

Im Falle des hier betrachteten Morse-Potentials (6.2) reicht es aus, sich der speziellen Propagatortransformationen von Duru und Kleinert von Abschnitt 5.6.1 zu bedienen, bei denen nicht explizit von der Zeit t abhängige Ortstransformationen $x = h(q)$ verwendet werden. Durch eine Langer-Transformation [6]

$$x = h(q) = -\frac{1}{\alpha} \cdot \ln q \quad \iff \quad q = h^{-1}(x) = e^{-\alpha x} \quad (6.27)$$

gelingt es nämlich gemäß (5.96), das Morse-Potential (6.2) in das Potential des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere

$$V_E^{(4)}(q) = \frac{m}{2} \omega^2 q^2 + \frac{g}{q^2} + C \quad (6.28)$$

abzubilden. Die in (6.28) auftretenden Parameter ω , g und C ergeben sich zu

$$\omega = \sqrt{\frac{2V_0}{m\alpha^2}}, \quad g = -\frac{E}{\alpha^2} - \frac{\hbar^2}{8m}, \quad C = -\frac{2\gamma V_0}{\alpha^2}. \quad (6.29)$$

Damit ermöglicht es die Wahl der Langer-Transformation, die in Abschnitt 3.4 erzielten Ergebnisse für den harmonischen Oszillator mit Zentrifugalbarriere zur Untersuchung des Morse-Potentials anzuwenden. Nach (3.107) läßt sich der zu (6.28) und (6.29) gehörige kausale Propagator $G_{c,E}^{(4)}(q, s; q_0, 0)$ sofort angeben:

$$\begin{aligned} G_{c,E}^{(4)}(q, s; q_0, 0) &= \Theta(s) \cdot \frac{m\omega}{i\hbar \sin[\omega s]} \cdot \sqrt{q_0 q} \cdot I_k \left(\frac{m\omega}{i\hbar \sin[\omega s]} q_0 q \right) \\ &\cdot \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2\hbar} \cot[\omega s] (q_0^2 + q^2) \right\} \cdot \exp \left\{ i \frac{2\gamma V_0}{\hbar \alpha^2} s \right\} \quad \text{mit} \quad k = \sqrt{-\frac{E}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}}. \end{aligned} \quad (6.30)$$

Setzt man (6.30) in die Transformationsformel für Propagatoren (5.94) ein, so gewinnt man einen Ausdruck für den gesuchten kausalen Propagator $G_M(x, t; x_0, t_0)$ des Morse-Potentials (6.2). Es stellt sich heraus, daß dieser kausale Propagator $G_M(x, t; x_0, t_0)$ nicht explizit analytisch angebar ist, da die Integration über den Parameter E mit den zur Verfügung stehenden Integrationstafeln nicht ausführbar ist. Dieser Umstand legt es nahe, statt des kausalen Propagators $G_M(x, t; x_0, t_0)$ dessen Fouriertransformierte bezüglich der Zeit, die sogenannte **Resolvente** $G_M(x, x_0|E)$, zu betrachten:

$$\begin{aligned} G_M(x, t; x_0, t_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E(t - t_0) \right\} \cdot G_M(x, x_0|E) \\ \iff G_M(x, x_0|E) &= \int_{t_0}^{+\infty} dt \exp \left\{ +\frac{i}{\hbar} E(t - t_0) \right\} \cdot G_M(x, t; x_0, t_0). \end{aligned} \quad (6.31)$$

Hierbei ist zu beachten, daß die Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ wegen der kausalen Eigenschaft des Propagators $G_M(x, t; x_0, t_0)$ nur in der oberen komplexen Halbebene mit $Im E > 0$ definiert sein kann.

Die Transformationsformel für Propagatoren (5.94) und die Definition der Resolvente in (6.31) geben nun gemeinsam an, wie sich die Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ des Morse-Potentials aus dem Propagator $G_{c,E}^{(4)}$ des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere berechnen läßt:

$$G_M(x, x_0|E) = \sqrt{h'(h^{-1}(x_0))h'(h^{-1}(x))} \cdot \int_0^{+\infty} ds G_{c,E}^{(4)}(h^{-1}(x), s; h^{-1}(x_0), 0). \quad (6.32)$$

Setzt man (6.30) in (6.32) ein und beachtet man die Langer-Transformation (6.6), so erhält man die Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ des Morse-Potentials (6.2) zu

$$\begin{aligned}
 G_M(x, x_0|E) = & \int_0^{+\infty} ds \exp \left\{ \frac{2i\gamma V_0}{\hbar\alpha^2} s \right\} \cdot \frac{m\omega}{i\hbar\alpha \sin[\omega s]} \cdot I_k \left(\frac{m\omega}{i\hbar \sin[\omega s]} \cdot e^{-\alpha(x_0+x)} \right) \\
 & \cdot \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2\hbar} \cot[\omega s] \left(e^{-2\alpha x_0} + e^{-2\alpha x} \right) \right\}. \quad (6.33)
 \end{aligned}$$

Um die noch verbleibende Integration über die Pseudozeit s ausführen zu können, müssen zunächst vorbereitende Nebenrechnungen vorgenommen werden.

1. **Wick–Rotation:** Verwendet man den in (1.30) von [23] gegebenen Zusammenhang zwischen den trigonometrischen und den hyperbolischen Funktionen in (6.33), so bietet es sich an, eine Wick–Rotation durchzuführen [26, S. 212]. Dabei geht man von der reellen Pseudozeit s zu einer skalierten imaginären Pseudozeit u über:

$$u(s) = i\omega s. \quad (6.34)$$

Aus (6.33) erhält man dann

$$\begin{aligned}
 G_M(x, x_0|E) = & \frac{m}{i\hbar\alpha} \cdot \int_0^{+\infty} du e^{\beta u} \cdot \frac{1}{\sinh u} \cdot I_k \left(\frac{\beta}{\gamma \sinh u} \cdot e^{-\alpha(x_0+x)} \right) \\
 & \cdot \exp \left\{ -\frac{\beta}{2\gamma} \coth u \left(e^{-2\alpha x_0} + e^{-2\alpha x} \right) \right\}, \quad (6.35)
 \end{aligned}$$

wobei analog zu (6.5) die dimensionslose Abkürzung β eingeführt wird:

$$\frac{2\gamma V_0}{\omega\hbar\alpha^2} \quad (6.29) \quad = \quad \sqrt{+\frac{\gamma^2 V_0}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} = \beta. \quad (6.36)$$

2. **Substitution:** Substituiert man die Integrationsvariable u durch v gemäß

$$\sinh u(v) = \frac{1}{\sinh v}, \quad (6.37)$$

so nimmt (6.35) die folgende Form an:

$$\begin{aligned}
 G_M(x, x_0|E) = & \frac{m}{i\hbar\alpha} \cdot \int_0^{+\infty} dv \left(\cosh \frac{v}{2} \right)^\beta \cdot I_k \left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-\alpha(x_0+x)} \sinh v \right) \\
 & \cdot \exp \left\{ -\frac{\beta}{2\gamma} \left(e^{-2\alpha x_0} + e^{-2\alpha x} \right) \cosh v \right\}. \quad (6.38)
 \end{aligned}$$

Nach diesen Vorbereitungen soll nun in (6.38) die Integration über v explizit durchgeführt werden. Hierzu benötigt man die Integrationsformel (6.669.4) in [23]:

$$\begin{aligned} & \int_0^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2}(a_1 + a_2)t \cosh x \right\} \cdot \left(\cosh \frac{x}{2} \right)^{2\lambda} \cdot I_{2\mu} (t\sqrt{a_1 a_2} \cdot \sinh x) \, dx = \\ & = \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + \mu - \lambda)}{t\sqrt{a_1 a_2} \Gamma(1 + 2\mu)} \cdot W_{\lambda, \mu}(a_1 t) \cdot M_{\lambda, \mu}(a_2 t) \quad \text{für } a_1 > a_2. \end{aligned} \quad (6.39)$$

Mit Hilfe von (6.39) läßt sich aus (6.38) ein vollständiger analytischer Ausdruck für die Resolvente $G_c(x, x_0|E)$ des Morse-Potentials (6.2) gewinnen:

$$\begin{aligned} G_M(x, x_0|E) &= \frac{m\gamma}{i\hbar\alpha\beta} \cdot e^{+\alpha(x_0+x)} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{k}{2} - \frac{\beta}{2}\right)}{\Gamma(1+k)} \left[\Theta(x-x_0) \cdot M_{\frac{\beta}{2}, \frac{k}{2}} \left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha x} \right) \right. \\ & \cdot W_{\frac{\beta}{2}, \frac{k}{2}} \left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha x_0} \right) + \Theta(x_0-x) \cdot M_{\frac{\beta}{2}, \frac{k}{2}} \left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha x_0} \right) \cdot W_{\frac{\beta}{2}, \frac{k}{2}} \left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha x} \right) \left. \right]. \end{aligned} \quad (6.40)$$

Damit erfüllt $G_M(x, x_0|E)$ die aus (4.22) und (6.31) folgende Symmetrierelation:

$$G_M(x, x_0|E) = G_M(x_0, x|E)^* . \quad (6.41)$$

6.6 Die Energieeigenwerte

Berechnet man die Energieeigenwerte mit der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung, so muß man nach den Abschnitten 6.2 bis 6.4 getrennte Betrachtungen für die gebundenen und für die freien Zustände vornehmen. Es ist notwendig, die jeweiligen Randbedingungen für den diskreten beziehungsweise für den kontinuierlichen Teil des Spektrums separat in die allgemeine Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung einzuarbeiten.

