

Variationsstörungstheorie an der quantenmechanischen Zustandssumme

Diplomarbeit von
Werner Kürzinger

vorgelegt
dem Fachbereich Physik
der Freien Universität Berlin
im Januar 1998

Danksagung

Prof. Dr. H. Kleinert danke ich für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe, für die vielen fachlichen Anregungen und seine Geduld, die diese Arbeit ermöglichten.

Bei Dr. A. Pelster bedanke ich mich für seine intensive und engagierte Betreuung, die vielen, oft entscheidenden fachlichen Hinweisen, und die mehrfache Durchsicht der Arbeit.

Der restlichen Arbeitsgruppe danke ich für die vielen kleinen und großen Hilfestellungen und die interessanten Diskussionen.

Meiner Mutter im besonderen danke ich für die Durchsicht der Arbeit und meinen Eltern im allgemeinen für die weitreichende Unterstützung meines Studiums.

Inhaltsverzeichnis

Danksagung	1
1 Einleitung	5
1.1 Motivation	5
1.2 Zusammenfassung	6
1.3 Aufbau der Arbeit	7
1.4 Klassische Statistik	8
1.5 Quantenstatistik	10
2 Variationsstörungstheorie für die quantenmechanische Zustandssumme	12
3 Berechnung von harmonischen Erwartungswerten	18
3.1 Fourierzerlegung des Pfades	19
3.1.1 Lokale harmonische Zustandssumme	19
3.1.2 Erwartungswert für eine Funktion	20
3.1.3 Zweipunktkorrelation	22
3.1.4 Erwartungswert für zwei Funktionen	24
3.1.5 Erwartungswert für N Funktionen	27
3.2 Interpretation der Matrixelemente	28
3.3 Fouriertransformation der zu mittelnden Funktionen	29
3.4 Spezielle Erwartungswerte	32
3.4.1 Auswertung des Erwartungswertes für zwei Funktionen	32
3.4.2 Spezialfall: $F_2(x) \equiv 1$	33
3.4.3 Spezialfall: $F_2(x) = x - x_0$	34
3.4.4 Spezialfall: $F_2(x) = (x - x_0)^2$	34
3.4.5 Spezialfall: $F_2(x) = (x - x_0)^3$	35

3.4.6	Spezialfall: $F_2(x) = (x - x_0)^4$	35
3.5	Wick-Theorem	36
3.5.1	Harmonische Erwartungswerte	36
3.5.2	Lokale harmonische Erwartungswerte	37
4	Diskussion der Approximation $W_\Omega^N(x_0)$	39
4.1	Feynman-Kleinert-Variationsansatz	39
4.2	Variationsstörungstheorie erster Ordnung	40
4.3	Temperaturabhängigkeit der Fluktuationsbreite	42
4.3.1	Hochtemperaturgrenzfall (klassischer Grenzfall)	42
4.3.2	Tiefemperaturgrenzfall (quantenmechanischer Grenzfall)	43
4.4	Temperaturabhängigkeit der Approximationen des effektiven Potentials $W_\Omega^N(x_0)$	43
4.4.1	Hochtemperaturgrenzfall	44
4.4.2	Tiefemperaturgrenzfall	46
4.4.3	Zusammenhang zwischen dem effektiven Potential und der Grundzustandsenergie bei $T = 0$	47
5	Variationsstörungstheorie für die Energieeigenwerte	50
5.1	Zeitunabhängige Störungstheorie für die Energieeigenwerte	50
5.2	Variationsstörungstheorie für die Energieeigenwerte . . .	54
6	Erstes Beispiel: Der anharmonische Oszillator	56
6.1	Approximation erster Ordnung	56
6.2	Approximation zweiter Ordnung	59
7	Zweites Beispiel: Das Coulomb-Problem	64
7.1	Variationsstörungstheorie in D Raumdimensionen . . .	65
7.2	Harmonische Erwartungswerte in D Dimensionen	66
7.3	Approximation erster Ordnung	67
7.4	Tiefemperaturgrenzfall am Ortsnullpunkt	68
7.5	Approximation zweiter Ordnung	70
7.5.1	Raumintegrationen	70
7.5.2	Bildung der Kummulanten	72
7.5.3	Numerische Berechnung der zweiten Ordnung des effektiven Potentials	73

7.5.4	Spezialisierung auf den Orts- und Temperaturnullpunkt	74
8	Das Coulomb-Problem in der Variationsstörungstheorie der Grundzustandsenergie	82
8.1	Störungsreihe eines Hilffsystems	83
8.2	Berechnung der Matrixelemente der Störungsreihe . . .	84
8.3	Erste Korrektur der Grundzustandsenergie	88
8.4	Zweite Korrektur der Grundzustandsenergie	89
8.5	Dritte Korrektur der Grundzustandsenergie	90
8.6	Störungsreihe bis zur dritten Ordnung	90
8.7	Umsummation der Störungsreihe: Variationsstörungsreihe des Coulomb-Systems bis zur dritten Ordnung	91
9	Ausblick	93
A	Berechnung von Reihen	95
A.1	Summation der Zweipunktkorrelationen	95
A.2	Summation der zweiten Energiekorrektur	98
B	Gaußintegration in mehreren Dimensionen durch Variablensubstitution	100
C	Der Stromterm in der Wirkung eines Pfadintegrals	102
C.1	Berechnung der Zustandssumme eines harmonischen Oszillators mit Stromankopplung	102
C.2	Berechnung der lokalen Zustandssumme eines harmonischen Oszillators mit Stromankopplung	106
D	Zeitintegrale der Zweipunktkorrelationen	108
E	Natürliche Einheiten	109

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Ein quantenmechanisches System wird mit einem Hamilton-Operator beschrieben, der durch die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle = \hat{H} |\phi(t)\rangle \quad (1.1)$$

die Zeitentwicklung der Zustände $|\phi(t)\rangle$ bestimmt. Ist der Hamilton-Operator \hat{H} eines Systems nicht explizit zeitabhängig, gilt also

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{H} = \hat{0}, \quad (1.2)$$

so kann die Zeitentwicklung in der Schrödinger-Gleichung (1.1) durch die Lösung

$$|\phi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi\rangle \quad (1.3)$$

mit dem zeitunabhängigen Zustand $|\psi\rangle$ abgespalten werden. Die Energieeigenwerte des Systems in den stationären Zuständen werden durch die Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung, d.h. der Eigenwertgleichung des Hamilton-Operators \hat{H}

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (1.4)$$

bestimmt. Leider lassen sich nur wenige Probleme aus der Quantenmechanik durch das Lösen der Schrödinger-Gleichungen (1.1) und (1.4) analytisch exakt berechnen. Es bestehen jedoch Verfahren, mit denen man

sich zumindest Näherungslösungen der Energieeigenwerte in (1.4) verschaffen kann. Die zeitunabhängige Störungstheorie geht von (1.4) aus und stellt die Energieeigenwerte durch eine Potenzreihenentwicklung in einem vom Problem abhängigen “Kopplungsparameter” ϵ mit $\epsilon \ll 1$ dar, deren Entwicklungskoeffizienten sukzessive bestimmt werden. Es zeigt sich für viele Systeme, daß diese Potenzreihe einen verschwindenden Konvergenzradius hat, da ihre Konvergenz nur asymptotisch für $\epsilon \rightarrow 0$ vorliegt. Demnach stellen Partialsummen bis zur Größenordnung $N \sim 1/\epsilon$ eine brauchbare Näherung dar, während darüber hinaus reichende Partialsummen divergieren. Die Störungstheorie bietet also keine Möglichkeit, die Energieeigenwerte in beliebiger Genauigkeit zu berechnen. Es gibt jedoch verschiedene Resummierungsverfahren, die es erlauben, divergente Reihen in konvergente umzuformen. Zu den seit längerem bekannten Methoden zählen das Pade- und das Pade-Borel-Verfahren [23], [24], [25]. Diese wurden in jüngster Zeit durch die Variationsstörungstheorie ergänzt [1], bei der die Entwicklungskoeffizienten von einem zusätzlichen Parameter abhängen. Dieser Parameter wird dabei für jede Partialsumme angepaßt, um so die Konvergenz für alle Kopplungsstärken $\epsilon \in [0, \infty)$ zu erzwingen. Das in dieser Arbeit dazu angewandte Verfahren ist die Variationsstörungstheorie, die eine Resummation der zeitunabhängigen Störungstheorie darstellt.

1.2 Zusammenfassung

Bei der Formulierung der Variationsstörungstheorie für die quantenmechanische Zustandssumme, ergeben sich im Verlauf der Rechnung sogenannte “Erwartungswerte”, zu deren Auswertung im theoretischen Teil dieser Arbeit eine für jede Ordnung gültige “Verschmierungsformel” konstruiert wird. Diese ist eine Verallgemeinerung der Verschmierungsformel zur Variationsstörungstheorie erster Ordnung [1, (5.41)]. Ferner reproduziert sie die Erwartungswerte, die zu polynomialen Potentialen bisher mit Hilfe des Wick-Theorems berechnet wurden. Die Verschmierungsformel ermöglicht es, die Anwendung der Variationsstörungstheorie für die quantenmechanische Zustandssumme auf solche physikalischen Systeme auszudehnen, deren Potenzreihenentwicklung des Potentials nach der Ortskoordinate nicht abbricht. Ein Beispiel für ein solches Potential ist das des Coulomb-Problems $V(\mathbf{x}) \sim 1/|\mathbf{r}|$, dessen Untersuchung im zweiten

Teil der Arbeit einerseits die Anwendung der Verschmierungsformel und andererseits die Konvergenzeigenschaften der Variationsstörungstheorie illustrieren soll.

1.3 Aufbau der Arbeit

Das Hauptgewicht dieser Arbeit liegt auf der Verbesserung und Anwendung der Variationsstörungstheorie für die quantenmechanische Zustandssumme. Deshalb werden am Ende dieses Kapitels einige Grundlagen aus der klassischen und quantenmechanischen statistischen Physik vorbereitend erläutert. In Kapitel 2 wird die Variationsstörungstheorie für die quantenmechanische Zustandssumme entwickelt. Sie besitzt eine besondere Eleganz und Anschaulichkeit, und stellt darüber hinaus nicht nur einen Variationsparameter, sondern eine ganze Schar bereit, die die Approximation der exakten Zustandssumme optimieren. Im Kapitel 3 wird ein wichtiges Werkzeug für die Anwendung der Theorie geschaffen. Die Formulierung des Variationsverfahrens für die Zustandssumme führt auf harmonische Erwartungswerte, deren Auswertung durch die in diesem Kapitel entwickelte "Verschmierungsformel" ermöglicht wird. Diese Formel erweitert die Anwendbarkeit der Theorie auf eine neue Klasse von Potentialen, bei dem die Erwartungswerte nicht mit Hilfe des Wick-Theorems auswertbar sind. Das Wick-Theorem für harmonische Erwartungswerte wird am Ende dieses Kapitels bewiesen. Anschließend werden im Kapitel 4 die Temperaturgrenzfälle der Variationsstörungstheorie für die Zustandssumme diskutiert, und es wird der Zusammenhang zwischen dem effektiven Potential und der Grundzustandsenergie bei $T = 0$ hergeleitet. Es folgt die Darstellung der Störungstheorie für die Energieeigenwerte und als deren Erweiterung, die Variationstörungstheorie für die Energieeigenwerte im Kapitel 5. Diese Formulierung ist technisch leichter auszuwerten als die Zustandssummenformulierung.

Bei der Variationsstörungstheorie handelt es sich um ein vergleichsweise neues Verfahren, das auf Feynman und Kleinert [1, Kap. 5] zurückgeht und dessen Anwendungen sicher noch nicht voll entwickelt sind [5]. In diesem Sinne stellen die letzten drei Kapitel einerseits eine Illustration der Anwendbarkeit der Theorie dar, andererseits dienen sie auch dazu, ihr Konvergenzverhalten beispielhaft zu untersuchen. Das Kapitel 6 ist

der ersten der beiden Anwendungen in dieser Arbeit gewidmet. Es wird die freie Energie des anharmonischen Oszillator aus der zweiten Näherung der quantenmechanischen Zustandssumme berechnet und dabei die Ergebnisse von H. Meyer [26] reproduziert. Hier zeigt sich der semi-analytische Charakter des Verfahrens: Schon zur Berechnung der ersten Näherung der Zustandssumme des anharmonischen Oszillators, muß eine transzendente Gleichungen per Iteration, also numerisch, gelöst werden. Die Verschmierungsformel ermöglicht es, auch das Coulomb-Problem in der Variationsstörungstheorie für die Zustandssumme zu behandeln, in der harmonische Erwartungswerte auftreten, die nicht über das Wick-Theorem zu berechnen sind. Die Grundzustandsenergie des Coulomb-Problems wird im Kapitel 7 für $T = 0$ bis zur zweiten Ordnung analytisch berechnet. Im Kapitel 8 wird das Coulomb-Problem in der Variationsstörungstheorie der Energieeigenwerte semianalytisch bis zur dritten Ordnung berechnet. Die Ergebnisse des Kapitels 7 werden dadurch konsolidiert, denn in [1, S. 177 ff.] wird gezeigt, daß die N -ten Approximationen des k -ten Energie-Niveaus, die sich aus beiden Ansätzen ergeben, unter gewissen Bedingungen übereinstimmen.