Im Unterschied dazu erlaubt es die Methode der Propagatortransformationen, sowohl die Energieeigenwerte der gebundenen als auch die der freien Zustände direkt aus der Darstellung der Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ in (6.40) abzulesen. Hierbei ist zu beachten, daß der Parameter E in (6.40) nur in Form der dimensionslosen Abkürzung k gemäß (6.30) in Erscheinung tritt:

1. **Diskrete Energieeigenwerte:** Nach [25, Kapitel 7] liegen die diskreten Energieeigenwerte dort, wo die Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ als Funktion des Parameters E **einfache Pole** besitzt. Dies ist in der Darstellung (6.40) der Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ des Morse-Potentials (6.2) dann gegeben, wenn die Gamma-Funktion im Zähler gemäß (8.310.2) in [23] singularär wird. Damit führt die Bedingung, daß das Argument der Gamma-Funktion eine negative Zahl sein soll, zur Quantisierung der gebundenen Zustände. Man erhält dieselben Resultate wie in (6.12) bis (6.14).

2. **Kontinuierliche Energieeigenwerte:** Nach [25, Kapitel 7] liegen die kontinuierlichen Energieeigenwerte dort, wo die Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ als Funktion des Parameters E eine **Definitionslücke** in einem Intervall auf der reellen Achse aufweist. Nach (6.669.4) in [23] ist die Integrationsformel (6.39) nur im Falle $Re \mu > 0$ anwendbar. Dies bedeutet, daß die Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ des Morse-Potentials (6.2) in der Darstellung (6.40) insbesondere nicht für $Re k = 0$ definiert ist. Nach (6.30) sind die kontinuierlichen Energieeigenwerte deshalb durch (6.20) gegeben.

6.7 Die diskreten Energieeigenfunktionen

Es stellt sich die Frage, wie man aus einer gegebenen Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ die diskreten Energieeigenfunktionen ableiten kann. Geht man von der ursprünglichen Definition der Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ in (6.31) aus, so führt die Spektraldarstellung des Propagators $G_M(x, t; x_0, t_0)$ in (3.26) unmittelbar zu einer entsprechenden Spektraldarstellung der Resolvente $G_M(x, x_0|E)$. Beschränkt man sich der Einfachheit halber nur auf den diskreten Teil des Spektrums, so gilt:

$$G_M(x, x_0|E) = \sum_n \psi_n(x) \cdot \frac{i\hbar}{E - E_n} \cdot \psi_n^*(x_0). \quad (6.42)$$

Hieraus liest man zunächst die schon im vorangegangenen Abschnitt verwendete Tatsache ab, daß die einfachen Pole der Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ mit den diskreten Energieeigenwerten übereinstimmen. Bildet man auf beiden Seiten von (6.42) das Residuum, so folgt:

$$\psi_n(x)\psi_n^*(x_0) = \frac{1}{i\hbar} \operatorname{Res}_{E=E_n} G_M(x, x_0|E) \quad \text{mit} \quad \operatorname{Res}_{z=z_0} f(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) dz. \quad (6.43)$$

Damit eröffnet (6.43) einen direkten Zugang, wie sich die Energieeigenfunktionen des diskreten Spektrums ganz allgemein aus einer gegebenen Resolvente berechnen lassen.

Für den hier zu untersuchenden Fall des Morse-Potentials (6.2) wird nun nicht der naheliegende Weg beschritten, die Darstellung (6.40) der Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ in (6.43) einzusetzen. Statt dessen soll eine andere Darstellung der Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ betrachtet werden, bei der die Verbindung zwischen dem harmonischen Oszillator mit Zentrifugalbarriere (6.28) und dem Morse-Potential (6.2) näher studiert werden kann.

Aus den Überlegungen in Abschnitt 3.4 gewinnt man sofort die Energieeigenwerte ϵ_n und die Energieeigenfunktionen χ_n des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere (6.28):

$$\epsilon_n = \hbar\omega \cdot (2n + 1 + k), \quad (6.44)$$

$$\chi_n(q) = \sqrt{\frac{2 \cdot \Gamma(1+n)}{\Gamma(1+n+k)}} \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1+k} \cdot q^{k+\frac{1}{2}} L_n^{(k)}\left(\frac{m\omega}{\hbar} q^2\right) \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2\right\}. \quad (6.45)$$

Demnach lautet dann die Spektraldarstellung des Propagators für den harmonischen Oszillator mit Zentrifugalbarriere

$$G_{c,E}^{(4)}(q, s; q_0, 0) = \sum_{n=0}^{+\infty} \chi_n(q) \cdot \exp \left\{ i\omega [\beta - (2n + 1 + k)] s \right\} \cdot \chi_n^*(q_0). \quad (6.46)$$

Setzt man (6.46) in (6.32) ein und beachtet man die Langer-Transformation (6.6) sowie die Definitionen der dimensionslosen Abkürzungen k , β in (6.30), (6.36), so gewinnt man eine andere Darstellung für die Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ des Morse-Potentials (6.2):

$$G_M(x, x_0|E) = \frac{1}{\alpha} \cdot e^{\frac{\alpha}{2}(x_0+x)} \cdot \sum_{n=0}^{+\infty} \chi_n(e^{-\alpha x}) \cdot \chi_n^*(e^{-\alpha x_0}) \cdot \int_0^{+\infty} ds \exp \left\{ i\omega \left[\sqrt{\frac{\gamma^2 V_0}{\hbar^2 \alpha^2}} - 2n - 1 - \sqrt{\frac{-E}{\hbar^2 \alpha^2}} \right] \cdot s \right\}. \quad (6.47)$$

Führt man die verbleibende Integration über die Pseudozeit s aus, so erhält man mit den diskreten Energieeigenwerten (6.14) des Morse-Potentials (6.2):

$$G_M(x, x_0|E) = \frac{1}{i\alpha\omega} \cdot \sqrt{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}} \cdot e^{\frac{\alpha}{2}(x_0+x)} \cdot \sum_{n=0}^{+\infty} \chi_n(e^{-\alpha x}) \chi_n^*(e^{-\alpha x_0}) \cdot \frac{1}{\sqrt{-E} - \sqrt{-E_n}}. \quad (6.48)$$

Auch in dieser Darstellung der Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ des Morse-Potentials (6.2) sieht man, daß deren einfache Pole gerade bei den diskreten Energieeigenwerten (6.14) liegen. (6.48) besitzt aber gegenüber (6.40) den Vorteil, daß sich die Residuen der Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ einfacher berechnen lassen. Mit der Nebenrechnung

$$\operatorname{Res}_{E=E_n} \frac{1}{\sqrt{-E} - \sqrt{-E_n}} = (-1) \cdot \operatorname{Res}_{E=E_n} \frac{\sqrt{-E} + \sqrt{-E_n}}{E - E_n} = (-2) \cdot \sqrt{-E_n} \quad (6.49)$$

ergibt die Anwendung von (6.43) auf (6.48):

$$\psi_n(x)\psi_n^*(x_0) = \frac{2}{\alpha\hbar\omega} \cdot \sqrt{-\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \cdot E_n} \cdot e^{\frac{\alpha}{2}(x_0+x)} \cdot \chi_n(e^{-\alpha x}) \chi_n^*(e^{-\alpha x_0}). \quad (6.50)$$

Hieraus läßt sich eine einfache algebraische Beziehung zwischen den endlich vielen diskreten Energieeigenfunktionen ψ_n des Morse-Potentials (6.2) und den entsprechenden diskreten Energieeigenfunktionen χ_n des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere (6.28) ablesen (s. Abb. 6.2):

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\alpha\hbar\omega} \cdot \sqrt{-\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \cdot E_n}} \cdot e^{\frac{\alpha}{2}x} \cdot \chi_n(e^{-\alpha x}). \quad (6.51)$$

Setzt man den Ausdruck (6.45) für die Energieeigenfunktionen χ_n des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere in (6.51) ein, so erhält man unter Beachtung von (6.14), (6.29), (6.30), (6.36) das schon in (6.7), (6.15), (6.16) abgeleitete Ergebnis für die diskreten Energieeigenfunktionen ψ_n des Morse-Potentials.