Das Hauptgewicht dieser Arbeit liegt auf der Untersuchung der Variationsstörungstheorie für die quantenmechanische Zustandssumme. Es werden also nur solche quantenmechanischen Systeme untersucht, die an ein Reservoir mit Temperatur T im Gleichgewicht gekoppelt sind. Zur Vorbereitung werden zunächst einige wichtige Grundbegriffe der statistischen Physik zusammengetragen.

1.4 Klassische Statistik

Man betrachte ein *klassisches* kanonisches Ensemble von nichtwechselwirkenden Teilchen bei Temperatur T im thermischen Gleichgewicht. Nach den Regeln der statistischen Mechanik ist die Wahrscheinlichkeit, ein gegebenes Teilchen im Volumenelement $dp dx$ am Punkt (p, x) des Phasenraumes anzutreffen, gegeben durch [16]

$$\frac{dp dx}{2\pi\hbar} \rho(p, x) \tag{1.5}$$

mit der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(p, x) = \frac{1}{Z_{\text{cl}}} \exp \{-\beta H(p, x)\}, \quad (1.6)$$

der Hamilton-Funktion des Teilchens

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2M} + V(x) \quad (1.7)$$

und der Abkürzung

$$\beta \equiv 1/k_{\text{B}}T. \quad (1.8)$$

Die Normierungskonstante

$$Z_{\text{cl}} = \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \{-\beta V(x)\} \quad (1.9)$$

heißt Zustandssumme. Der Mittelwert einer beliebigen physikalischen Größe $F(p, x)$, abhängig von Impuls und Ort, ist gegeben durch [16]

$$\langle F(p, x) \rangle_{\text{cl}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp dx}{2\pi\hbar} F(p, x) \rho(p, x). \quad (1.10)$$

Ohne eine explizite Impulsabhängigkeit $F(p, x) = F(x)$, läßt sich die p -Integration ausführen, und der Erwartungswert wird durch das räumliche Integral

$$\langle F(x) \rangle_{\text{cl}} = \frac{1}{Z_{\text{cl}}} \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx F(x) \exp \{-\beta V(x)\} \quad (1.11)$$

gegeben. Spezialisiert man weiter auf den harmonischen Oszillator

$$V(x) = \frac{M\omega^2}{2} x^2, \quad (1.12)$$

so erhalten wir die Zustandssumme

$$Z_{\text{cl}}^{\omega} = \sqrt{\frac{1}{\beta\omega\hbar}}, \quad (1.13)$$

und es gilt

$$\langle F(x) \rangle_{\text{cl}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_{\text{cl}}}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx F(x) \exp \left\{ -\frac{x^2}{2\alpha_{\text{cl}}} \right\}. \quad (1.14)$$

Die dabei auftretende Fluktuationsbreite

$$\alpha_{\text{cl}} = \frac{1}{M\beta\omega^2} \quad (1.15)$$

beschreibt die Größe der thermischen Schwankungen.

1.5 Quantenstatistik

Im analogen *quantenmechanischen* System ist die Wahrscheinlichkeit, das System im Zustand m anzutreffen, durch die Matrixelemente

$$\langle m | \hat{\rho} | m \rangle. \quad (1.16)$$

gegeben, wo $\hat{\rho}$ den Dichteoperator

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z_{\text{qu}}} e^{-\beta\hat{H}} \quad (1.17)$$

mit dem Hamilton-Operator \hat{H} bezeichnet und der Normierungsfaktor

$$Z_{\text{qu}} = \text{Tr} \langle e^{-\beta\hat{H}} \rangle \quad (1.18)$$

die quantenmechanische Zustandssumme darstellt. Der Erwartungswert eines Operators \hat{F} ist hier durch [16]

$$\langle \hat{F} \rangle_{\text{qu}} = \text{Tr} \langle \hat{\rho} \hat{F} \rangle \quad (1.19)$$

erklärt. Sei \hat{F} ein Operator, der in Ortsdarstellung diagonal ist. Für ein harmonisches Oszillatorpotential gewinnt die Dichtematrix $\hat{\rho}$ in der Ortsdarstellung die allgemeine Form [16]

$$\rho(x, x') = \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar \coth \beta\hbar\omega/2}} \times \exp \left\{ -\frac{M\omega}{4\hbar} \left[(x+x')^2 \tanh \beta\hbar\omega/2 + (x-x')^2 \coth \beta\hbar\omega/2 \right] \right\} \quad (1.20)$$

mit den Diagonalelementen

$$\rho(x, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_{\text{qu}}}} e^{-x^2/2\alpha_{\text{qu}}} . \quad (1.21)$$

Die Zustandssumme ist

$$Z_{\text{qu}}^\omega = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\omega\beta/2)} \quad (1.22)$$

wobei die Schwankungsbreite

$$\alpha_{\text{qu}} = \frac{\hbar}{2M\omega} \coth \beta\hbar\omega/2 \quad (1.23)$$

anteilig sowohl durch thermische als auch durch Quantenfluktuationen verursacht wird. Letztere werden im Hochtemperaturgrenzfall jedoch unbedeutend, und α_{qu} strebt gegen den klassischen Limes:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \alpha_{\text{qu}} = \alpha_{\text{cl}} . \quad (1.24)$$

Es folgt für (1.19)

$$\langle \hat{F} \rangle_{\text{qu}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_{\text{qu}}}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx F(x) \exp \left\{ -\frac{x^2}{2\alpha_{\text{qu}}} \right\} . \quad (1.25)$$

Kapitel 2

Variationsstörungstheorie für die quantenmechanische Zustandssumme

In diesem Kapitel werden die Grundzüge der Variationsstörungstheorie für die quantenmechanische Zustandssumme entwickelt. Sie enthält im Unterschied zur gewöhnlichen quantenmechanischen Störungstheorie einen Variationsparameter, der geeignet ist, eine gegebene Approximation zu optimieren. Die Pfadintegralformulierung macht diesen Parameter ganz besonders anschaulich: Er stellt die Frequenz einer Schar von harmonischen Oszillatoren dar, die die Zustandssumme eines zu untersuchenden quantenmechanischen Systems approximiert.

Ausgangspunkt für die Theorie ist die Pfadintegraldarstellung für die quantenmechanische Zustandssumme einer Punktmasse mit Potential $V(x)$ in einer Dimension

$$Z = \oint \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x(\tau)] \right\} \quad (2.1)$$

mit der euklidischen Wirkung

$$\mathcal{A}[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{x}(\tau)^2 + V(x(\tau)) \right\} . \quad (2.2)$$

Im Pfadintegral (2.1) wird über alle periodischen Bahnen aufsummiert,

d.h. über alle Pfade $x(\tau)$ mit

$$x(0) = x(\hbar\beta). \quad (2.3)$$

Es erweist sich als sinnvoll, das Pfadmittel

$$\bar{x} = \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau x(\tau) \quad (2.4)$$

durch die Identität

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \delta(\bar{x} - x_0) \quad (2.5)$$

einzuführen. Dann zerfällt die Zustandssumme (2.1) in das gewöhnliche Integral

$$Z = \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 Z^{x_0} \quad (2.6)$$

und ein Pfadintegral für die sogenannte lokale Zustandssumme

$$Z^{x_0} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \oint \mathcal{D}x(\tau) \delta(\bar{x} - x_0) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x(\tau)] \right\}. \quad (2.7)$$

Da (2.7) bereits die quantenmechanischen Effekte beinhaltet, definiert man ein effektives klassisches Potential durch

$$V^{\text{eff}}(x_0) = -\frac{1}{\beta} \ln Z^{x_0}. \quad (2.8)$$

Dadurch wird erreicht, daß die quantenmechanische Zustandssumme (2.6) formal dem klassischen Pendant (1.9) ähnelt:

$$Z = \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \exp \left\{ -\beta V^{\text{eff}}(x_0) \right\}. \quad (2.9)$$

Diese Schreibweise läßt den direkten Vergleich mit dem klassischen System und damit die Abschätzung der Quanteneffekte zu.

Im weiteren Verlauf wird nun ein Verfahren entwickelt, das es gestattet, das effektive Potential $V^{\text{eff}}(x_0)$ auch für nicht analytisch lösbare

physikalische Systeme zu approximieren. Dazu wird in der euklidischen Wirkung so umgeschrieben, daß sie in

$$\mathcal{A}[x(\tau)] = \mathcal{A}_\Omega^{x_0}[x(\tau)] + \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)] \quad (2.10)$$

zerfällt, mit

$$\mathcal{A}_\Omega^{x_0}[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{x}(\tau)^2 + \frac{M}{2} \Omega(x_0)^2 [x(\tau) - x_0]^2 \right\} \quad (2.11)$$

und

$$\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ V(x(\tau)) - \frac{M}{2} \Omega(x_0)^2 [x(\tau) - x_0]^2 \right\}. \quad (2.12)$$

Die Wirkung (2.11) stellt diejenige eines um x_0 verschobenen harmonischen Oszillators dar, für den auch in der Pfadintegralformulierung die Zustandssumme analytisch berechenbar ist [1]. Die Frequenz $\Omega(x_0)$ ist noch unbestimmt und dient dazu, das Potential $V(x_0)$ durch eine Schar von verschobenen harmonischen Oszillatoren anzunähern. Das Potential in der Wirkung (2.12) bezeichnet man als Wechselwirkungspotential (engl.: interaction potential)

$$V_{\text{int}}^{x_0}(x) = V(x) - \frac{M}{2} \Omega(x_0)^2 (x - x_0)^2. \quad (2.13)$$

Setzt man die Zerlegung (2.10) in (2.7) ein und entwickelt man in der Wechselwirkung (2.12), so führt das auf

$$\begin{aligned} Z^{x_0} &= \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \oint \mathcal{D}x(\tau) \delta(\bar{x} - x_0) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_\Omega^{x_0}[x(\tau)] \right\} \\ &\times \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)] + \frac{1}{2\hbar^2} (\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)])^2 - \frac{1}{6\hbar^3} (\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)])^3 + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Definiert man die lokale harmonische Zustandssumme

$$Z_\Omega^{x_0} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \oint \mathcal{D}x(\tau) \delta(\bar{x} - x_0) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_\Omega^{x_0}[x(\tau)] \right\} \quad (2.15)$$

und die harmonischen Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \dots F_N(x(\tau_N)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \\ &\times \oint \mathcal{D}x(\tau) F_1(x(\tau_1)) \dots F_N(x(\tau_N)) \delta(\bar{x} - x_0) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}[x(\tau)] \right\}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

so lautet die obige Entwicklung (2.14)

$$\begin{aligned} Z^{x_0} &= Z_{\Omega}^{x_0} \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \right. \\ &\quad + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \\ &\quad \left. - \frac{1}{6\hbar^3} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2)) V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_3)) \rangle_{\Omega}^{x_0} + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

(2.17) läßt sich auch in eine Exponentialentwicklung umschreiben

$$\begin{aligned} Z^{x_0} &= Z_{\Omega}^{x_0} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega,c}^{x_0} \right. \\ &\quad + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega,c}^{x_0} \\ &\quad \left. - \frac{1}{6\hbar^3\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2)) V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_3)) \rangle_{\Omega,c}^{x_0} + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

(2.17) heißt Momenten- und (2.18) Kummulantenentwicklung. Hierbei sind die ersten drei Kummulanten folgendermaßen definiert: Die erste Kummulante und das erste Moment sind identisch

$$\langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega,c}^{x_0} = \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0}, \quad (2.19)$$

die zweite Kummulante entspricht der Standardabweichung

$$\begin{aligned} &\langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega,c}^{x_0} = \\ &\langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} - \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \end{aligned} \quad (2.20)$$

und für die dritte Kummulante gilt

$$\begin{aligned}
& \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1))V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2))V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_3)) \rangle_{\Omega,c}^{x_0} = \\
& \quad \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1))V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2))V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_3)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \\
& \quad - 3 \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1))V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_3)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \\
& \quad + 2 \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_3)) \rangle_{\Omega}^{x_0}. \tag{2.21}
\end{aligned}$$

Gemäß Definition (2.8) wird das effektive Potential $V^{\text{eff}}(x_0)$ dabei zu

$$\begin{aligned}
V^{\text{eff}}(x_0) = & -\frac{1}{\beta} \ln Z_{\Omega}^{x_0} + \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega,c}^{x_0} \\
& - \frac{1}{2\hbar^2\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1))V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega,c}^{x_0} \\
& + \frac{1}{6\hbar^3\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_3 \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1))V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_2))V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_3)) \rangle_{\Omega,c}^{x_0} + \dots \tag{2.22}
\end{aligned}$$

Da durch die Einführung des Parameters $\Omega(x_0)$ die Wirkung (2.10) nicht verändert wurde, wird auch das effektive Potential $V^{\text{eff}}(x_0)$ in (2.22) nicht von dem Parameter $\Omega(x_0)$ abhängen. Bricht man die Summation jedoch nach N Termen ab, so stellt $\Omega(x_0)$ einen Parameter dar, der geeignet ist, die N -te Partialsumme

$$W_{\Omega}^N(x_0) = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{\Omega}^{x_0} + \sum_{n=1}^N \frac{(-1)^{n+1}}{n! \hbar^n \beta} \langle (\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)])^n \rangle_{\Omega,c}^{x_0}. \tag{2.23}$$

so zu variieren, daß die gesamte Reihe (2.22) möglichst gut angenähert wird.