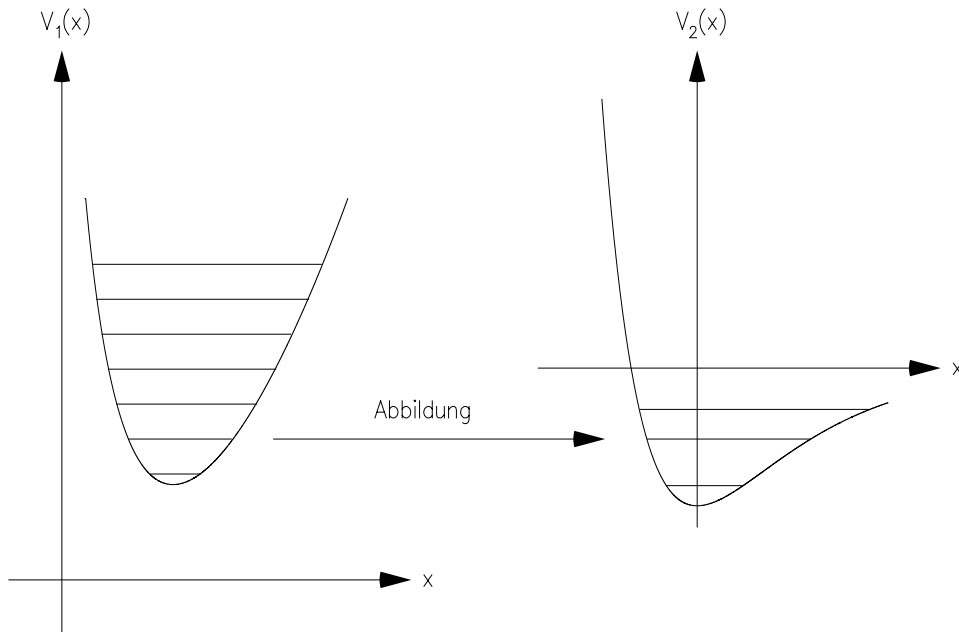


Abb. 6.2: Nach Gleichung (6.51) gibt es eine Abbildung zwischen den endlich vielen diskreten Energieeigenfunktionen des Morse-Potentials $V_2(x) = V_0 e^{-4\alpha x} - 2\gamma V_0 e^{-2\alpha x}$ und den dazu entsprechenden diskreten Energieeigenfunktionen des verschobenen harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere $V_1(x) = \frac{m}{2}\omega^2 x^2 + \frac{g}{x^2} + C$

6.8 Die kontinuierlichen Energieeigenfunktionen

Nach (6.669.4) in [23] ist die Integrationsformel (6.39) im Falle der kontinuierlichen Energieeigenwerte (6.20) nicht auf (6.38) anwendbar. Deshalb muß man für die Ableitung der kontinuierlichen Energieeigenfunktionen des Morse-Potentials (6.2) aus der bekannten Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ erneut auf deren Darstellung in (6.38) zurückgreifen. Da für die freien Zustände (6.20) die dimensionslose Abkürzung k aus (6.30) gemäß

$$k = -i \cdot \kappa_E \quad \text{mit} \quad \kappa_E = \sqrt{\frac{E}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} \quad (6.52)$$

rein imaginär geworden ist, geht (6.38) über in

$$G_M(x, x_0|E) = \frac{m}{i\hbar\alpha} \cdot \int_0^{+\infty} dv \left(\cosh \frac{v}{2} \right)^\beta \cdot I_{-i\cdot\kappa_E} \left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-\alpha(x_0+x)} \sinh v \right)$$

$$\cdot \exp \left\{ -\frac{\beta}{2\gamma} \left(e^{-2\alpha x_0} + e^{-2\alpha x} \right) \cosh v \right\}. \quad (6.53)$$

Wendet man die Integraldarstellung der modifizierten Bessel-Funktion erster Gattung von (B.15) an, so folgt für die Resolvente $G_M(x_0, x|E)$:

$$G_M(x, x_0|E) = \frac{2m}{i\hbar\alpha\pi^2} \cdot \int_0^{+\infty} d\kappa \frac{\kappa \sinh[\pi\kappa]}{\kappa^2 - \kappa_E^2} \cdot \int_0^{+\infty} dv \left(\cosh \frac{v}{2} \right)^\beta \cdot K_{i\kappa} \left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-\alpha(x_0+x)} \sinh v \right) \cdot \exp \left\{ -\frac{\beta}{2\gamma} \left(e^{-2\alpha x_0} + e^{-2\alpha x} \right) \cosh v \right\}. \quad (6.54)$$

Die Integrationsformel (6.669.3) in [23]

$$\int_0^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2}(a_1 + a_2)t \cosh x \right\} \left(\cosh \frac{x}{2} \right)^{2\nu} K_{2\mu}(t\sqrt{a_1 a_2} \sinh x) dx = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \mu - \nu\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - \mu - \nu\right)}{2t\sqrt{a_1 a_2}} \cdot W_{\nu, \mu}(a_1 t) W_{\nu, \mu}(a_2 t) \quad (6.55)$$

ermöglicht es dann, in (6.54) die Integration über v explizit auszuführen:

$$G_M(x, x_0|E) = \frac{m\gamma}{i\hbar\alpha\beta\pi^2} \cdot e^{+\alpha(x_0+x)} \cdot \int_0^{+\infty} d\kappa \frac{\kappa \sinh[\pi\kappa]}{\kappa^2 - \kappa_E^2} \cdot \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} + \frac{i\kappa}{2}\right) \cdot \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} - \frac{i\kappa}{2}\right) W_{\frac{\beta}{2}, \frac{i\kappa}{2}}\left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha x_0}\right) W_{\frac{\beta}{2}, \frac{i\kappa}{2}}\left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha x}\right). \quad (6.56)$$

Beachtet man ferner die Eigenschaften der Gamma-Funktion (6.1.23) und (6.1.29) in [39] sowie (6.52), so erhält man insgesamt eine Spektraldarstellung der Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ mit den kontinuierlichen Spektraldaten:

$$G_M(x, x_0|E) = \int_0^{+\infty} \psi_\kappa(x) \cdot \frac{i\hbar}{E - E_\kappa} \cdot \psi_\kappa^*(x_0) d\kappa. \quad (6.57)$$

Dabei ist die Dispersionsrelation E_κ durch (6.20) gegeben und die kontinuierlichen Energieeigenfunktionen ψ_κ stimmen mit denen in (6.7), (6.23) und (6.26) überein.

Kapitel 7

Das Brand–Schenzle–Modell

7.1 Die Motivation

Ein illustratives Standardmodell für einen stochastischen Prozeß mit rein multiplikativem Rauschen wurde von Helmut Brand und Axel Schenzle untersucht [20]. In so unterschiedlichen Gebieten wie der nichtlinearen Optik oder der Dynamik chemischer Reaktionen läßt sich mit Hilfe der adiabatischen Elimination von Variablen und der Vernachlässigung additiver Rauschprozesse die folgende Langevin–Gleichung mit (4.25) ableiten:

$$N(x) = a \cdot x - b \cdot x^3 \quad \text{und} \quad B(x) = x \quad \text{mit} \quad I = [0, +\infty). \quad (7.1)$$

(7.1) besitzt dieselbe nichtlineare Funktion N und damit im deterministischen Grenzfall denselben Phasenübergang zweiter Ordnung wie das in Abschnitt 4.7 vorgestellte nichttriviale Beispiel. Beide Systeme unterscheiden sich lediglich in der Rauschstärke B und damit in dem Einfluß der Zufallsvariablen x auf die fluktuierende stochastische Kraft. Zur Lösung des Brand–Schenzle–Modells (7.1) auf der Beschreibungsebene der Propagatoren wird nun die in Kapitel 4 bereitgestellte Lösungsstrategie angewendet.

7.2 Die Transformation auf das Morse–Potential

Mit der Stratonovich–Interpretation entspricht die Langevin–Gleichung (7.1) einer Fokker–Planck–Gleichung, die durch

$$K(x) = \left(\frac{Q}{2} + a\right) \cdot x - b \cdot x^3 \quad \text{und} \quad D(x) = Q \cdot x^2 \quad (7.2)$$

bestimmt wird. Führt man eine Langer–Transformation [6] der Zufallsvariablen gemäß

$$x = h(\tilde{x}) = e^{\tilde{x}} \quad \text{mit} \quad \tilde{I} = (-\infty, +\infty) \quad (7.3)$$

durch, so wird der rein multiplikative stochastische Prozeß (7.1), (7.2) in einen rein additiven abgebildet:

$$\tilde{N}(\tilde{x}) = a - b \cdot e^{2\tilde{x}} \quad \text{und} \quad \tilde{B}(\tilde{x}) = 1, \quad (7.4)$$

$$\tilde{K}(\tilde{x}) = a - b \cdot e^{2\tilde{x}} \quad \text{und} \quad \tilde{D}(\tilde{x}) = Q. \quad (7.5)$$

Dieser stochastische Prozeß (7.4), (7.5) entspricht wiederum dem quantenmechanischen Problem des Morse-Potentials V_M in (6.2), dessen Energieskala um die Konstante C verschoben ist:

$$V_S(\tilde{x}) = V_M(\tilde{x}) + C \quad \text{mit} \quad V_M(\tilde{x}) = V_0 \cdot e^{-4\alpha\tilde{x}} - 2\gamma V_0 \cdot e^{-2\alpha\tilde{x}}$$

$$\text{und} \quad V_0 = \frac{m}{2}b^2, \quad \gamma = \frac{1}{b} \cdot \left(a + \frac{\hbar}{m}\right), \quad C = \frac{m}{2}a^2, \quad \alpha = -1. \quad (7.6)$$

Die Überlegungen zum Morse-Potential mit $\alpha \in (0, +\infty)$ im vorhergehenden Kapitel lassen sich dabei auf den hier vorliegenden Fall $\alpha \in (-\infty, 0)$ ausdehnen, wenn α durch $|\alpha|$ ersetzt wird. dies liegt daran, daß die Substitution $\alpha \rightarrow -\alpha$ in (6.2) einer Koordinatentransformation $x \rightarrow -x$ entspricht. Der zu (7.6) gehörige quantenmechanische Propagator $G_S(\tilde{x}, \tilde{t}; \tilde{x}_0, \tilde{t}_0)$ ist durch

$$G_S(\tilde{x}, \tilde{t}; \tilde{x}_0, \tilde{t}_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E(\tilde{t} - \tilde{t}_0)\right\} \cdot G_S(\tilde{x}, \tilde{x}_0|E) \quad (7.7)$$

gegeben, wobei sich dessen Resolvente $G_S(\tilde{x}, \tilde{x}_0|E)$ aus der Resolvente G_M des Morse-Potentials von (6.40) ergibt:

$$G_S(\tilde{x}, \tilde{x}_0|E) = G_M(\tilde{x}, \tilde{x}_0|E - C). \quad (7.8)$$

7.3 Der stochastische Prozeß mit rein additivem Rauschen

Auf der quantenmechanischen Ebene läßt sich nicht der Propagator $G_S(\tilde{x}, \tilde{t}; \tilde{x}_0, \tilde{t}_0)$ zu (7.6) sondern nur dessen Fouriertransformierte $G_S(\tilde{x}, \tilde{x}_0|E)$ bezüglich der Zeit analytisch angeben. Deshalb ist zu erwarten, daß bei dem entsprechenden stochastischen Prozeß (7.4), (7.5) mit rein additivem Rauschen eine analoge Situation vorliegt. Auch hier ist der stochastische Propagator $\tilde{G}_F(\tilde{x}, t; \tilde{x}_0, t_0)$ nicht analytisch berechenbar. Deshalb weicht man auf dessen **Laplacetransformierte** $\tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{x}_0|\lambda)$ bezüglich der Zeit aus:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_F(\tilde{x}, t; \tilde{x}_0, t_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \exp\{i\lambda(t - t_0)\} \cdot \tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{x}_0|i\lambda) \\ \iff \tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{x}_0|\lambda) &= \int_{t_0}^{+\infty} dt \exp\{-\lambda(t - t_0)\} \cdot \tilde{G}_F(\tilde{x}, t; \tilde{x}_0, t_0). \end{aligned} \quad (7.9)$$

Aus der Spektraldarstellung (4.18) des stochastischen Propagators $\tilde{G}_F(\tilde{x}, t; \tilde{x}_0, t_0)$ und (7.9) folgt dann eine Spektraldarstellung für dessen Laplacetransformierte $\tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{x}_0|\lambda)$ bezüglich der Zeit:

$$\tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{x}_0|\lambda) = \sum_n \tilde{f}_n(\tilde{x}) \cdot \frac{1}{\lambda + \lambda_n} \cdot \tilde{f}_n^\dagger(\tilde{x}_0). \quad (7.10)$$

In (7.10) werden die Beziehungen (4.55), (4.56) zwischen den Spektraldaten der Fokker-Planck-Gleichung (7.5) und der Schrödinger-Gleichung (7.6) eingesetzt. Beachtet man

noch die Spektraldarstellung der Resolvente $G_S(\tilde{x}, \tilde{x}_0|E)$ aus (6.42), (6.57), so ergibt sich ein einfacher Zusammenhang zwischen der Fouriertransformierten $G_S(\tilde{x}, \tilde{x}_0|E)$ des quantenmechanischen Propagators $G_S(\tilde{x}, \tilde{t}; \tilde{x}_0, \tilde{t}_0)$ und der Laplacetransformierten $\tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{x}_0|\lambda)$ des stochastischen Propagators $\tilde{G}_F(\tilde{t}, t; \tilde{x}_0, t_0)$:

$$\tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{x}_0|\lambda) = i \cdot \exp \left\{ -\frac{V(\tilde{x}) - V(\tilde{x}_0)}{Q} \right\} \cdot G_S(\tilde{x}, \tilde{x}_0| -\hbar\lambda). \quad (7.11)$$

Die zu (7.11) analoge Beziehung für den Zeitbereich wurde schon in Form von Gleichung (4.54) abgeleitet.

(6.40), (7.8), (7.11) und die Übersetzungstabelle (s. Abb. 4.2, S. 50) führen dann zu einem exakten analytischen Ausdruck für die Laplacetransformierte $\tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{x}_0|\lambda)$:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{x}_0|\lambda) &= \frac{\Gamma\left(\frac{k}{2} - \frac{a}{2Q}\right)}{b\Gamma(1+k)} \cdot \exp \left\{ (a-1)\tilde{x} + (-a-1)\tilde{x}_0 - \frac{b}{2Q}e^{2\tilde{x}} + \frac{b}{2Q}e^{2\tilde{x}_0} \right\} \\ &\cdot \left[\Theta(\tilde{x} - \tilde{x}_0) \cdot W_{\frac{1}{2} + \frac{a}{2Q}, \frac{k}{2}} \left(\frac{b}{Q}e^{2\tilde{x}} \right) \cdot M_{\frac{1}{2} + \frac{a}{2Q}, \frac{k}{2}} \left(\frac{b}{Q}e^{2\tilde{x}_0} \right) + \Theta(\tilde{x}_0 - \tilde{x}) \right. \\ &\cdot \left. W_{\frac{1}{2} + \frac{a}{2Q}, \frac{k}{2}} \left(\frac{b}{Q}e^{2\tilde{x}_0} \right) \cdot M_{\frac{1}{2} + \frac{a}{2Q}, \frac{k}{2}} \left(\frac{b}{Q}e^{2\tilde{x}} \right) \right], \text{ mit } k = \sqrt{\frac{a^2}{Q^2} + \frac{2\lambda}{Q}}. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Aus der Laplacetransformierten $\tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{x}_0|\lambda)$ in (7.12) läßt sich direkt die stationäre Lösung der Fokker–Planck–Gleichung (7.5) ableiten. Nach (4.20) und einem Resultat der Laplace-theorie [14, S. 20] gilt nämlich:

$$\tilde{f}_{st}(\tilde{x}) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda \cdot \tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{x}_0|\lambda). \quad (7.13)$$

Beachtet man, daß sich die ersten und die zweiten Whittaker–Funktionen $M_{\nu, \mu}, W_{\nu, \mu}$ bei speziellen Werten der beiden Parameter ν, μ gemäß

$$M_{\frac{1+\mu}{2}, \frac{\mu}{2}}(x) = x^{\frac{1+\mu}{2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{x}{2} \right\} = W_{\frac{1+\mu}{2}, \frac{\mu}{2}}(x) \quad (7.14)$$

auf einfachere Funktionen reduzieren [9, S. 23], so folgt aus (7.12) bis (7.14) für $a > 0$:

$$\tilde{f}_{st}(\tilde{x}) = \frac{2 \cdot \left(\frac{b}{Q}\right)^{\frac{a}{Q}}}{\Gamma\left(\frac{a}{Q}\right)} \cdot \exp \left\{ \frac{2a}{Q}\tilde{x} - \frac{b}{Q}e^{2\tilde{x}} \right\}. \quad (7.15)$$

7.4 Der stochastische Prozeß mit rein multiplikativem Rauschen

Abschließend muß nur noch der stochastische Prozeß mit rein additivem Rauschen (7.4), (7.5) auf denjenigen mit rein multiplikativem Rauschen (7.1), (7.2) zurücktransformiert werden. Hierzu wird die Beziehung (4.36) zwischen den entsprechenden stochastischen Propagatoren $\tilde{G}_F(\tilde{x}, \tilde{t}; \tilde{x}_0, \tilde{t}_0)$ und $G_F(x, t; x_0, t_0)$ im Zeitbereich einer Laplacetransformation unterzogen:

$$G_F(x, x_0|\lambda) = \frac{1}{h'(h^{-1}(x))} \cdot \tilde{G}_F(h^{-1}(x), h^{-1}(x_0)|\lambda). \quad (7.16)$$

Aus (7.3), (7.12) und (7.16) folgt dann für die Laplacetransformierte $G_F(x, x_0|\lambda)$ des Brand-Schenzle-Propagators $G_F(x, t; x_0, t_0)$:

$$\begin{aligned} G_F(x, x_0|\lambda) &= \frac{\Gamma\left(\frac{k}{2} - \frac{a}{2Q}\right)}{b\Gamma(1+k)} \cdot x_0^{-a-1} \cdot x^{a-2} \cdot \exp\left\{-\frac{b}{2Q}x^2 + \frac{b}{2Q}x_0^2\right\} \\ &\cdot \left[\Theta(x - x_0) \cdot W_{\frac{1}{2} + \frac{a}{2Q}, \frac{k}{2}}\left(\frac{b}{Q}x^2\right) \cdot M_{\frac{1}{2} + \frac{a}{2Q}, \frac{k}{2}}\left(\frac{b}{Q}x_0^2\right) + \Theta(x_0 - x) \right. \\ &\cdot \left. W_{\frac{1}{2} + \frac{a}{2Q}, \frac{k}{2}}\left(\frac{b}{Q}x_0^2\right) \cdot M_{\frac{1}{2} + \frac{a}{2Q}, \frac{k}{2}}\left(\frac{b}{Q}x^2\right) \right] \text{ mit } k = \sqrt{\frac{a^2}{Q^2} + \frac{2\lambda}{Q}}. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Mit Hilfe von (7.13) und (7.14) läßt sich aus (7.17) die stationäre Lösung der Fokker-Planck-Gleichung (7.2) ableiten:

$$f_{st}(x) = \frac{2 \cdot \left(\frac{b}{Q}\right)^{\frac{a}{Q}}}{\Gamma\left(\frac{a}{Q}\right)} \cdot x^{2\frac{a}{Q}-1} \cdot \exp\left\{-\frac{b}{Q}x^2\right\}. \quad (7.18)$$

Dies stimmt wie erwartet mit dem von Brand und Schenzle gewonnenen Ergebnis überein [20, (5.2) und (5.3)].