Das optimale $\Omega^N(x_0)$ scheint dasjenige zu sein, in dessen Umgebung die Partialsumme $W_{\Omega}^N(x_0)$ am wenigsten davon abhängt. In der Tat zeigt die Untersuchung der Partialsummenfolge in [1, 8, 12] für das Potential $V(x) = M\omega^2 x^2/2 + gx^4/4$ bei der Temperatur $T = 0$ eine mit der Ordnung N exponentiell schnelle Konvergenz gegen das exakte Potential, falls für jede Ordnung N der Parameter $\Omega^N(x_0)$ so gewählt wird, daß die Veränderlichkeit der Partialsumme $W_{\Omega}^N(x_0)$ dort minimal wird. Zur Ermittlung des optimalen $\Omega^N(x_0)$ ist gemäß [1] nach folgender Vorschrift

zu verfahren. Es ist zunächst die erste Ableitung der Approximation nullzusetzen:

$$\frac{dW_{\Omega}^N(x_0)}{d\Omega(x_0)} = 0. \quad (2.24)$$

Es ist die kleinste reelle der auftretenden Lösungen zu wählen. Hat diese Gleichung keine Lösung in $\Omega(x_0)$, wird die zweite Ableitung nullgesetzt:

$$\frac{d^2W_{\Omega}^N(x_0)}{d\Omega(x_0)^2} = 0. \quad (2.25)$$

Gibt es wieder kein $\Omega(x_0)$, das die Gleichung befriedigt, so muß sukzessiv zu höheren Ableitungen übergegangen werden. Das der niedersten lösba- ren Ableitung entstammende kleinste reelle $\Omega^N(x_0)$ ist das gesuchte: Laut [1] ist die Konvergenz der Partialsummenfolge gegen ihren exakten Wert hier am besten. Für andere Potentiale ist die Konvergenz des Verfahrens nicht bewiesen. Auch aus diesem Grund wird in Kapitel 6 die analoge Entwicklung bis zur zweiten Ordnung für das Coulomb-Potential bei- spielhaft untersucht.

Kapitel 3

Berechnung von harmonischen Erwartungswerten

Die Anwendbarkeit der in Kapitel 2 entwickelten Variationsstörungstheorie hängt maßgeblich von den Möglichkeiten ab, die harmonischen Erwartungswerte (2.16) explizit auszuwerten. Die Auswertung durch Feynmangraphen stellt eine sehr elegante Methode dar [1],[10], die jedoch den Nachteil hat, daß sie nur bei quantenmechanischen Systemen mit polynomialem Potential anwendbar ist. Eine andere Methode, führt die Pfadintegrale in (2.16) auf Riemansche Integrale zurück. In niederster Ordnung gibt es dazu eine einfache Verschmierungsformel [1, (5.41)], die hier zu höheren Ordnungen erweitert wird. Sie gestattet es, die Pfadintegration auf eine Faltung der zu mittelnenden Funktion mit einer Gauß-Funktion zurückzuführen. Es kommen dabei zwei Methoden zur Anwendung: Die erste folgt der Ableitung der Verschmierungsformel erster Ordnung [1]. Die zweite führt das zu berechnende Pfadintegral durch Fouriertransformationen auf das lösbares Pfadintegral der Zustandssumme des harmonischen Oszillators mit Stromankopplung zurück.

3.1 Fourierzerlegung des Pfades

Das Pfadintegral (2.16) wird über alle geschlossenen Pfade geführt, so daß sich der Pfad $x(\tau)$ in eine Fourierreihe zerlegen läßt:

$$x(\tau) = x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} \left(x_m e^{i\omega_m \tau} + x_m^* e^{-i\omega_m \tau} \right). \quad (3.1)$$

Die Randbedingung $x(0) = x(\hbar\beta)$ führt dabei auf die Matsubara-Frequenzen

$$\omega_m = 2\pi m / \hbar\beta. \quad (3.2)$$

Das Pfadmaß $\oint \mathcal{D}x(\tau)$ ändert sich bei dieser Substitution nach [1, (2.311)]

$$\oint \mathcal{D}x(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \prod_{m=1}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{re}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{im}} \frac{\beta M \omega_m^2}{\pi} \right\} \sqrt{\frac{M}{2\pi \hbar^2 \beta}}. \quad (3.3)$$

Für das Pfadmaß aus (2.16) gilt somit

$$\oint \mathcal{D}x(\tau) \delta(\bar{x} - x_0) = \prod_{m=1}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{re}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{im}} \frac{\beta M \omega_m^2}{\pi} \right\} \sqrt{\frac{M}{2\pi \hbar^2 \beta}}, \quad (3.4)$$

denn x_0 fällt auf natürliche Weise mit dem Pfadmittel \bar{x} zusammen. Was erhalten bleibt, sind lediglich die Integrationen über die Real- und Imaginärteile der Fourieramplituden x_m^{re} und x_m^{im} . In den Erwartungswerten (2.16) taucht die lokale harmonische Zustandssumme (2.15) auf, deren Berechnung deshalb an den Anfang gestellt wird.

3.1.1 Lokale harmonische Zustandssumme

Setzt man (3.1) und (3.4) in (2.11) und (2.15) ein, ergibt sich nach Ausführen der τ -Integration in der Wirkung

$$Z_{\Omega}^{x_0} = \prod_{m=1}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{re}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{im}} \frac{\beta M \omega_m^2}{\pi} \right\} \times \exp \left\{ -M\beta \sum_{m=1}^{\infty} [\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)] [(x_m^{\text{re}})^2 + (x_m^{\text{im}})^2] \right\}. \quad (3.5)$$

Alle Integrale sind hier Gaußscher Natur und lassen sich deshalb direkt berechnen:

$$Z_{\Omega}^{x_0} = \prod_{m=1}^{\infty} \frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)}. \quad (3.6)$$

Unter Zuhilfenahme der Produktdarstellung der hyperbolischen Sinus-Funktion [3, 1.431.2]

$$\sinh x = x \prod_{m=1}^{\infty} \frac{m^2 \pi^2 + x^2}{m^2 \pi^2} \quad (3.7)$$

folgt mit den Matsubara-Frequenzen (3.2)

$$Z_{\Omega}^{x_0} = \frac{\hbar \Omega(x_0) \beta / 2}{\sinh \hbar \Omega(x_0) \beta / 2}. \quad (3.8)$$

3.1.2 Erwartungswert für eine Funktion

Nach (2.16) ist für $N = 1$ der folgende Erwartungswert zu berechnen:

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \sqrt{\frac{2\pi \hbar^2 \beta}{M}} \\ &\times \oint \mathcal{D}x(\tau) F_1(x(\tau_1)) \delta(\bar{x} - x_0) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}[x(\tau)] \right\}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Substituiert man (3.1) und (3.4) unter Beachtung von (2.11), so folgt

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \prod_{m=1}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{re}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{im}} \frac{\beta M \omega_m^2}{\pi} \right\} \\ &\times F_1 \left(x_0 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(x_m^{\text{re}} \cos \omega_m \tau_1 - x_m^{\text{im}} \sin \omega_m \tau_1 \right) \right) \\ &\times \exp \left\{ -M \beta \sum_{m=1}^{\infty} \left[\omega_m^2 + \Omega^2(x_0) \right] \left[(x_m^{\text{re}})^2 + (x_m^{\text{im}})^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Der Integrand soll in jedem Argument auf Gauß-Form gebracht werden. Dazu wird die Funktion $F_1(x(\tau_1))$ einer Fourieranalyse unterzogen:

$$F_1(x(\tau_1)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} e^{ik_1 x(\tau_1)} \tilde{F}_1(k_1). \quad (3.11)$$

Hierbei bezeichnet $\tilde{F}_1(k_1)$ die Fouriertransformierte von $F_1(x(\tau_1))$. Setzt man (3.11) in (3.10) ein, und trennt man Real- und Imaginärteile, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \prod_{m=1}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{re}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{im}} \frac{\beta M \omega_m^2}{\pi} \right\} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \tilde{F}_1(k_1) \\ &\times \exp \left\{ ik_1 x_0 - M\beta \sum_{m=1}^{\infty} [\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)] [(x_m^{\text{re}})^2 + (x_m^{\text{im}})^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{2ik_1}{[\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)]\beta M} (x_m^{\text{re}} \cos \omega_m \tau_1 - x_m^{\text{im}} \sin \omega_m \tau_1)] \right\}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Hier kann sowohl in den x_m^{re} als auch in den x_m^{im} quadratisch ergänzt werden, was auf den Exponenten

$$\begin{aligned} ik_1 x_0 - M\beta \sum_{m=1}^{\infty} [\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)] &\left\{ \left(x_m^{\text{re}} - \frac{ik_1 \cos \omega_m \tau_1}{[\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)]\beta M} \right)^2 \right. \\ &\left. + \left(x_m^{\text{im}} + \frac{ik_1 \sin \omega_m \tau_1}{[\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)]\beta M} \right)^2 + \frac{k_1^2}{[\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)]^2 \beta^2 M^2} \right\} \end{aligned} \quad (3.13)$$

führt. Die quadratischen Terme in den Variablen x_m^{re} und x_m^{im} können nun nach Gauß integriert werden, wobei wegen (3.6) gerade die lokale harmonische Zustandssumme im Nenner von (3.12) kompensiert wird. Es folgt

$$\langle F_1(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \tilde{F}_1(k_1) \exp \left\{ ik_1 x_0 - \frac{k_1^2}{\beta M} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \right\}. \quad (3.14)$$

An dieser Stelle definieren wir

$$a^2(x_0) := \frac{2}{\beta M} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)}, \quad (3.15)$$

was sich gemäß (A.11) geschlossen darstellen läßt durch

$$a^2(x_0) = \frac{\hbar}{2M\Omega(x_0)} \left\{ \coth \left[\frac{\hbar\beta\Omega(x_0)}{2} \right] - \frac{2}{\hbar\beta\Omega(x_0)} \right\}. \quad (3.16)$$

Es zeigt sich bei der Berechnung von Mittelwerten mit N Zeitargumenten, daß es sinnvoll ist, (3.16) als Diagonalelement einer symmetrischen $N \times N$ Matrix aufzufassen. (3.15) wird sich dabei als Spezialfall einer allgemeineren Reihe herausstellen. Mit Hilfe der Fourier-Rücktransformation

$$F_1(k_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 e^{-ik_1 x_1} \tilde{F}_1(x_1) \quad (3.17)$$

folgt aus (3.14) und (3.15) schließlich die Verschmierungsformel [1, (5.41)]

$$\langle F_1(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy_1}{\sqrt{2\pi a^2(x_0)}} \exp \left[-\frac{(y_1 - x_0)^2}{2a^2(x_0)} \right] F_1(y_1). \quad (3.18)$$

Sie ermöglicht es, den Mittelwert $\langle F_1(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0}$ der Funktion $F_1(x(\tau_1))$ mit der Pfadintegraldarstellung (3.9) auf die Faltung mit einer Gauß-Funktion zurückzuführen, deren Breite durch $a^2(x_0)$ gegeben ist. Bevor der Erwartungswert für zwei Funktionen berechnet wird, betrachten wir die sogenannte Zweipunktkorrelation

$$G^{x_0}(\tau_1, \tau_2) := \langle x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle_{\Omega}^{x_0}. \quad (3.19)$$

3.1.3 Zweipunktkorrelation

Die Zweipunktkorrelation (3.19) erlangt in der Feldtheorie eine fundamentale Bedeutung, da nach dem Wick-Theorem (3.90) alle N -Punktkorrelationen $\langle x(\tau_1) \dots x(\tau_N) \rangle_{\Omega}^{x_0}$ auf diese Größe zurückzuführen sind. Zu ihrer Berechnung werden in der Definition der harmonischen Erwartungswerte (2.16) mit der Wirkung (2.11) der Pfad durch (3.1) und das Pfadmaßes gemäß (3.4) ersetzt:

$$\begin{aligned} G^{x_0}(\tau_1, \tau_2) &= \frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \prod_{m=1}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{re}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{im}} \frac{\beta M \omega_m^2}{\pi} \right\} \\ &\times \left[x_0 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(x_m^{\text{re}} \cos \omega_m \tau_1 - x_m^{\text{im}} \sin \omega_m \tau_1 \right) \right] \\ &\times \left[x_0 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(x_m^{\text{re}} \cos \omega_m \tau_2 - x_m^{\text{im}} \sin \omega_m \tau_2 \right) \right] \\ &\times \exp \left\{ -M\beta \sum_{m=1}^{\infty} \left[\omega_m^2 + \Omega^2(x_0) \right] \left[(x_m^{\text{re}})^2 + (x_m^{\text{im}})^2 \right] \right\}. \quad (3.20) \end{aligned}$$