Der Vollständigkeit halber lassen sich noch die Spektraldaten der Fokker-Planck-Gleichung (7.2) zum Brand-Schenzle-Modell (7.1) angeben. Aus den Vorarbeiten in Kapitel 4, Kapitel 6 und dem vorliegenden Kapitel folgt:

1. Diskrete Spektraldaten:

$$\lambda_n = 2nQ \left(\frac{a}{Q} - n\right) \quad \text{für} \quad \frac{a}{Q} \geq 2n, \quad (7.19)$$

$$f_n(x) = \frac{2 \left(\frac{a}{Q} - 2n\right) \left(\frac{b}{Q}\right)^{\frac{a}{Q}-n} \Gamma(1+n)}{\Gamma\left(1 + \frac{a}{Q} - n\right)} x^{-1+\frac{2a}{Q}} f_n^\dagger(x) \exp\left\{-\frac{b}{Q}x^2\right\}, \quad (7.20)$$

$$f_n^\dagger(x) = x^{-2n} L_n^{\left(\frac{a}{Q}-2n\right)} \left(\frac{b}{Q}x^2\right). \quad (7.21)$$

Dieses Ergebnis ist für $n = 0$ mit (4.16) und (7.18) konsistent.

2. Kontinuierliche Spektraldaten:

$$\lambda_\kappa = \frac{Q}{2}\kappa^2 + \frac{a^2}{2Q} \quad \text{für } \kappa \geq 0, \quad (7.22)$$

$$f_\kappa(x) = \frac{1}{2\pi\frac{b}{Q}} \left| \frac{\Gamma\left(\frac{a}{2Q} + \frac{i\kappa}{2}\right)}{\Gamma(i\kappa)} \right|^2 x^{\frac{a}{Q}-2} \exp\left\{-\frac{b}{2Q}x^2\right\} W_{\frac{1}{2}+\frac{a}{2Q}, \frac{i\kappa}{2}}\left(\frac{b}{Q}x^2\right), \quad (7.23)$$

$$f_\kappa^\dagger(x) = x^{-\frac{a}{Q}-1} \exp\left\{+\frac{b}{2Q}x^2\right\} W_{\frac{1}{2}+\frac{a}{2Q}, \frac{i\kappa}{2}}\left(\frac{b}{Q}x^2\right). \quad (7.24)$$

Beachtet man die Definitionen der auftretenden speziellen Funktionen, so sind die hier gewonnenen Spektraldaten mit den von Brand und Schenzle angegebenen identisch [20, Kapitel VI].

7.5 Der Vergleich

Abschließend werden die stochastischen Prozesse (4.64) und (7.1) miteinander verglichen. Die Gemeinsamkeit beider Systeme besteht darin, daß sie dieselbe nichtlineare Funktion $N(x) = a \cdot x - b \cdot x^3$ aufweisen. Dies führt dazu, daß beide im deterministischen Grenzfall $Q \rightarrow 0$ denselben Phasenübergang zweiter Ordnung zeigen, falls der Kontrollparameter a den kritischen Wert $a = 0$ überschreitet. Es stellt sich nun die Frage, wie sich die unterschiedlichen multiplikativen Rauschprozesse $B_1(x) = x^2$ und $B_2(x) = x$ für endliche Werte der Rauschgröße Q auf diesen Phasenübergang auswirken. Hierzu ist es notwendig, die dynamischen und die stationären Eigenschaften beider stochastischer Prozesse zu betrachten:

1. **Dynamische Eigenschaften:** Beim Rauschen $B_1(x) = x^2$ liegt für alle Werte des Kontrollparameters a ein äquidistantes diskretes Spektrum vor. Beim Rauschen $B_2(x) = x$ ändert sich dagegen die topologische Struktur des Spektrums an der Stelle $a = 0$. Während für $a < 0$ nur ein kontinuierliches Spektrum vorhanden ist, liegt für $a \geq 0$ ein gemischtes Spektrum vor.
2. **Stationäre Eigenschaften:** Die stationäre Lösung (4.77) der Fokker–Planck–Gleichung mit dem Rauschen $B_1(x) = x^2$ ist für $a < 0$ nicht normierbar und besitzt für $a \geq 0$ ein Maximum an der Stelle $x_{max} = \sqrt{a/(b+Q)}$. Demgegenüber zeigt die stationäre Lösung (7.18) der Fokker–Planck–Gleichung für das Rauschen $B_2(x) = x$ ein anderes Verhalten. Auch sie ist für $a < 0$ nicht normierbar, aber für $0 \leq a < Q/2$ wird sie normierbar mit dem Maximum bei $x_{max} = 0$ und für $a \geq Q/2$ liegt das Maximum bei $x_{max} = \sqrt{(a-Q/2)/b}$.

Um einen Nichtgleichgewichtsphasenübergang unter dem Einfluß von Fluktuationen quantitativ festzustellen, gibt es kein eindeutiges Kriterium [51, Kapitel 4]. Eine von vielen Möglichkeiten besteht darin, hierfür das Maximum der stationären Lösung der entsprechenden Fokker–Planck–Gleichung zu verwenden. Deshalb werden in Abb. 7.1 diese Maxima für das x^2 -Rauschen und das x -Rauschen mit dem asymptotisch stabilen Zustand (2.10) des

rein deterministischen Prozesses verglichen. Als Ergebnis stellt man nach diesem Kriterium fest, daß der Phasenübergang beim x^2 -Rauschen unverändert bei $a = 0$ liegt, während er beim x -Rauschen an der Stelle $a = Q/2$ auftritt. Diesen verschobenen Nichtgleichgewichtsphasenübergang, der kein deterministisches Analogon besitzt, bezeichnet man als einen **stochastisch induzierten Phasenübergang** [35].

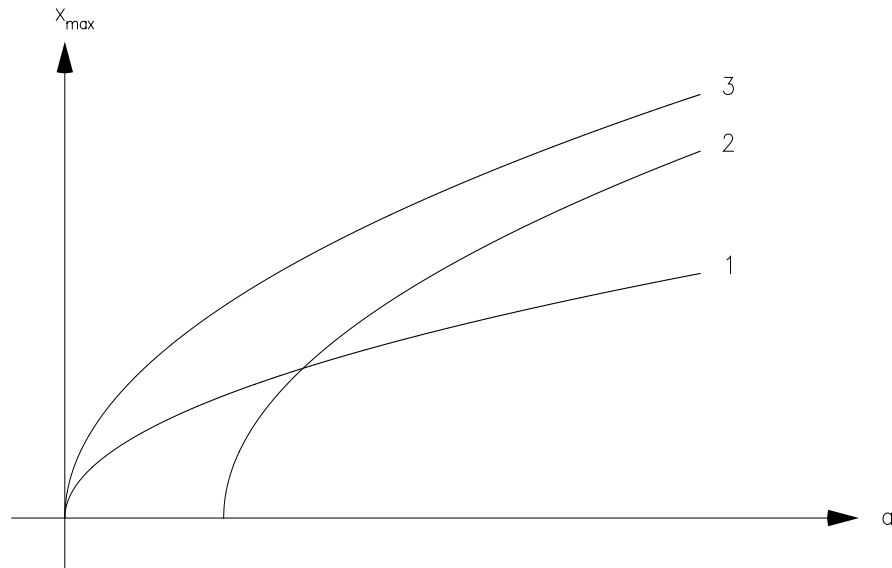


Abb. 7.1: Zur Festlegung des Nichtgleichgewichtsphasenüberganges unter dem Einfluß von Fluktuationen werden die Maxima der stationären Lösungen zum x^2 - und zum x -Rauschen in den Kurven 1 und 2 mit der Gleichgewichtslage im rein deterministischen Fall in der Kurve 3 verglichen

7.6 Die Nichtgleichgewichtspotentiale

Die Argumentationskette der vorliegenden Diplomarbeit schließt sich nun damit, daß verschiedene Ljapunov-Funktionen zu einem deterministische System bestimmt werden, das für die Synergetik von zentraler Bedeutung ist. Es handelt sich um die eindimensionale Ordnungsparametergleichung

$$\dot{x}(t) = a \cdot x(t) - b \cdot x(t)^3, \quad (7.25)$$

zu der schon in (2.9) deren Potential $V(x)$ als eine mögliche Ljapunov-Funktion angegeben wurde.

Nach Abschnitt 2.4 lassen sich zu (7.25) weitere Ljapunov-Funktionen in Form von Nichtgleichgewichtspotentialen ableiten, indem dieses rein deterministische System durch die Hinzunahme von Rauschkraften zu verschiedenen stochastischen Systemen erweitert wird. Deshalb wurden gerade die aus (7.25) hervorgehenden stochastischen Prozesse mit x^2 -Rauschen und x -Rauschen im Laufe der Diplomarbeit näher untersucht. Entsprechend dem in Abb. 1.1 gezeigten viereckigen Schema wurden hierzu die jeweiligen stochastischen Propagatoren (4.76) und (7.9), (7.17) durch Transformationen aus quantenmechanischen Propagatoren gewonnen. Der Langzeitlimes nach (4.20) gestattete es dann, die stationären Lösungen (4.77) und (7.18) der Fokker-Planck-Gleichungen zum x^2 -Rauschen und zum x -Rauschen zu berechnen. Aus diesen stationären Lösungen wiederum gewinnt man mit (2.17) zwei Nichtgleichgewichtspotentiale, wenn die Stirling-Formel für die Fakultät beziehungsweise die Gamma-Funktion beachtet wird:

$$\begin{aligned} x^2\text{-Rauschen : } \phi_1(x) &= 2b \cdot \ln x + a \cdot \frac{1}{x^2} - b \cdot \left(1 + \ln \frac{a}{b}\right), \\ x\text{-Rauschen : } \phi_2(x) &= -2a \cdot \ln x + b \cdot x^2 - a \cdot \left(1 + \ln \frac{b}{a}\right). \end{aligned} \quad (7.26)$$

Für beide Nichtgleichgewichtspotentials $\phi_1(x)$ und $\phi_2(x)$ lassen sich unmittelbar die drei Ljapunov-Eigenschaften (2.6) bis (2.8) für die Gleichgewichtslagen $x_0 = \pm\sqrt{a/b}$ im Falle $a > 0$ zeigen.

Mit den drei Ljapunov-Funktionen $V(x)$, $\phi_1(x)$ und $\phi_2(x)$ für das deterministische System (7.25) wurde so auch exemplarisch gezeigt, daß es zu einem System unterschiedliche Ljapunov-Funktionen geben kann.

Danksagung

Dem Leiter des Institutes für Theoretische Physik und Synergetik, Herrn Prof. Dr. Dr. h.c. mult. H. Haken danke ich dafür, daß er durch meine Aufnahme in sein Institut hervorragende äußere Rahmenbedingungen für die Anfertigung der vorliegenden Diplomarbeit geschaffen hat.

Prof. Dr. A. Wunderlin bin ich für die vorbildliche Betreuung der Diplomarbeit zu tiefem Dank verpflichtet. Sein stetes Interesse am aktuellen Forschungsgegenstand und seine unermüdliche Bereitschaft zum Gedankenaustausch haben mich immer wieder zu neuen Anstrengungen angespornt und einen richtungsweisenden Einfluß auf den Fortgang der Arbeit ausgeübt. Dank seiner aufmunternden Unterstützung konnte die fruchtbare Zusammenarbeit des vergangenen Jahres mit der Anfertigung einer gemeinsamen Veröffentlichung gekrönt werden [60].

Von Prof. Dr. U. Weiß habe ich immer im entscheidenden Moment die richtige Hilfestellung erfahren. Durch seine Vorlesung „Funktionalintegralmethoden und ihre Anwendung auf dissipative Quantensysteme“ im Sommersemester 1991 und vor allem durch die beiden Literaturhinweise [54, 58] bin ich auf diejenigen Problemstellungen gestoßen, die den Gegenstand der vorliegenden Diplomarbeit darstellen. Ferner hat er es mir ermöglicht, meine Forschungsergebnisse auf der „4th International Conference on Path Integrals from meV to MeV“ in Tutzing durch ein Poster vorzustellen.

Dankenswerterweise hat sich Prof. Dr. M. Wagner für die Übernahme des Mitberichtes bereiterklärt.

Allen Mitgliedern des Institutes sei an dieser Stelle für die freundliche und kollegiale Atmosphäre gedankt. Dr. Rudolf Friedrich, Wolfgang Wischert und Lisa Borland haben mir in wertvollen Diskussionen weitere Anregungen für meine Arbeit gegeben. Besonderen Dank gebührt aber Michael Schanz, Suzan Yigitbasi, Dr. Klaus Scheller und Thomas Held, da sie mich in die institutseigenen Rechner, das Textverarbeitungssystem \LaTeX und die IfTPuSUS-Graphik eingewiesen haben.

Zusammen mit meinen Kommilitonen Uwe Schellhorn und Jozsef Ludvig verbrachte ich eine interessante und ausgefüllte Studienzeit. Ich verdanke ihnen zahllose intensive Gespräche, die mir eine ständige Quelle neuer Ideen und Anregungen boten.

Meine Eltern stellten mir eine ausreichende Basis zu meinem Physik-Studium bereit, indem sie mich von den täglichen materiellen Sorgen fernhielten und mir für gute Ratschläge stets zur Verfügung standen.

Trotz meiner persönlichen Fehler und Schwächen hat mich meine Freundin Brigitte Koch in den zurückliegenden sechs Jahren treu begleitet. Nur durch ihre aufmunternde Unterstützung gelang es mir, alle Höhen und Tiefen unseres gemeinsamen Studiums zu bewältigen.

Anhang A

Integraldarstellung der Delta-Funktion

Für die Normierung der kontinuierlichen Energieeigenfunktionen des Morse-Potentials (6.2) benötigt man in (6.25) eine besondere **Integraldarstellung der Delta-Funktion** [46]. Deren Ableitung beginnt mit der Integrationsformel (7.611.7) in [23]:

$$\int_0^{+\infty} x^{\rho-1} W_{\eta,\mu}(x) W_{\lambda,\nu}(x) dx = \frac{\Gamma(1+\mu+\nu+\rho)\Gamma(1-\mu+\nu+\rho)\Gamma(-2\nu)}{\Gamma(\frac{1}{2}-\lambda-\nu)\Gamma(\frac{3}{2}-\eta+\nu+\rho)} \cdot {}_3F_2\left(1+\mu+\nu+\rho, 1-\mu+\nu+\rho, \frac{1}{2}-\lambda+\nu; 1+2\nu, \frac{3}{2}-\eta+\nu+\rho; 1\right) + (\nu \implies -\nu). \quad (\text{A.1})$$

Hierbei ist ${}_3F_2$ nach (9.14.1) in [23] eine **verallgemeinerte hypergeometrische Reihe**. In (A.1) wird nun die Spezialisierung

$$\rho = -1 + \epsilon \quad \text{mit} \quad \epsilon \ll 1, \quad \eta = \lambda = \frac{\beta}{2}, \quad \mu = \frac{i\kappa}{2}, \quad \nu = \frac{i\kappa'}{2} \quad (\text{A.2})$$

vorgenommen und der Grenzübergang $\epsilon \downarrow 0$ betrachtet:

$$\int_0^{+\infty} \frac{1}{x^2} W_{\frac{\beta}{2}, \frac{i\kappa}{2}}(x) W_{\frac{\beta}{2}, \frac{i\kappa'}{2}}(x) dx = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \left\{ \frac{\Gamma\left(\epsilon + \frac{i\kappa}{2} + \frac{i\kappa'}{2}\right) \Gamma\left(\epsilon - \frac{i\kappa}{2} + \frac{i\kappa'}{2}\right) \Gamma(-i\kappa')}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} - \frac{i\kappa'}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} + \frac{i\kappa'}{2}\right)} \cdot {}_3F_2\left(\epsilon + \frac{i\kappa}{2} + \frac{i\kappa'}{2}, \epsilon - \frac{i\kappa}{2} + \frac{i\kappa'}{2}, \frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} + \frac{i\kappa'}{2}; 1+i\kappa', \frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} + \frac{i\kappa'}{2}; 1\right) + (\kappa' \implies -\kappa') \right\}. \quad (\text{A.3})$$

Verwendet man (9.14.1) und (9.122.1) in [23], so geht (A.3) über in

$$\int_0^{+\infty} \frac{1}{x^2} W_{\frac{\beta}{2}, \frac{i\kappa}{2}}(x) W_{\frac{\beta}{2}, \frac{i\kappa'}{2}}(x) dx = \frac{\Gamma(i\kappa')\Gamma(-i\kappa')}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} - \frac{i\kappa'}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} + \frac{i\kappa'}{2}\right)}.$$

$$\frac{4\pi\kappa'}{\kappa + \kappa'} \cdot \lim_{\epsilon \downarrow 0} \left\{ \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\epsilon}{\left(\frac{\kappa - \kappa'}{2}\right)^2 + \epsilon^2} \right\}. \quad (\text{A.4})$$

Aus der üblichen Darstellung der Delta-Funktion als Grenzwert von Lorentz-Funktionen folgt damit eine Integraldarstellung der Delta-Funktion:

$$\int_0^{+\infty} \frac{1}{x^2} W_{\frac{\beta}{2}, \frac{i\kappa}{2}}(x) W_{\frac{\beta}{2}, \frac{i\kappa'}{2}}(x) dx = 4\pi \cdot \frac{\Gamma(i\kappa)\Gamma(-i\kappa)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} + \frac{i\kappa}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta}{2} - \frac{i\kappa}{2}\right)} \cdot \delta(\kappa - \kappa'). \quad (\text{A.5})$$