Wird das Produkt der Klammern in der zweiten und dritten Zeile von (3.20) ausmultipliziert, so ergeben die Mischterme Integrale vom Typ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx x \exp \{-ax^2\}, \quad (3.21)$$

welche verschwinden. Wir erhalten somit

$$G^{x_0}(\tau_1, \tau_2) = \frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \prod_{m=1}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{re}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{im}} \frac{\beta M \omega_m^2}{\pi} \right\} \quad (3.22)$$

$$\left\{ x_0^2 + 4 \sum_{m=1}^{\infty} \left[(x_m^{\text{re}})^2 \cos \omega_m \tau_1 \cos \omega_m \tau_2 + (x_m^{\text{im}})^2 \sin \omega_m \tau_1 \sin \omega_m \tau_2 \right] \right\}.$$

Die verbleibenden Gauß-Integrationen lassen sich mit den Formeln [19, S. 66, Nr. 2,4]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp \{-ax^2\} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (3.23)$$

und

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp \{-ax^2\} = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{a^3}} \quad (3.24)$$

ausführen:

$$G^{x_0}(\tau_1, \tau_2) = \frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \left[\prod_{m=1}^{\infty} \frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \right] \quad (3.25)$$

$$\times \left[x_0^2 + \frac{2}{\beta M} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\cos \omega_m \tau_1 \cos \omega_m \tau_2 + \sin \omega_m \tau_1 \sin \omega_m \tau_2}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \right].$$

Wir benutzen das Additionstheorem

$$\cos(x - y) = \cos x \cos y + \sin x \sin y \quad (3.26)$$

sowie die Produktdarstellung der lokalen harmonischen Zustandssumme (3.6) und es folgt

$$G^{x_0}(\tau_1, \tau_2) = x_0^2 + a_{\tau_j \tau_{j'}}(x_0) \quad (3.27)$$

mit der Definition

$$a_{\tau_j \tau_{j'}}(x_0) := \frac{2}{\beta M} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\cos[\omega_m(\tau_j - \tau_{j'})]}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \quad (3.28)$$

für $j, j' = 1, 2$. Die Summe (3.28) wird für $|\tau_j - \tau_{j'}| \leq \hbar\beta$ in (A.11) explizit berechnet:

$$a_{\tau_j \tau_{j'}}(x_0) = \frac{\hbar}{2M\Omega(x_0)} \left\{ \frac{\cosh[\Omega(x_0)|\tau_j - \tau_{j'}| - \hbar\beta\Omega(x_0)/2]}{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} - \frac{2}{\hbar\beta\Omega(x_0)} \right\}, \quad (3.29)$$

wobei sich (3.16) als Spezialfall von (3.29) mit $j = j' = 1$ herausstellt.

3.1.4 Erwartungswert für zwei Funktionen

Als nächstes soll der Erwartungswert (2.16) für $N = 2$ untersucht werden. Es tauchen schon dabei alle technischen Schwierigkeiten auf, die auch für die Rechnung mit N Zeitargumenten zu bewältigen sind. Die Ersetzung des Pfades (3.1) und des Pfadmaßes (3.4) führen hier mit (2.11) auf

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1))F_2(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \prod_{m=1}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{re}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{im}} \frac{\beta M \omega_m^2}{\pi} \right\} \\ &\times F_1 \left[x_0 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(x_m^{\text{re}} \cos \omega_m \tau_1 - x_m^{\text{im}} \sin \omega_m \tau_1 \right) \right] \\ &\times F_2 \left[x_0 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(x_m^{\text{re}} \cos \omega_m \tau_2 - x_m^{\text{im}} \sin \omega_m \tau_2 \right) \right] \\ &\times \exp \left\{ -M\beta \sum_{m=1}^{\infty} \left[\omega_m^2 + \Omega^2(x_0) \right] \left[(x_m^{\text{re}})^2 + (x_m^{\text{im}})^2 \right] \right\}. \quad (3.30) \end{aligned}$$

Die Funktionen F_1 und F_2 mit ihren Fourierdarstellungen

$$F_j(x(\tau_j)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_j}{2\pi} \tilde{F}_j(k_j) e^{ix(\tau_j)k_j} \quad (3.31)$$

für $j = 1, 2$ liefern eingesetzt

$$\langle F_1(x(\tau_1))F_2(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} =$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{Z_\Omega^{x_0}} \prod_{m=1}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{re}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_m^{\text{im}} \frac{\beta M \omega_m^2}{\pi} \right\} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_2}{2\pi} \tilde{F}_1(k_1) \tilde{F}_2(k_2) \\
& \times \exp \left\{ i(k_1 + k_2)x_0 - M\beta \sum_{m=1}^{\infty} [\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)] \left[(x_m^{\text{re}})^2 + (x_m^{\text{im}})^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{2ik_1}{[\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)]\beta M} (x_m^{\text{re}} \cos \omega_m \tau_1 - x_m^{\text{im}} \sin \omega_m \tau_1) \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{2ik_2}{[\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)]\beta M} (x_m^{\text{re}} \cos \omega_m \tau_2 - x_m^{\text{im}} \sin \omega_m \tau_2) \right] \right\}. \quad (3.32)
\end{aligned}$$

Den Exponenten ordnet man nach Real- und Imaginärteilen und ergänzt in diesen quadratisch. Beim Ausführen der x_m^{re} - bzw. x_m^{im} -Integrationen wird wieder die lokale harmonische Zustandssumme (3.5) im Nenner von (3.30) ausgeglichen. Es verbleiben die quadratischen Ergänzungen

$$\begin{aligned}
\langle F_1(x(\tau_1)) F_2(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_2}{2\pi} \tilde{F}_1(k_1) \tilde{F}_2(k_2) \quad (3.33) \\
&\times \exp \left\{ i(k_1 + k_2)x_0 - \frac{1}{\beta M} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \right. \\
&\times \left. \left[(k_1 \cos \omega_m \tau_1 + k_2 \cos \omega_m \tau_2)^2 + (k_1 \sin \omega_m \tau_1 + k_2 \sin \omega_m \tau_2)^2 \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Der Exponent schreibt sich unter Verwendung des Additionstheorems (3.26) und der Summe (3.28)

$$i(k_1 + k_2)x_0 - k_1^2 \frac{a_{\tau_1 \tau_1}(x_0)}{2} - k_2^2 \frac{a_{\tau_2 \tau_2}(x_0)}{2} - k_1 k_2 a_{\tau_1 \tau_2}(x_0). \quad (3.34)$$

Um alle Details der Rechnung aufzugreifen, die für den Fall mit N Zeitargumenten wichtig sind, soll die Vektorschreibweise eingeführt werden:

$$\mathbf{k} := \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}_0 := \begin{pmatrix} x_0 \\ x_0 \end{pmatrix}.$$

Darüber hinaus sind die $a_{\tau_j \tau_{j'}}(x_0)$ als Elemente einer 2×2 -Matrix $A(x_0)$ aufzufassen

$$A^{-1}(x_0) = \begin{pmatrix} a_{\tau_1 \tau_1}(x_0) & a_{\tau_1 \tau_2}(x_0) \\ a_{\tau_2 \tau_1}(x_0) & a_{\tau_2 \tau_2}(x_0) \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

deren Neben- und Hauptdiagonalelemente jeweils identisch sind. Der Erwartungswert bekommt damit die Form

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1))F_2(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_2}{2\pi} \tilde{F}_1(k_1)\tilde{F}_2(k_2) \\ &\times \exp \left\{ i\mathbf{k}^T \mathbf{x}_0 - \frac{1}{2}\mathbf{k}^T A(x_0)\mathbf{k} \right\} . \end{aligned} \quad (3.36)$$

Die Funktionen \tilde{F}_1 und \tilde{F}_2 werden nun gemäß

$$F_j(k_j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_j e^{-ik_j x_j} \tilde{F}_j(x_j) \quad (3.37)$$

mit $j = 1, 2$ rücktransformiert. Sind die neuen Variablen x_j auch in Vektorschreibweise gehalten, so folgt

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1))F_2(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_2 F_1(y_1)F_2(y_2) \\ &\times \exp \left\{ i\mathbf{k}^T (\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}) - \frac{1}{2}\mathbf{k}^T A(x_0)\mathbf{k} \right\} . \end{aligned} \quad (3.38)$$

In (B.9) wird gezeigt, daß für nichtsinguläre Matrizen A und beliebige Dimensionen N das Gauß-Integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \exp \left\{ i\mathbf{k}^T \mathbf{y} - \frac{1}{2}\mathbf{k}^T A\mathbf{k} \right\} \quad (3.39)$$

die Form hat

$$\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det(A)}} \exp \left\{ -\frac{1}{2}\mathbf{y}^T (A^{-1})\mathbf{y} \right\} . \quad (3.40)$$

Dabei stellt A^{-1} die zu A inverse Matrix dar. Auf (3.38) angewandt, ergibt sich das Resultat:

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1))F_2(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2 \det(A(x_0))}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_2 F_1(y_1)F_2(y_2) \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{x}_0)^T [A^{-1}(x_0)](\mathbf{y} - \mathbf{x}_0) \right\} . \end{aligned} \quad (3.41)$$

3.1.5 Erwartungswert für N Funktionen

Die Verallgemeinerung auf N Zeitargumente ist direkt ablesbar. An die Stelle der Formel (3.34) tritt deren N -dimensionales Pendant

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \dots F_N(x(\tau_N)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \prod_{j=1}^N \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_j}{2\pi} \tilde{F}_j(k_j) \right\} \\ &\times \exp \left\{ ix_0 \sum_{j=1}^N k_j - \frac{1}{\beta M} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \right. \\ &\times \left. \left\{ \left[\sum_{j=1}^N k_j \cos(\omega_m \tau_j) \right]^2 + \left[\sum_{j=1}^N k_j \sin(\omega_m \tau_j) \right]^2 \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Die Vektoren \mathbf{k} , \mathbf{x}_0 und \mathbf{y} sind nun N -dimensional:

$$\mathbf{k} := \begin{pmatrix} k_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ k_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}_0 := \begin{pmatrix} x_0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} := \begin{pmatrix} y_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ y_N \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Aus der früheren 2×2 -Matrix $A(x_0)$ wird nun eine $N \times N$ -Matrix mit den Komponenten $(A(x_0))_{jj'} := a_{\tau_j \tau_{j'}}(x_0)$. So läßt sich (3.42) kompakt schreiben als

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \dots F_N(x(\tau_N)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \prod_{j=1}^N \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_j}{2\pi} \tilde{F}_j(k_j) \right\} \\ &\times \exp \left\{ i\mathbf{k}^T \mathbf{x}_0 - \frac{1}{2} \mathbf{k}^T A(x_0) \mathbf{k} \right\}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Die Funktionen \tilde{F}_j werden nach (3.37) für alle $j = 1, \dots, N$ rücktransformiert, und wir erhalten nach den k_j -Integrationen mit Formel (3.40) das Ergebnis

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \dots F_N(x(\tau_N)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det(A(x_0))}} \prod_{j=1}^N \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dy_j F_j(y_j) \right\} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{x}_0)^T A^{-1}(x_0) (\mathbf{y} - \mathbf{x}_0) \right\}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

3.2 Interpretation der Matrixelemente

Wie lassen sich die Matrixelemente $a_{\tau_j\tau_{j'}}(x_0)$ interpretieren? Zunächst erhält man für den Erwartungswert des Ortes durch Anwendung von (3.18) unmittelbar, daß

$$\langle x(\tau) \rangle_{\Omega}^{x_0} = x_0. \quad (3.46)$$

Setzt man desweiteren in (3.41) die Funktionen

$$F_1(x(\tau_1)) = x(\tau_1) - x_0, \quad F_2(x(\tau_2)) = x(\tau_2) - x_0 \quad (3.47)$$

ein, so resultiert für die Kreuzkorrelationsfunktionen mit den Ergebnissen aus (3.27) und (3.46)

$$\begin{aligned} \langle [x(\tau_j) - x_0][x(\tau_{j'}) - x_0] \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \\ \langle x(\tau_j)x(\tau_{j'}) \rangle_{\Omega}^{x_0} - \langle x(\tau_j) \rangle_{\Omega}^{x_0} \langle x(\tau_{j'}) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= a_{\tau_j\tau_{j'}}(x_0). \end{aligned} \quad (3.48)$$

Die Gleichung (3.48) gibt $a_{\tau_j\tau_j}(x_0) = a^2$ die Bedeutung der Standardabweichung der Koordinate $x(\tau)$ bezüglich der Mittelung durch $\langle \dots \rangle_{\Omega}^{x_0}$.

Einen weiteren interessanten Zusammenhang geben folgende Überlegungen. Im ersten Kapitel, Formel (1.25) wurde der Erwartungswert eines Operators \hat{F} im quantenmechanischen statistischen Ensemble angegeben. Die Fluktuationen sind dabei sowohl thermischer als auch quantenmechanischer Natur. Um den reinen Quanteneffekt ablesen zu können, schreibt man (1.25) um zu

$$\begin{aligned} \langle \hat{F} \rangle_{\text{qu}} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_{\text{cl}}}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2\alpha_{\text{cl}}}} \\ &\times \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} du F(u+x) e^{-\frac{u^2}{2\alpha}} \right], \end{aligned} \quad (3.49)$$

wobei α definiert ist durch

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha_{\text{qu}} - \alpha_{\text{cl}} \\ &= \frac{\hbar}{2M\omega} \left\{ \coth \hbar\beta\omega/2 - \frac{1}{\hbar\beta\omega/2} \right\}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Die Definition von α stimmt mit dem Ausdruck für a^2 wie in (3.16) gegeben überein, wenn dort $\Omega(x_0) = \omega$ gewählt wird. Hier zeigt sich

die volle Bedeutung der Diagonalmatrixelemente a^2 : In der ersten Zeile von (3.49) wird wie im klassischen Fall (1.14) die Mittelung über die thermischen Effekte vollzogen. Daraus folgt, daß die zweite Zeile gerade die *reinen Quanteneffekte* berücksichtigen muß. Die Größe q taucht in der zweiten Zeile als Parameter auf, der in der ersten Zeile die Bedeutung der klassischen Ortskoordinate erhält. Insbesondere läßt sich im Ausdruck

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} du F(u+q) e^{-\frac{u^2}{2\alpha}} \quad (3.51)$$

die in α enthaltene Frequenz ω als von der "klassischen" Koordinate q abhängig betrachten $\omega = \omega(q)$. Dadurch gewinnen wir die volle Analogie zur Verschmierungsformel (3.18) und können sie als Erwartungswert der Funktion $F_1(x(\tau_1))$ bezüglich der reinen Quanteneffekte interpretieren.

3.3 Fouriertransformation der zu mitteln- den Funktionen

Eine andere Methode für die Auswertung der harmonischen Erwartungswerte (2.16) läßt die Pfade unangetastet. Sie basiert auf einer exakt lösbaren Form des Pfadintegrals, die durch Fouriertransformation der Funktionen $F_j(x(\tau_j))$, $j = 1, \dots, N$ und der Diracschen Delta-Funktion $\delta(\bar{x} - x_0)$ erreicht wird. Es handelt sich bei dem Pfadintegral um die Zustandssumme eines harmonischen Oszillators mit Ankopplung an einen äußeren Strom $j(\tau)$, das analytisch lösbar ist. Für allgemeine Ströme $j(\tau)$ gilt (vgl. Anhang C)

$$\begin{aligned} & \oint \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_\Omega^{x_0}[x(\tau)] + \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau) [x(\tau) - x_0] \right\} \quad (3.52) \\ &= \frac{1}{2 \sinh \hbar\beta\Omega(x_0)/2} \exp \left\{ \frac{1}{2M\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) j(\tau') G(\tau, \tau') \right\} \end{aligned}$$

mit der Greens-Funktion des harmonischen Oszillators mit der Frequenz $\Omega(x_0)$, die periodischen Randbedingungen genügt (vgl. Anhang C):

$$G(\tau, \tau') = \frac{\cosh [\Omega(x_0)|\tau - \tau'| - \hbar\beta\Omega(x_0)/2]}{2\Omega(x_0) \sinh \hbar\beta\Omega(x_0)/2}. \quad (3.53)$$

Es soll sofort der allgemeinere Fall mit N Zeitargumenten betrachtet werden, dessen Ausgangspunkt wie oben die Pfadintegraldarstellung (2.16) ist. Hier werden die Funktionen $F_j(x(\tau_j))$ abermals als Fourierintegrale geschrieben, also

$$F_j(x(\tau_j)) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy_j F_j(y_j) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_j}{2\pi} e^{ik_j[x(\tau_j)-y_j]} \quad (3.54)$$

mit $j = 1, \dots, N$. Darüber hinaus wird die Delta-Funktion nach Fourier entwickelt:

$$\delta(\bar{x} - x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} e^{iu(\bar{x}-x_0)}. \quad (3.55)$$

Setzt man dieses in (2.16) ein, so gelangt man zu

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \dots F_N(x(\tau_N)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \sqrt{\frac{\hbar^2 \beta}{2\pi M}} \int_{-\infty}^{+\infty} du \\ &\times \left\{ \prod_{j=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} dy_j F_j(y_j) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_j}{2\pi} e^{-ik_j(y_j-x_0)} \right\} \oint \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}[x(\tau)] \right. \\ &\left. + \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{iu}{\beta} + \sum_{j=1}^N i\hbar k_j \delta(\tau - \tau_j) \right) [x(\tau) - x_0] \right\}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Das zu berechnende Pfadintegral umfaßt nun lediglich die beiden letzten Zeilen von Formel (3.56). Der letzte Term im Exponenten wird als zeitabhängiger Strom $j(\tau)$ identifiziert:

$$j(\tau) := \frac{iu}{\beta} + \sum_{j=1}^N i\hbar k_j \delta(\tau - \tau_j). \quad (3.57)$$

Mit der Greens-Funktion (3.53) und dem Strom (3.57) ergibt der Exponent in der zweiten Zeile von (3.53) nach Ausführung der Zeitintegrationen

$$-\frac{1}{2\beta M \Omega(x_0)^2} u^2 - \sum_{j=1}^N \frac{1}{\beta M \Omega^2} k_j u - \frac{\hbar}{2M} \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N G(\tau_j, \tau_{j'}) k_j k_{j'}. \quad (3.58)$$

Einsetzen dieses Ergebnisses in (3.56) liefert

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \dots F_N(x(\tau_N)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \frac{1}{2 \sinh \hbar \beta \Omega(x_0)/2} \sqrt{\frac{\hbar^2 \beta}{2\pi M}} \int_{-\infty}^{+\infty} du \\ &\times \left\{ \prod_{j=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} dy_j F_j(y_j) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_j}{2\pi} e^{-ik_j(y_j - x_0)} \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta M \Omega(x_0)^2} u^2 \right. \\ &\quad \left. - \sum_{j=1}^N \frac{1}{\beta M \Omega^2} k_j u - \frac{\hbar}{2M} \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N G(\tau_j, \tau_{j'}) k_j k_{j'} \right\}. \quad (3.59) \end{aligned}$$

Die u -Integration kann jetzt mittels quadratischer Ergänzung durchgeführt werden

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \dots F_N(x(\tau_N)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \frac{\hbar \beta \Omega/2}{\sinh \hbar \beta \Omega(x_0)/2} \\ &\times \left\{ \prod_{j=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} dy_j F_j(y_j) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_j}{2\pi} \right\} \exp \left\{ -i \sum_{j=1}^N k_j (y_j - x_0) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N \left[\frac{\hbar}{M} G(\tau_j, \tau_{j'}) - \frac{1}{\beta M \Omega^2} \right] k_j k_{j'} \right\}. \quad (3.60) \end{aligned}$$

An dieser Stelle entstehen dieselben Ausdrücke $a_{\tau_j \tau_{j'}}(x_0)$, die schon in den vorhergehenden Rechnungen auftraten. Nach (3.29) und (3.53) gilt dabei

$$\frac{\hbar}{M} G(\tau_j, \tau_{j'}) - \frac{1}{\beta M \Omega(x_0)^2} = a_{\tau_j \tau_{j'}}(x_0). \quad (3.61)$$

Außerdem ist der Vorfaktor

$$\frac{\hbar \beta \Omega/2}{Z_{\Omega}^{x_0}} \frac{1}{\sinh \hbar \beta \Omega(x_0)/2} \quad (3.62)$$

wegen Gleichung (3.8) gerade eins. Es dient der Übersichtlichkeit, analog zu (3.43) die Vektorschreibweise einzuführen und die $a_{\tau_j \tau_{j'}}(x_0)$ zu einer $N \times N$ -Matrix $A(x_0) := (a_{\tau_j \tau_{j'}}(x_0))$ zusammenzufassen, denn so gewinnt (3.60) die einfache Form

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \dots F_N(x(\tau_N)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \int d^N \mathbf{y} \left\{ \prod_{j=1}^N F_j(y_j) \right\} \\ &\times \int \frac{d^N \mathbf{v}}{(2\pi)^N} \exp \left\{ i \mathbf{v}^T (\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}) - \frac{1}{2} \mathbf{v}^T A(x_0) \mathbf{v} \right\}. \quad (3.63) \end{aligned}$$

Mit Hilfe von Formel (B.9) erhält man erneut das Ergebnis (3.45) das in Komponentenschreibweise folgendermaßen lautet:

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) \dots F_N(x(\tau_N)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \left\{ \prod_{j=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} dy_j F_j(y_j) \right\} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det(A(x_0))}} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N [A^{-1}(x_0)]_{jj'} (y_j - x_0)(y_{j'} - x_0) \right\}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Natürlich reduziert sich (3.64) für $N = 1$ auf die Form (3.18), denn die Inversion einer eindimensionalen Matrix ist trivial. Entsprechend liefert (3.64) für $N = 2$ das frühere Ergebnis (3.41).

3.4 Spezielle Erwartungswerte

Um die Verschmierungsformel zu illustrieren, aber auch um einige für die Anwendung im Kapitel 6 wichtige Ergebnisse zu erhalten, werden hier Spezialfälle von (3.64) betrachtet.

3.4.1 Auswertung des Erwartungswertes für zwei Funktionen

Ausgangspunkt ist die Formel (3.41). Sie ergibt mit den Translationen $y_j \rightarrow y_j - x_0$ für $j = 1, 2$

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1)) F_2(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2 \det(A(x_0))}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_2 \\ &\times F_1(y_1 + x_0) F_2(y_2 + x_0) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{y}^T [A^{-1}(x_0)] \mathbf{y} \right\}. \end{aligned} \quad (3.65)$$

An dieser Stelle ist die zu $A(x_0)$ (3.35) inverse Matrix $A^{-1}(x_0)$ zu bilden, was in 2 Dimensionen leicht fällt:

$$A^{-1}(x_0) = \frac{1}{a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0) - a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)} \begin{pmatrix} a_{\tau_1 \tau_1}(x_0) & -a_{\tau_1 \tau_2}(x_0) \\ -a_{\tau_1 \tau_2}(x_0) & a_{\tau_1 \tau_1}(x_0) \end{pmatrix}. \quad (3.66)$$

Die Symmetrie von $A(x_0)$ in der Haupt- und Nebendiagonalen überträgt sich dabei auf die Inverse $A^{-1}(x_0)$. In Komponentenschreibweise ausgedrückt lautet der Exponent von (3.65)

$$-\frac{1}{2[a_{\tau_1\tau_1}^2(x_0) - a_{\tau_1\tau_2}^2(x_0)]} \left\{ (y_1^2 + y_2^2)a_{\tau_1\tau_1}(x_0) + 2y_1y_2a_{\tau_1\tau_2}(x_0) \right\}. \quad (3.67)$$

Nach einer quadratischen Ergänzung in y_2 und einer Variablensubstitution folgt

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1))F_2(x(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2[a_{\tau_1\tau_1}^2(x_0) - a_{\tau_1\tau_2}^2(x_0)]}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 F_1(y_1) \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2a_{\tau_1\tau_1}(x_0)}(y_1 - x_0)^2 \right\} \int_{-\infty}^{+\infty} dy_2 F_2 \left[y_2 + x_0 + \frac{a_{\tau_1\tau_2}(x_0)}{a_{\tau_1\tau_1}(x_0)}(y_1 - x_0) \right] \\ &\times \exp \left\{ -\frac{a_{\tau_1\tau_1}(x_0)}{2[a_{\tau_1\tau_1}^2(x_0) - a_{\tau_1\tau_2}^2(x_0)]} y_2^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Von (3.68) ausgehend werden nun die Erwartungswerte von Funktionen

$$F_1(x) = (x - x_0)^n \quad (3.69)$$

und

$$F_2(x) = (x - x_0)^m \quad (3.70)$$

mit positiven ganzen Zahlen n, m betrachtet.

3.4.2 Spezialfall: $F_2(x) \equiv 1$

Für $F_2(x_0) \equiv 1$ folgt aus (3.68) nach Ausführung der Gauß-Integration die Verschmierungsformel (3.18). Jede dieser Potenzen (3.69) hat nach (3.18) und einer Variablentranslation um x_0 den Erwartungswert

$$\langle [x(\tau_1) - x_0]^n \rangle_{\Omega}^{x_0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a_{\tau_1\tau_1}(x_0)}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^n \exp \left\{ -\frac{x^2}{2a_{\tau_1\tau_1}(x_0)} \right\}. \quad (3.71)$$

Die Erwartungswerte ungerader Potenzen verschwinden demnach, da die Gauß-Funktion gerade ist. Für alle geraden natürlichen Zahlen n gilt

allgemein [19, (S. 66, Nr. 2)]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx x^n \exp\{-ax^2\} = \frac{1 \cdot 3 \dots (n-1) \sqrt{\pi}}{2^{\frac{n}{2}} a^{\frac{n+1}{2}}} \quad (3.72)$$

mit $a > 0$. Damit folgt für die geraden Potenzen

$$\langle [x(\tau_1) - x_0]^n \rangle_{\Omega}^{x_0} = 1 \cdot 3 \dots (n-1) a_{\tau_1 \tau_1}^{n/2}(x_0). \quad (3.73)$$

3.4.3 Spezialfall: $F_2(x) = x - x_0$

Aus (3.68) folgt zunächst durch Ausführen des y_2 -Integrals

$$\langle F_1(x(\tau_1))[x(\tau_2) - x_0] \rangle_{\Omega}^{x_0} = \frac{a_{\tau_1 \tau_2}(x_0)}{a_{\tau_1 \tau_1}(x_0)} \langle F_1(x(\tau_1))[x(\tau_1) - x_0] \rangle_{\Omega}^{x_0} \quad (3.74)$$

für beliebige Funktionen $F_1(x)$. Das bedeutet wegen (3.73), daß (3.74) für Funktionen (3.69) mit geradem n verschwindet. Für ungerades n folgt

$$\langle [x(\tau_1) - x_0]^n [x(\tau_2) - x_0] \rangle_{\Omega}^{x_0} = 1 \cdot 3 \dots n a_{\tau_1 \tau_2}(x_0) a_{\tau_1 \tau_1}^{(n-1)/2}(x_0). \quad (3.75)$$

3.4.4 Spezialfall: $F_2(x) = (x - x_0)^2$

Für allgemeines $F_1(x_0)$ folgt aus (3.68)

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1))[x(\tau_2) - x_0]^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \left\{ 1 - \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)}{a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0)} \right\} a_{\tau_1 \tau_1}(x_0) \langle F_1(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \\ &+ \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)}{a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0)} \langle F_1(x(\tau_1))[x(\tau_1) - x_0]^2 \rangle_{\Omega}^{x_0}. \end{aligned} \quad (3.76)$$

Dieses Ergebnis mit (3.73) zusammengenommen liefert für $F_1(x)$ in der Form (3.69) mit geradem n die Formel

$$\begin{aligned} \langle [x(\tau_1) - x_0]^n [x(\tau_2) - x_0]^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \left\{ 1 - \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)}{a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0)} \right\} \\ &\times 1 \cdot 3 \dots (n-1) a_{\tau_1 \tau_1}^{(n+2)/2}(x_0) + \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)}{a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0)} 1 \cdot 3 \dots (n+1) a_{\tau_1 \tau_1}^{(n+2)/2}(x_0), \end{aligned} \quad (3.77)$$

während der Ausdruck für ungerades n verschwindet.