Anhang B

Integraldarstellung der modifizierten Besselfunktion erster Gattung

In Abschnitt 6.8 wird gezeigt, wie sich aus der bekannten Resolvente $G_M(x, x_0|E)$ des Morse-Potentials (6.2) die entsprechenden kontinuierlichen Energieeigenfunktionen ableiten lassen. Hierbei tritt in (6.53) eine **modifizierte Besselfunktion erster Gattung** $I_{-i\kappa_E}$ auf, für die nun eine **Integraldarstellung** berechnet werden soll [46]. Hierzu geht man vom komplexen Integral

$$A_E = \oint_C \frac{z}{z^2 - \frac{E}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} \cdot I_{-iz}(\lambda) dz \quad (\text{B.1})$$

aus, bei dem der Integrand zwei einfache Pole

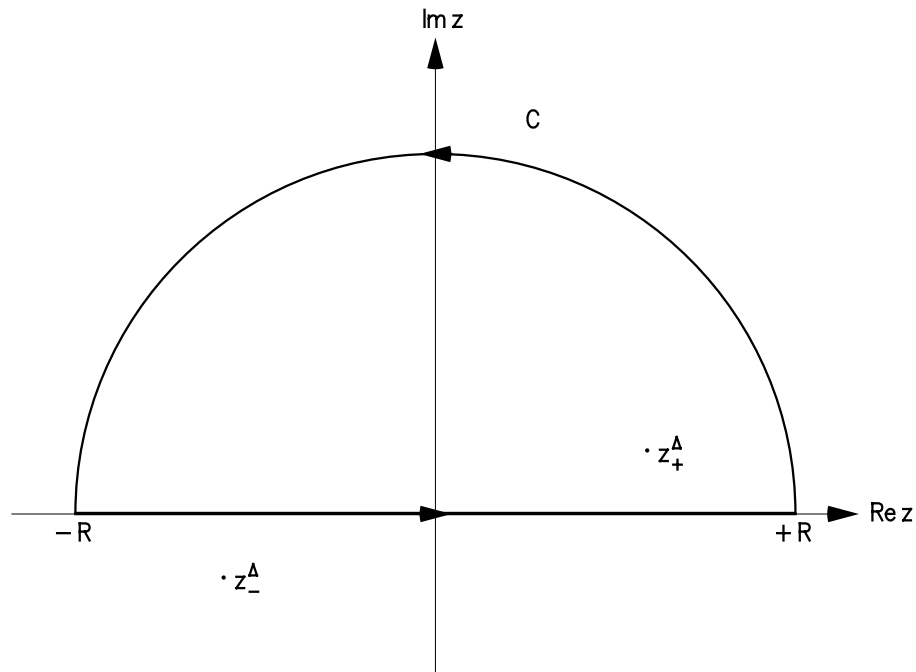
$$z_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{E}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} \quad (\text{B.2})$$

auf der reellen Achse besitzt. Beachtet man, daß wegen der kausalen Eigenschaft des Propagators $G_c(x, t; x_0, t_0)$ der Parameter E der Resolvente $G_c(x, x_0|E)$ eigentlich nur in der oberen komplexen Halbebene mit $\text{Im } E > 0$ liegen darf, so ist (B.1) durch den folgenden Grenzwertprozeß zu definieren

$$A_E = \lim_{\Delta \downarrow 0} \oint_C \frac{z}{z^2 - \frac{E+i\Delta}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} \cdot I_{-iz}(\lambda) dz. \quad (\text{B.3})$$

Durch die Einführung des Parameters $\epsilon \geq 0$ verschieben sich die einfachen Pole des Integranden von (B.3) zu

$$z_{\pm}^{\Delta} = \pm \sqrt{\frac{E+i\Delta}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} \quad \text{mit} \quad \text{Im } z_{+}^{\Delta} \geq 0 \quad \text{und} \quad \text{Im } z_{-}^{\Delta} \leq 0. \quad (\text{B.4})$$

Abb. 2.1: Integrationskurve \mathcal{C} für die komplexe Integration

Wird die geschlossene Integrationskurve \mathcal{C} von (B.3) entsprechend Abbildung B.1 gewählt, so verschwindet der Integrationsbeitrag des Halbkreises im Grenzübergang $R \rightarrow +\infty$. Mit der Abkürzung κ_E aus (6.52) geht dann (B.3) für $R \rightarrow +\infty$ über in:

$$A_E = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\kappa}{\kappa^2 - \kappa_E^2} \cdot I_{-i\kappa}(\lambda) d\kappa. \quad (\text{B.5})$$

Wendet man in (B.3) dagegen den Residuensatz an, so erhält man für genügend große R ein von R unabhängiges Resultat:

$$A_E = 2\pi i \cdot \operatorname{Res}_{z = \kappa_E} \left\{ \frac{z}{z^2 - \kappa_E^2} \cdot I_{-iz}(\lambda) \right\}. \quad (\text{B.6})$$

Das hierbei auftretende Residuum läßt sich mit Hilfe einer einfachen Partialbruchzerlegung berechnen, so daß (B.6) übergeht in

$$A_E = \pi i \cdot I_{-i\kappa_E}(\lambda). \quad (\text{B.7})$$

(B.5) und (B.7) ergeben zusammen eine Integraldarstellung der modifizierten Besselfunktion erster Ordnung, bei der die modifizierte Besselfunktion erster Gattung selber im Integranden auftritt:

$$I_{-i\kappa_E}(\lambda) = \frac{1}{\pi i} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\kappa}{\kappa^2 - \kappa_E^2} \cdot I_{-i\kappa}(\lambda) d\kappa. \quad (\text{B.8})$$

(B.8) wird nun dahingehend umgeformt, daß man für die modifizierte Besselfunktion **erster** Gattung eine Integraldarstellung ableitet, bei der im Integranden die modifizierte Besselfunktion **zweiter** Gattung auftritt.

Zunächst spaltet man in (B.8) das Integral über die gesamte reelle Achse in zwei Integrale über die beiden Intervalle $(-\infty, 0]$ und $[0, +\infty)$ auf. Im Integral über das Intervall $(-\infty, 0]$ wird dann die Substitution $\kappa'(\kappa) = -\kappa$ vorgenommen und κ' wieder durch κ ersetzt:

$$I_{-i\kappa_E}(\lambda) = \frac{1}{\pi i} \cdot \int_0^{+\infty} \frac{\kappa}{\kappa^2 - \kappa_E^2} \cdot \{I_{-i\kappa}(\lambda) + I_{+i\kappa}(\lambda)\} d\kappa. \quad (\text{B.9})$$

Beachtet man ferner die Definition der Besselfunktionen erster Gattung J_ν , zweiter Gattung N_ν und dritter Gattung $H_\nu^{(1)}$ sowie die Definitionen der modifizierten Besselfunktionen erster Gattung I_ν und zweiter Gattung K_ν entsprechend

$$(8.407.1) \text{ in [23]:} \quad K_\nu(z) = \frac{\pi i}{2} \cdot \exp\left\{\frac{\pi}{2}\nu i\right\} \cdot H_\nu^{(1)}(iz), \quad (\text{B.10})$$

$$(8.405.1) \text{ in [23]:} \quad H_\nu^{(1)}(z) = J_\nu(z) + i \cdot N_\nu(z), \quad (\text{B.11})$$

$$(8.403.1) \text{ in [23]:} \quad N_\nu(z) = \frac{1}{\sin[\nu\pi]} \cdot \{\cos[\nu\pi] \cdot J_\nu(z) - J_{-\nu}(z)\}, \quad (\text{B.12})$$

$$(8.406.1) \text{ in [23]:} \quad I_\nu(z) = \exp\left\{-\frac{\pi}{2}\nu i\right\} \cdot J_\nu(iz), \quad (\text{B.13})$$

so gewinnt man eine Beziehung zwischen den modifizierten Besselfunktionen erster und zweiter Gattung:

$$I_{-\nu}(z) - I_{+\nu}(z) = \frac{2}{\pi} \cdot \sin[\nu\pi] \cdot K_\nu(z). \quad (\text{B.14})$$

Aus (B.9) und (B.14) folgt dann die gesuchte Integraldarstellung der modifizierten Besselfunktion erster Gattung:

$$I_{-i\kappa_E}(\lambda) = \frac{2}{\pi^2} \cdot \int_0^{+\infty} \frac{\kappa \cdot \sinh[\kappa\pi]}{\kappa^2 - \kappa_E^2} \cdot K_{i\kappa}(\lambda) d\kappa. \quad (\text{B.15})$$

Abbildungsverzeichnis

1.1	Viereckiges Schema	6
3.1	Gruppeneigenschaft	19
3.2	Harmonischer Oszillator mit Zentrifugalbarriere	29
4.1	Kommutativität von Langevin- und Fokker–Planck–Gleichungen	46
4.2	Übersetzungstabelle	50
4.3	Lösungsstrategie für Fokker–Planck–Gleichungen	53
6.1	Morsepotential	84
6.2	Abbildung zwischen diskreten Energieeigenfunktionen	94
7.1	Nichtgleichgewichtsphasenübergänge	101
B.1	Komplexe Integration	108