3.4.5 Spezialfall: $F_2(x) = (x - x_0)^3$

Hier gilt die allgemeine Form

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1))[x(\tau_2) - x_0]^3 \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \left\{ 1 - \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)}{a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0)} \right\} 3a_{\tau_1 \tau_2}(x_0) \quad (3.78) \\ &\times \langle F_1(x(\tau_1))[x(\tau_1) - x_0] \rangle_{\Omega}^{x_0} + \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^3(x_0)}{a_{\tau_1 \tau_1}^3(x_0)} \langle F_1(x(\tau_1))[x(\tau_1) - x_0]^3 \rangle_{\Omega}^{x_0}. \end{aligned}$$

Es folgt daraus mit den Formeln (3.69), (3.73) (3.69)

$$\begin{aligned} \langle [x(\tau_1) - x_0]^n [x(\tau_2) - x_0]^3 \rangle_{\Omega}^{x_0} &= 3a_{\tau_1 \tau_2}(x_0) \left\{ 1 - \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)}{a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0)} \right\} \\ &\times 1 \cdot 3 \dots n a_{\tau_1 \tau_1}^{(n+1)/2}(x_0) + \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^3(x_0)}{a_{\tau_1 \tau_1}^3(x_0)} 1 \cdot 3 \dots (n+2) a_{\tau_1 \tau_1}^{(n+3)/2}(x_0) \quad (3.79) \end{aligned}$$

für ungerade n , während die linke Seite von (3.79) für gerade n verschwindet.

3.4.6 Spezialfall: $F_2(x) = (x - x_0)^4$

Es gilt schließlich für allgemeine Funktionen $F_1(x)$

$$\begin{aligned} \langle F_1(x(\tau_1))[x(\tau_2) - x_0]^4 \rangle_{\Omega}^{x_0} &= 3 \frac{[a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0) - a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)]^2}{a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0)} \langle F_1(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \\ &+ 6 \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)[a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0) - a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)]}{a_{\tau_1 \tau_1}^3(x_0)} \langle F_1(x(\tau_1))[x(\tau_1) - x_0]^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} \\ &+ \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^4(x_0)}{a_{\tau_1 \tau_1}^4(x_0)} \langle F_1(x(\tau_1))[x(\tau_1) - x_0]^4 \rangle_{\Omega}^{x_0}. \quad (3.80) \end{aligned}$$

Die erneute Spezialisierung von $F_1(x_0)$ auf (3.69) ergibt mit (3.73) das Ergebnis

$$\begin{aligned} \langle [x(\tau_1) - x_0]^n [x(\tau_2) - x_0]^4 \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \\ &3 \frac{[a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0) - a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)]^2}{a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0)} 1 \cdot 3 \dots (n-1) a_{\tau_1 \tau_1}^{n/2}(x_0) \\ &+ 6 \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)[a_{\tau_1 \tau_1}^2(x_0) - a_{\tau_1 \tau_2}^2(x_0)]}{a_{\tau_1 \tau_1}^3(x_0)} 1 \cdot 3 \dots (n+1) a_{\tau_1 \tau_1}^{(n+2)/2}(x_0) \\ &+ \frac{a_{\tau_1 \tau_2}^4(x_0)}{a_{\tau_1 \tau_1}^4(x_0)} 1 \cdot 3 \dots (n+3) a_{\tau_1 \tau_1}^{(n+4)/2}(x_0) \quad (3.81) \end{aligned}$$

für gerades n , während die linke Seite für ungerades n verschwindet.

Diese Resultate, hier nur unter Verwendung der Verschmierungsformel abgeleitet, lassen sich durch das sogenannte Wick-Theorem auf elegantere Weise berechnen, das im Anschluß behandelt wird.

3.5 Wick-Theorem

Nach dem Wick-Theorem lassen sich die sogenannten Ortskorrelationen $\langle x(\tau_1) \dots x(\tau_N) \rangle$ bezüglich eines harmonischen Erwartungswertes $\langle \dots \rangle$ durch Paarkorrelationen $\langle x(\tau_j)x(\tau_{j'}) \rangle$ mit $j, j' = 1 \dots N$ ausdrücken:

$$\langle x(\tau_1) \dots x(\tau_N) \rangle = \sum_{\text{Paare}} \langle x(\tau_{p(1)})x(\tau_{p(2)}) \rangle \dots \langle x(\tau_{p(N-1)})x(\tau_{p(N)}) \rangle. \quad (3.82)$$

Zu summieren ist dabei über alle $(N-1)!!$ Paare aus N Zeitargumenten. Für $N=4$ gilt z.B.:

$$\begin{aligned} \langle x(\tau_1)x(\tau_2)x(\tau_3)x(\tau_4) \rangle &= \langle x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle \langle x(\tau_3)x(\tau_4) \rangle \\ &+ \langle x(\tau_1)x(\tau_3) \rangle \langle x(\tau_2)x(\tau_4) \rangle + \langle x(\tau_1)x(\tau_4) \rangle \langle x(\tau_2)x(\tau_3) \rangle. \end{aligned} \quad (3.83)$$

3.5.1 Harmonische Erwartungswerte

Der Erwartungswert sei zunächst definiert durch

$$\langle \dots \rangle := \frac{1}{Z} \oint \mathcal{D}x(\tau) \dots \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_\Omega[x(\tau)] \right\} \quad (3.84)$$

mit der euklidischen Wirkung des harmonischen Oszillators

$$\mathcal{A}_\Omega[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{x}(\tau)^2 + \frac{M}{2} \omega^2 x(\tau)^2 \right\} \quad (3.85)$$

und der Zustandssumme Z nach (2.1). Zum Beweis von (3.82) bezüglich dieses Erwartungswertes definiert man das sogenannte erzeugende Funktional

$$Z[j(\tau)] = \oint \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x(\tau)] + \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau)x(\tau) \right\}, \quad (3.86)$$

unter erneuter Verwendung von (2.2). Mit (3.86) läßt sich die linke Seite von (3.82) darstellen durch

$$\left[Z[j(\tau)]^{-1} \hbar \frac{\delta}{\delta j(\tau_1)} \cdots \hbar \frac{\delta}{\delta j(\tau_N)} Z[j(\tau)] \right]_{j(\tau)=0}. \quad (3.87)$$

Hier steht $\frac{\delta}{\delta j(\tau_n)}$ mit $n = 1, \dots, N$ für die Funktionalableitung nach dem Strom $j(\tau_n)$. Im Anhang (C.15) wird gezeigt, daß (3.86) die Form hat

$$\frac{1}{2 \sinh \omega \hbar \beta / 2} \exp \left\{ \frac{1}{2M\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) G(\tau, \tau') j(\tau') \right\} \quad (3.88)$$

mit der Greens-Funktion (C.19). Die Berechnung von $\langle x(\tau_j) x(\tau_{j'}) \rangle$ zeigt

$$G(\tau_j, \tau_{j'}) = \frac{M}{\hbar} \langle x(\tau_j) x(\tau_{j'}) \rangle, \quad (3.89)$$

so daß durch Anwendung der Produktregel für Funktionalableitungen aus (3.87) das Ergebnis (3.82) folgt.

3.5.2 Lokale harmonische Erwartungswerte

Bezüglich der lokalen harmonischen Erwartungswerte aus (2.16) gilt das Wick-Theorem in der Form

$$\begin{aligned} \langle [x(\tau_1) - x_0] \cdots [x(\tau_N) - x_0] \rangle_{\Omega}^{x_0} &= \sum_{\text{Paare}} \langle [x(\tau_{p(1)}) - x_0] [x(\tau_{p(2)}) - x_0] \rangle_{\Omega}^{x_0} \\ &\cdots \langle [x(\tau_{p(N-1)}) - x_0] [x(\tau_{p(N)}) - x_0] \rangle_{\Omega}^{x_0}. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Zum Beweis wird hier das erzeugende Funktional

$$\begin{aligned} Z[j(\tau)]_{\Omega}^{x_0} &= \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \oint \mathcal{D}x(\tau) \delta(\bar{x} - x_0) \\ &\exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}[x(\tau)] + \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau) [x(\tau) - x_0] \right\} \end{aligned} \quad (3.91)$$

mit der Wirkung (2.11) definiert, so daß die erste Zeile von (3.90) durch

$$\left[Z_{\Omega}^{x_0}[j(\tau)]^{-1} \hbar \frac{\delta}{\delta j(\tau_1)} \cdots \hbar \frac{\delta}{\delta j(\tau_N)} Z_{\Omega}^{x_0}[j(\tau)] \right]_{j(\tau)=0} \quad (3.92)$$

ausgedrückt werden kann. Im Anhang (C.25) wird gezeigt, daß (3.91) die Form [22]

$$Z[j(\tau)]_{\Omega}^{x_0} = \frac{\Omega(x_0)\hbar\beta/2}{\sinh \Omega(x_0)\hbar\beta/2} \times \exp \left\{ \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) \langle [x(\tau) - x_0][x(\tau') - x_0] \rangle_{\Omega}^{x_0} j(\tau') \right\}, \quad (3.93)$$

besitzt, woraus durch Anwendung der Produktregel für Funktionalableitungen (3.90) folgt.

Kapitel 4

Diskussion der Approximation $W_{\Omega}^N(x_0)$

Der erste Term in der Summe (2.23) ist das exakte effektive Potential des harmonischen Oszillators. Alle nachfolgenden Terme liefern Korrekturen im Hinblick auf das zu approximierende effektive Potential. Die erste Näherung des effektiven Potentials $W_{\Omega}^1(x_0)$ lautet nach (2.23)

$$W_{\Omega}^1(x_0) = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{\Omega}^{x_0} + \frac{1}{\hbar\beta} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega, c}^{x_0}. \quad (4.1)$$

Der Index c kann hier auch fallengelassen werden, weil wegen (2.19) die erste Kummulante mit dem ersten Moment übereinstimmt.

4.1 Feynman-Kleinert-Variationsansatz

Historisch wurde dieser Spezialfall der Variationsstörungstheorie durch einen Ansatz von Feynman und Kleinert gefunden [1]. Dieser Ansatz liefert eine obere Schranke für die lokale Zustandssumme, indem auch hier ein um x_0 zentrierter harmonischer Oszillator als Vergleichssystem angenommen wird

$$Z^{x_0} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \oint \mathcal{D}x(\tau) \delta(\bar{x} - x_0) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x(\tau)] \right\} \quad (4.2)$$

mit

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)] + \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}[x(\tau)], \quad (4.3)$$

wie in (2.11) und (2.12) definiert. Teilt man die Gleichung durch die lokale harmonische Zustandssumme $Z_\Omega^{x_0}$, erhält man unter Verwendung der Definition der Erwartungswerte (2.16)

$$\frac{Z^{x_0}}{Z_\Omega^{x_0}} = \left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)] \right\} \right\rangle_\Omega^{x_0}. \quad (4.4)$$

Dabei stellt der harmonische Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle \dots \rangle_\Omega^{x_0} &= \frac{1}{Z_\Omega^{x_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \\ &\times \oint \mathcal{D}x(\tau) \dots \delta(\bar{x} - x_0) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_\Omega^{x_0}[x(\tau)] \right\} \end{aligned} \quad (4.5)$$

ein Maß mit der Normierung $\langle 1 \rangle_\Omega^{x_0} = 1$ dar, das der Jensen-Peierls-Ungleichung [1, S. 233 ff.] genügt:

$$\langle e^\alpha \rangle \geq e^{\langle \alpha \rangle}. \quad (4.6)$$

Angewandt auf (4.4) heißt das

$$Z^{x_0} \geq Z_\Omega^{x_0} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)] \rangle_\Omega^{x_0} \right\} \quad (4.7)$$

und für das effektive Potential (2.8)

$$V^{\text{eff}}(x_0) \leq -\frac{1}{\beta} \ln Z_\Omega^{x_0} + \frac{1}{\hbar\beta} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)] \rangle_\Omega^{x_0}. \quad (4.8)$$

Diese obere Schranke ist offensichtlich identisch mit der ersten Näherung der Variationsstörungstheorie $W_\Omega^1(x_0)$ in (4.1).

4.2 Variationsstörungstheorie erster Ordnung

Viele der nachfolgenden Betrachtungen beruhen auf der Näherung von $W_\Omega^1(x_0)$, weshalb hier noch ein paar Definitionen getroffen werden sollen. (4.1) hat unter Verwendung der Definitionen der Wirkung in (2.12), des

Erwartungswertes (3.18) und der lokalen harmonischen Zustandssumme (3.8) die Gestalt:

$$W_{\Omega}^1(x_0) = F_{\Omega}^{x_0} - \frac{M}{2}\Omega^2(x_0)a^2 + V_{a^2}(x_0), \quad (4.9)$$

wobei die einzelnen Beiträge die folgende Bedeutung haben: Der erste Summand in (4.9) wird in Anlehnung an die thermodynamische Beziehung $F = -\frac{1}{\beta} \ln Z$ auch lokale harmonische freie Energie genannt

$$\begin{aligned} F_{\Omega}^{x_0} &:= -\frac{1}{\beta} \ln Z_{\Omega}^{x_0} \\ &= \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{\sinh(\hbar\Omega(x_0)\beta/2)}{\hbar\Omega(x_0)\beta/2} \right], \end{aligned} \quad (4.10)$$

während im zweiten Term der Erwartungswert

$$\langle (x(\tau_1) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} = a^2(x_0), \quad (4.11)$$

als Spezialfall von (3.48) für $j = j' = 1$ auftritt. Die Faltung des Potentials bekommt schließlich die Bezeichnung $V_{a^2}(x_0)$:

$$V_{a^2}(x_0) := \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi a^2(x_0)}} V(y) \exp \left\{ -\frac{(y - x_0)^2}{2a^2(x_0)} \right\}. \quad (4.12)$$

Die Extremalbedingung (2.24) wird für $N = 1$, wenn wir $W_{\Omega}^1(x_0)$ sowohl als Funktion von $\Omega(x_0)$ als auch von $a^2(x_0)$ auffassen

$$\frac{dW_{\Omega}^1(x_0)}{d\Omega(x_0)} = \frac{\partial W_{\Omega}^1(x_0)}{\partial \Omega(x_0)} + \frac{\partial W_{\Omega}^1(x_0)}{\partial a^2(x_0)} \frac{\partial a^2(x_0)}{\partial \Omega(x_0)} = 0, \quad (4.13)$$

wobei die Ableitung $\frac{\partial W_{\Omega}^1(x_0)}{\partial \Omega(x_0)}$ identisch verschwindet, was eine Konsequenz der Formel (3.16) ist. Es reicht also, zu fordern

$$\frac{\partial W_{\Omega}^1(x_0)}{\partial a^2(x_0)} = 0. \quad (4.14)$$

Setzt man (4.9) ein, so folgt

$$\Omega^2(x_0) = \frac{2}{M} \frac{\partial V_{a^2}(x_0)}{\partial a^2(x_0)}, \quad (4.15)$$

und mit der fouriertransformierten Form der Faltung von (4.12)

$$V_{a^2}(x_0) := \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{V}(k) \exp \left\{ ikx_0 - \frac{k^2 a^2(x_0)}{2} \right\} \quad (4.16)$$

läßt sich (4.15) auch darstellen durch

$$\Omega^2(x_0) = \frac{2}{M} \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} V_{a^2}(x_0). \quad (4.17)$$

Sowohl (4.15) als auch (4.17) stellen damit die Bestimmungsgleichung für $\Omega(x_0)$ in der Variationsstörungstheorie erster Ordnung dar.

4.3 Temperaturabhängigkeit der Fluktuationsbreite

Nun werden die beiden Grenzfälle hoher und tiefer Temperaturen untersucht, zwischen denen die Theorie sowohl in den Matrixelementen $a^2(x_0)$ als auch in den Näherungen der effektiven Potentiale $W_\Omega^N(x_0)$ stetig interpoliert. Deshalb wird hier die Temperatur wieder explizit in Erscheinung treten, die über Gleichung (1.8) mit β zusammenhängt. Begonnen wird mit den Diagonalelementen $a^2(x_0)$, da diese in Kapitel 3 so anschaulich interpretiert werden konnten.

4.3.1 Hochtemperaturgrenzfall (klassischer Grenzfall)

In diesem Grenzfall wird die Fluktuationsbreite $a^2(x_0)$ in (3.16):

$$\lim_{T \rightarrow \infty} a^2 = \lim_{T \rightarrow \infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{12Mk_B T} + O(1/T) \right\} = 0 \quad (4.18)$$

mit einem Ausdruck $O(1/T)$ der für große T stärker als $1/T$ gegen Null strebt. Das bedeutet, daß die reinen Quanteneffekte neben den thermischen Fluktuationen unbedeutend werden, wie schon die Formeln (3.49) und (3.50) zeigen. Es liegt also der "klassische Grenzfall" vor.

4.3.2 Tieftemperaturgrenzfall (quantenmechanischer Grenzfall)

Formuliert man $a^2(x_0)$ unter Verwendung von Exponentialausdrücken

$$a^2(x_0) = \frac{\hbar}{2M\Omega(x_0)} \left\{ \frac{\exp[\hbar\Omega(x_0)/2k_B T] + \exp[-\hbar\Omega(x_0)/2k_B T]}{\exp[\hbar\Omega(x_0)/2k_B T] - \exp[-\hbar\Omega(x_0)/2k_B T]} \right\} - \frac{k_B T}{M\Omega(x_0)^2}, \quad (4.19)$$

so folgt der Grenzwert

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} a^2(x_0) &= \lim_{T \rightarrow 0} \left\{ \frac{\hbar}{2M\Omega(x_0)} - \frac{k_B T}{M\Omega(x_0)^2} + O(T) \right\} \\ &= \frac{\hbar}{2M\Omega(x_0)} \end{aligned} \quad (4.20)$$

unmittelbar. Natürlich muß auch die Selbstkonsistenzgleichung (4.15) bzw. (4.17) zur Bestimmung von $\Omega(x_0)$ im Grenzfall $T \rightarrow 0$ gelöst werden. Die Fluktuationsbreite (4.20) rührt nur von quantenmechanischen Effekten her, da im selben Grenzübergang gemäß Formel (1.15) die klassischen Fluktuationen verschwinden. Es handelt sich also um den "quantenmechanischen Grenzfall". Das Verhalten von $a^2(x_0)$ im gesamten Temperaturbereich wird in Abbildung 4.1 zusammengefaßt.

4.4 Temperaturabhängigkeit der Approximationen des effektiven Potentials

$$W_{\Omega}^N(x_0)$$

Die Temperaturgrenzwertbetrachtung gibt die Möglichkeit zur Bewertung der Güte der Theorie. Es zeigt sich, daß für den Hochtemperaturgrenzfall jede Approximation des effektiven Potentials (2.23) gegen dessen exakten klassischen Wert (2.8) strebt. Ist das Potential des zu Approximierenden Systems hinreichend glatt, so strebt auch das quantenmechanische effektive Potential gegen das exakte klassische Potential [1, S. 122 ff.], so daß jede Approximation der Zustandssumme exakt wird.

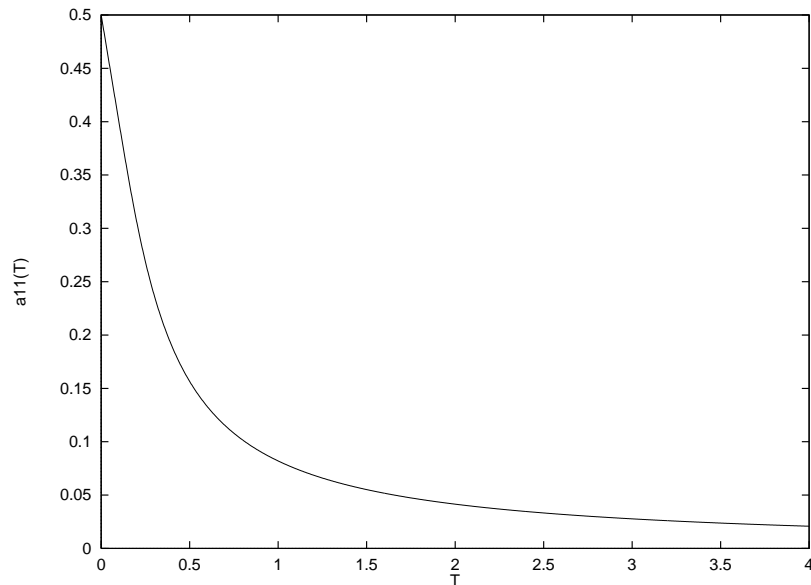


Abbildung 4.1: Die Temperaturabhängigkeit der Fluktuationsbreite (3.16) für festes $\Omega(x_0) \equiv 1$. Die Masse beträgt $M = 1$, und es wurden natürliche Einheiten verwandt. Gut zu erkennen sind die durch (4.18) und (4.20) beschriebenen Temperaturabhängigkeiten proportional zu $-T$ für kleine Temperaturen, bzw. proportional zu $1/T$ für große Temperaturen.

Diese Voraussetzungen sind für das im Ursprung singuläre Coulomb-Potential jedoch nicht gegeben. Im Tieftemperaturgrenzfall trägt die N -te Approximation des effektiven Potentials (2.23) nur in den Minima der Sattelpunktsapproximation bei und gewinnt dort die Bedeutung der N -ten Approximation Grundzustandsenergie (vgl. 4.4.3). Für intermediäre Temperaturwerte vermittelt die Theorie stetig.

4.4.1 Hochtemperaturgrenzfall

Um die Approximation des effektiven Potentials $W_{\Omega}^N(x_0)$ zu untersuchen, soll in einem ersten Schritt die Näherung $W_{\Omega}^1(x_0)$ wie in (4.9) betrachtet

werden. Aus (4.10) wird im Grenzübergang

$$\begin{aligned} & \lim_{T \rightarrow \infty} \left\{ k_B T \ln \left[\frac{\sinh [\hbar \Omega(x_0)/2k_B T]}{\hbar \Omega(x_0)/2k_B T} \right] \right\} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \left\{ k_B T \ln \left[1 + \frac{1}{6} \left(\frac{\hbar \Omega}{2k_B T} \right)^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Die Regel von l'Hôpital zeigt, daß (4.21) verschwindet. Der zweite Term in (4.9) trägt wegen (4.18) ebenfalls nichts zur Approximation des effektiven Potentials bei. Die Faltung (4.12) schließlich wird nach der Variablensubstitution $u := y/\sqrt{a^2(x_0)}$ wegen (4.18)

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{\sqrt{2\pi}} V(u\sqrt{a^2(x_0)} + x_0) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) = V(x_0), \quad (4.22)$$

so daß gilt

$$\lim_{T \rightarrow \infty} W_\Omega^1(x_0) = V(x_0). \quad (4.23)$$

Schon die erste Näherung liefert also das exakte klassische Potential, wie der Vergleich mit (1.9) zeigt. Das legt die Vermutung nahe, daß die höheren Terme der Entwicklung (2.23)

$$\frac{(-1)^{n+1} k_B T}{n! \hbar^n} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau_1)] \dots \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau_n)] \rangle_{\Omega, c}^{x_0}, \quad (4.24)$$

mit $n = 2, \dots, N$ im Grenzübergang hoher Temperaturen verschwinden, denn die Annahme ist, daß die Variationsstörungstheorie konvergiert: Die erste Ordnung (4.23) ist für den Hochtemperaturgrenzfall unabhängig vom Variationsparameter, so daß diese Approximation für jedes $\Omega(x_0)$ die beste ist. Nichtverschwindende höhere Korrekturen würden die Näherung jedoch im Widerspruch zur Konvergenzannahme verschlechtern. Das Verschwinden der Korrekturterme (4.24) soll auch formal begründet werden. Sie beinhalten nach (2.22) N Zeitintegrationen, die unter der Annahme eines beschränkten Intgranden abgeschätzt werden können durch

$$\begin{aligned} & \frac{(-1)^{n+1} k_B T}{n! \hbar^n} \int_0^{\frac{\hbar}{k_B T}} d\tau_1 \dots \int_0^{\frac{\hbar}{k_B T}} d\tau_N \langle V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_1)) \dots V_{\text{int}}^{x_0}(x(\tau_N)) \rangle_{\Omega, c}^{x_0} \\ & \leq \frac{C}{T^{n-1}}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Es folgt hieraus, daß die Korrekturterme (4.24) im betrachteten Grenzfall keinen Beitrag zum Potential $W_\Omega^N(x_0)$ leisten. Betrachten wir noch die Bestimmungsgleichung (4.17) für die optimale Frequenz $\Omega(x_0)$ in diesem Grenzfall. Sie wird einfach zu

$$\Omega^2(x_0) = \frac{2}{M} \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} V(x_0), \quad (4.26)$$

d.h. man erhält einen endlichen Wert für $\Omega(x_0)$.