Literaturverzeichnis

- [1] E. Schrödinger: *Quantisierung als Eigenwertproblem—Erste Mitteilung*; Ann. d. Phys. **79**, 361 (1926)
- [2] E. Schrödinger: *Quantisierung als Eigenwertproblem—Zweite Mitteilung*; Ann. d. Phys. **79**, 489 (1926)
- [3] E. Schrödinger: *Über das Verhältnis der Heisenberg–Born–Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen*; Ann. d. Phys. **79**, 734 (1926)
- [4] P. M. Morse: *Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics—II. Vibrational Levels*; Phys. Rev. **34**, 57 (1929)
- [5] P. A. M. Dirac: *The Lagrangian in Quantum Mechanics*; Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion **3**, 64 (1933)
- [6] R. E. Langer: *On the Connection Formulas and the Solutions of the Wave Equation*; Phys. Rev. **51**, 669 (1937)
- [7] P. A. M. Dirac: *On the Analogy Between Classical and Quantum Mechanics*; Rev. Mod. Phys. **17**, 195 (1945)
- [8] R. P. Feynman: *Space–Time Approach to Non–Relativistic Quantum Mechanics*; Rev. Mod. Phys. **20**, 367 (1948)
- [9] H. Buchholz: *Die Konfluente Hypergeometrische Funktion—Mit Besonderer Berücksichtigung Ihrer Anwendungen*; Springer–Verlag (1953)
- [10] J. P. LaSalle and S. Lefschetz: *Stability by Ljapunov’s Direct Method with Applications*; Academic Press (1961)
- [11] N. Minorsky: *Nonlinear Oscillations*; D. Van Nostrand Company, Inc. (1962)
- [12] W. I. Smirnow: *Lehrgang der Höheren Mathematik—Band 4, Teil III,2*; VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften (4. Auflage, 1963)
- [13] L. Hostler: *Coulomb Green’s Functions and the Furry Approximation*; J. Math. Phys. **5**, 591 (1964)
- [14] M. R. Spiegel: *Theory and Problems of Laplace Transforms*; McGraw–Hill Book Company (1965)

- [15] P. Kustaanheimo and E. Stiefel: *Perturbation Theory of Kepler Motion based on Spinor Regularization*; J. Reine Angew. Math. **218**, 204 (1965)
- [16] R. P. Feynman and A. R. Hibbs: *Quantum Mechanics and Path Integrals*; McGraw-Hill Book Company (1965)
- [17] D. Peak and A. Inomata: *Summation over Feynman Histories in Polar Coordinates*; J. Math. Phys. **10**, 1422 (1969)
- [18] N. P. Bhatia and G. P. Szegö: *Stability Theory of Dynamical Systems*; Springer-Verlag (1970)
- [19] P. Glansdorff and I. Prigogine: *Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations*; Wiley-Interscience (1971)
- [20] A. Schenzle and H. Brand: *Multiplicative Stochastic Processes in Statistical Physics*; Phys. Rev. **A 20**, 1628 (1979)
- [21] W. Janke and H. Kleinert: *Summing Paths for a Particle in a Box*; Lett. Nuovo Cimento **25**, 297 (1979)
- [22] I. H. Duru and H. Kleinert: *Solution of the Path Integral for the H-Atom*; Phys. Lett. **B 84**, 185 (1979)
- [23] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik: *Table of Integrals, Series and Products-Corrected and Enlarged Edition*; Academic Press (1980)
- [24] M. Goodman: *Path Integral Solution to the Infinite Square Well*; Am. J. Phys. **49**, 843 (1981)
- [25] L. S. Schulman: *Techniques and Applications of Path Integration*; John Wiley & Sons (1981)
- [26] Bjørn Felsager: *Geometry, Particles and Fields*; Odense University Press (1981)
- [27] I. H. Duru and H. Kleinert: *Quantum Mechanics of H-Atom from Path Integrals*; Forsch. Phys. **30**, 401 (1982)
- [28] R. Ho and A. Inomata: *Exact-Path-Integral Treatment of the Hydrogen Atom*; Phys. Rev. Lett. **48**, 231 (1982)
- [29] A. Inomata: *Exact Path-Integration for the Two-Dimensional Coulomb Problem*; Phys. Lett. **A 87**, 387 (1982)
- [30] P. Y. Cai, A. Inomata and P. Wang: *Jackiw Transformation in Path Integrals*; Phys. Lett. **91**, 331 (1982)
- [31] H. Haken: *Synergetics-An Introduction*; Springer-Verlag (Third Edition, 1983)
- [32] C. W. Gardiner: *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*; Springer-Verlag (1983)

- [33] I. H. Duru: *Morse–Potential Green’s Function with Path Integrals*; Phys. Rev. **D 28**, 2689 (1983)
- [34] P. Y. Cai, A. Inomata and R. Wilson: *Path–Integral Treatment of the Morse Oscillator*; Phys. Lett. **A 96**, 117 (1983)
- [35] W. Horstemke and R. Lefever: *Noise–Induced Transitions*; Springer–Verlag (1984)
- [36] N. K. Pak and I. Sokmen: *General New–Time Formalism in the Path Integral*; Phys. Rev. **A 30**, 1629 (1984)
- [37] A. Inomata: *Alternative Exact–Path–Integral Treatment of the Hydrogen Atom*; Phys. Lett. **A 101**, 253 (1984)
- [38] I. Sökmen: *Exact Path Integral Solution to the Infinite Square Well*; Phys. Lett. **A 106**, 212 (1984)
- [39] M. Abramowitz and I. A. Stegun: *Pocketbook of Mathematical Functions–Abridged Edition of Handbook of Mathematical Functions*; Verlag Harri Deutsch (1984)
- [40] I. H. Duru: *On the Path Integral for the Potential $V = a \cdot r^{-2} + b \cdot r^2$* ; Phys. Lett. **A 112**, 421 (1985)
- [41] G. Junker and A. Inomata: *Transformation of the Free Propagator to the Quadratic Propagator*; Phys. Lett. **A 110**, 195 (1985)
- [42] R. P. Feynman: *QED–The Strange Theory of Light and Matter*; Princeton University Press (1985)
- [43] H. B. Callen: *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*; John Wiley & Sons (Second Edition, 1985)
- [44] H. Haken: *Advanced Synergetics–Instability Hierarchies of Self–Organizing Systems and Devices*; Springer–Verlag (Corrected Second Printing, 1987)
- [45] H. Haken: *Information and Self–Organization–Macroscopic Approach to Complex Systems*; Springer–Verlag (1988)
- [46] C. Grosche: *The Path Integral on the Poincaré Upper Half–Plane with a Magnetic Field and for the Morse Potential*; Ann. Phys. **187**, 110 (1988)
- [47] H. Risken: *The Fokker–Planck Equation–Methods of Solution and Applications*; Springer–Verlag (Second Edition, 1988)
- [48] R. Graham: *Macroscopic Potentials, Bifurcations and Noise in Dissipative Systems* in F. Moss and P. V. E. McClintock (Eds.): *Noise in Nonlinear Dynamical Systems–Volume 1: Theory of Continuous Fokker–Planck–Systems*; Cambridge University Press (1989)
- [49] I. N. Bronstein und K. A. Semendjajew: *Taschenbuch der Mathematik*; Verlag Harri Deutsch (24. Auflage, 1989)

- [50] S. N. Storchak: *Rheonomic Homogeneous Point Transformation and Reparametrization in the Path Integral*; Phys. Lett. **A 135**, 77 (1989)
- [51] W. Wischert: *Die Behandlung von Kritischen Fluktuationen in Nichtgleichgewichtsphasenübergängen mit der Fokker-Planck-Gleichung*; Diplomarbeit, Universität Stuttgart (1989)
- [52] H. Haken und M. Haken-Krell: *Entstehung von Biologischer Information und Ordnung*; Wissenschaftliche Buchgesellschaft (1989)
- [53] G. Junker: *Remarks on the Local Time Rescaling in Path Integration*; J. Phys. **A 23**, L881 (1990)
- [54] H. Kleinert: *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics*; World Scientific (1990)
- [55] S. Flügge: *Rechenmethoden der Quantentheorie—Elementare Quantenmechanik Dargestellt in Aufgaben und Lösungen*; Springer-Verlag (4. Auflage, 1990)
- [56] S. Wiggins: *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos*; Texts in Applied Mathematics 2, Springer-Verlag (1990)
- [57] G. Roepstorff: *Pfadintegrale in der Quantenphysik*; Vieweg (1991)
- [58] W. Fischer, H. Leschke and P. Müller: *Changing Dimension and Time: Two Well-Founded and Practical Techniques for Path Integration in Quantum Physics*; Preprint (1991)
- [59] U. Weiss: *Quantum Dissipative Systems*; Series in Modern Condensed Matter Physics—Vol. 2, World Scientific (1992)
- [60] A. Pelster and A. Wunderlin: *On the Generalization of the Duru-Kleinert-Propagator Transformations*; Zeitschrift für Physik B (to be published)