4.4.2 Tieftemperaturgrenzfall

Für die allgemeinen Matrixelemente $a_{\tau_j \tau_{j'}}(x_0)$ in (3.29) gilt bei tiefen Temperaturen:

$$\lim_{T \rightarrow 0} a_{\tau_j \tau_{j'}} = \frac{\hbar}{2M\Omega(x_0)} \exp \{ -\Omega(x_0) |\tau_1 - \tau_2| \}. \quad (4.27)$$

Nun berechnen wir $W_\Omega^1(x_0)$ in diesem Grenzfall. Für die lokale harmonische freie Energie $F_\Omega^{x_0}$ gilt

$$F_\Omega^{x_0} = k_B T \ln \left[\frac{2k_B T}{\hbar \Omega(x_0)} \right] + k_B T \ln \left\{ \sinh \left[\frac{\hbar \Omega(x_0)}{2k_B T} \right] \right\}, \quad (4.28)$$

und mit der Regel von l'Hôpital

$$\lim_{T \rightarrow 0} F_\Omega^{x_0} = \hbar \Omega(x_0) / 2. \quad (4.29)$$

Es folgt dann unter Verwendung von (4.20) für (4.9)

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_\Omega^1(x_0) = \frac{1}{4} \hbar \Omega(x_0) + V_{a^2}(x_0). \quad (4.30)$$

Die zu lösende Bestimmungsgleichung für $\Omega(x_0)$, gegeben durch (4.17), nimmt in dieser allgemeinen Betrachtung keine vereinfachte Form an. Die höheren Korrekturen in $W_\Omega^N(x_0)$ sind entsprechend mit (4.27) auszuwerten.

4.4.3 Zusammenhang zwischen dem effektiven Potential und der Grundzustandsenergie bei $T = 0$

Im Tieftemperaturgrenzfall läßt sich mit Hilfe der Sattelpunktsapproximation ein fundamentaler Zusammenhang zwischen der N -ten Approximation des effektiven Potentials $W_\Omega^N(x_0)$ und der dazugehörigen Grundzustandsenergie E_N des Systems herstellen, falls $W_\Omega^N(x_0)$ ein lokales Minimum im Punkte x_{\min} besitzt. Der Zusammenhang lautet

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_\Omega^N(x_{\min}) = E_N . \quad (4.31)$$

Zum Beweis von (4.31) geht man von der N -ten Approximation der Zustandssumme in (2.9) aus:

$$Z_N = \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \exp \left\{ -\beta W_\Omega^N(x_0) \right\} . \quad (4.32)$$

Der Exponent im Integranden wird nach Potenzen von $\delta x := x_0 - x_{\min}$ entwickelt, was auf

$$Z_N = \exp \left\{ -\beta W_\Omega^N(x_{\min}) \right\} \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \exp \left\{ -\beta (W_\Omega^N)'(x_{\min})\delta x - \beta (W_\Omega^N)''(x_{\min})\frac{\delta x^2}{2!} - \beta (W_\Omega^N)'''(x_{\min})\frac{\delta x^3}{3!} - \dots \right\} \quad (4.33)$$

führt. Im Minimum von $W_\Omega^N(x_0)$, also im Punkte x_{\min} , verschwindet die erste Ableitung

$$(W_\Omega^N)'(x_{\min}) = 0 , \quad (4.34)$$

während die zweite Ableitung

$$(W_\Omega^N)''(x_{\min}) > 0 \quad (4.35)$$

positiv ist. Die Approximation der freien Energie ist durch

$$F_N = -\frac{1}{\beta} \ln Z_N \quad (4.36)$$

gegeben. Sie wird mit (4.33) und der Substitution $u := \sqrt{\beta}\delta x$

$$F_N = W_\Omega^N(x_{\min}) - \frac{1}{\beta} \ln \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta}} - \frac{1}{\beta} \ln \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} du \exp \left[-(W_\Omega^N)''(x_{\min}) \frac{u^2}{2!} - \frac{1}{\beta} (W_\Omega^N)'''(x_{\min}) \frac{u^3}{3!} - \dots \right] \right\}. \quad (4.37)$$

Für den obigen Grenzfall repräsentiert sie jedoch die Grundzustandsenergie des Systems:

$$\lim_{T \rightarrow 0} F_N = E_N. \quad (4.38)$$

Unter der Annahme, daß in diesem Grenzübergang $W_N(x_{\min})$ und alle Ableitungen $W_N^{(k)}(x_{\min})$ mit $k = 2, 3, \dots$ beschränkt bleiben, folgt für $T \rightarrow 0$, bzw. nach (1.8) im Grenzfall $\beta \rightarrow \infty$, die Formel (4.31).

Um die Voraussetzung der Existenz eines lokalen Minimums von $W_N(x_0)$ zu illustrieren, legen wir ein gerades Potential $V(x) = V(-x)$ vor. Die Betrachtung der harmonischen Erwartungswerte in (3.64) zeigt, daß in ihren Argumenten gerade Funktionen $F_j(y_j)$ mit $j = 1, \dots, N$ auf in den Variablen x_0 gerade Erwartungswerte führen. Man überzeugt sich davon, indem man in jeder Integrationsvariablen von (3.64) eine Variablensubstitution durchführt, gemäß $\tilde{y}_j = -y_j$. Beachtet man darüber hinaus die Definition von $\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)]$ in (2.12), so folgt, daß die höheren Korrekturen von $W_\Omega^1(x_0)$ in (2.23) gerade im Argument x_0 sind, falls $V(x)$ gerade in x ist. Wird $\Omega(x_0)$ gerade gewählt, werden damit die selbstkonsistent zu lösenden Bedingungen (2.24) bzw. (2.25) erfüllt, so daß schließlich auch $W_\Omega^N(x_0)$ eine gerade Funktion in x_0 ist. Dann aber verschwinden die erste und alle höheren ungeraden Ableitungen in der Entwicklung (4.33), was ein Extremum sicherstellt. Ob es sich dabei um ein Minimum handelt, muß die Untersuchung im Einzelfall klären.

Was aber bedeutet Formel (4.31)? Es soll noch einmal betont werden, daß die Approximation eines Potentials $V(x)$ durch (2.23) mit einer ganzen Schar von harmonischen Oszillatoren erfolgt. Für Potentiale deren N -te Approximation $W_\Omega^N(x_0)$ ein Minimum besitzt, wird im Grenzfall tiefer Temperaturen dagegen nur ein einziger Oszillator benutzt, nämlich der mit $x_0 = x_{\min}$, denn die Integration über das Pfadmittel x_0 fällt laut

(4.31) einfach weg. Das bedeutet, daß die in der Zustandssummenformulierung gewährte Freiheit, $\Omega(x_0)$ als von x_0 abhängig zu betrachten, für tiefe Temperaturen nicht genutzt wird und eine alternative Formulierung der Variationsstörungstheorie mit von vornherein als konstant angenommenem Ω dasselbe Ergebnis liefern muß.

In der Tat wird in [1, s. 177 ff.] allgemein bestätigt, daß die Variationsstörungstheorie für die Energieeigenwerte und die Variationsstörungstheorie für die quantenmechanischen Zustandssumme für ein konstantes Vergleichspotential $M\omega^2 x^2/2$ in der jeweils N -ten Approximation des Grundzustandes übereinstimmen. Diese Eigenschaft wird in den Kapiteln 7 und 8 am Beispiel des Coulombsystems überprüft. Dieses ist möglich, da die ersten beiden Approximationen des effektiven Potentials vom Coulombsystem $W_\Omega^N(x_0)$ mit $N = 1, 2$ tatsächlich ein Minimum bei $x_0 = 0$ besitzen.

Im nächsten Kapitel entwickeln wir deshalb die Grundlagen der Variationsstörungstheorie zur Approximation der Energieeigenwerte.

Kapitel 5

Variationsstörungstheorie für die Energieeigenwerte

Die Variationsstörungstheorie für die Energieeigenwerte ist eine Weiterentwicklung der zeitunabhängigen Störungstheorie für die Energieeigenwerte, weshalb diese im ersten Schritt vorgestellt wird.

5.1 Störungstheorie für die Energieeigenwerte

Der Hamilton-Operator des zu untersuchenden \hat{H} Systems sei nicht explizit zeitabhängig, d.h. $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ und es gelte, die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (1.4) zu lösen. In den vielen Fällen, da dieses nicht analytisch exakt möglich ist, kann dazu ein Näherungsverfahren konstruiert werden. Man betrachtet die Zerlegung des Hamiltonoperators

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \epsilon \hat{V} \quad (5.1)$$

in einen Teil \hat{H}_0 zu dem die Lösungen der Schrödinger-Gleichung bekannt sind, und eine Störung

$$\epsilon \hat{V} := \hat{H} - \hat{H}_0. \quad (5.2)$$

Die Energieeigenwerte von \hat{H}_0 folgen aus der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}_0 |\psi_m^{(0)}\rangle = E_m^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (5.3)$$

und seien nicht entartet. Weiterhin seien die Eigenzustände orthonormiert:

$$\langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle = \delta_{n,m}. \quad (5.4)$$

Zu lösen ist die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung des Systems

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle. \quad (5.5)$$

Es wird angenommen, daß sowohl die Energieeigenwerte E_n als auch die Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ stetig aus den ungestörten Lösungen $E_n^{(0)}$ und $|\psi_n^{(0)}\rangle$ hervorgehen. Insbesondere sollen sie im Kleinheitsparameter ϵ in eine Potenzreihe entwickelbar sein:

$$E_n = E_n^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} + \epsilon^2 E_n^{(2)} + \dots, \quad (5.6)$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \epsilon |\psi_n^{(1)}\rangle + \epsilon^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots. \quad (5.7)$$

Setzt man die Entwicklungen (5.6) und (5.7) in die Eigenwertgleichung (5.5) ein, so ergibt sich auf beiden Seiten des Gleichheitszeichens eine Potenzreihe in ϵ :

$$\begin{aligned} & \hat{H}_0|\psi_n^{(0)}\rangle + \epsilon \{ \hat{V}|\psi_n^{(0)}\rangle + \hat{H}_0|\psi_n^{(1)}\rangle \} + \epsilon^2 \{ \hat{V}|\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{H}_0|\psi_n^{(2)}\rangle \} \\ & + \epsilon^3 \{ \hat{V}|\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{H}_0|\psi_n^{(3)}\rangle \} + \dots = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle \\ & + \epsilon \{ E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle \} + \epsilon^2 \{ E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle \} \\ & + \epsilon^3 \{ E_n^{(3)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(0)}|\psi_n^{(3)}\rangle \} + \dots. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Wird ϵ als klein angenommen, müssen sukzessive die Faktoren in jeder Potenz von ϵ gleichgesetzt werden. Die Forderung, die durch die nullte Ordnung entsteht, ist nach (5.3) von vornherein erfüllt. Die Forderungen durch höhere Potenzen lauten bis zur dritten Ordnung

$$\begin{aligned} \epsilon^1 : & \quad \hat{V}|\psi_n^{(0)}\rangle + \hat{H}_0|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle, \\ \epsilon^2 : & \quad \hat{V}|\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{H}_0|\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle, \\ \epsilon^3 : & \quad \hat{V}|\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{H}_0|\psi_n^{(3)}\rangle = E_n^{(3)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(0)}|\psi_n^{(3)}\rangle. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Darüber hinaus sollen die Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ orthonormiert sein

$$\delta_{n,m} = \langle \psi_n | \psi_m \rangle, \quad (5.10)$$

so daß unter Verwendung des Ansatzes (5.7) folgt:

$$\begin{aligned} \delta_{n,m} &= \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle + \epsilon \left\{ \langle \psi_n^{(1)} | \psi_m^{(0)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(1)} \rangle \right\} \\ &+ \epsilon^2 \left\{ \langle \psi_n^{(2)} | \psi_m^{(0)} \rangle + \langle \psi_n^{(1)} | \psi_m^{(1)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(2)} \rangle \right\} + \epsilon^3 \left\{ \langle \psi_n^{(3)} | \psi_m^{(0)} \rangle \right. \\ &\left. + \langle \psi_n^{(2)} | \psi_m^{(1)} \rangle + \langle \psi_n^{(1)} | \psi_m^{(2)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(3)} \rangle \right\} + \dots \end{aligned} \quad (5.11)$$

Der Koeffizientenvergleich in Potenzen von ϵ , liefert für die nullte Potenz eine Bedingung, die gemäß (5.4) erfüllt ist. Das Nullsetzen der höheren Potenzen liefert bis zur dritten Ordnung

$$\begin{aligned} \epsilon^1 : \quad & \langle \psi_n^{(1)} | \psi_m^{(0)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(1)} \rangle = 0, \\ \epsilon^2 : \quad & \langle \psi_n^{(2)} | \psi_m^{(0)} \rangle + \langle \psi_n^{(1)} | \psi_m^{(1)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(2)} \rangle = 0, \\ \epsilon^3 : \quad & \langle \psi_n^{(3)} | \psi_m^{(0)} \rangle + \langle \psi_n^{(2)} | \psi_m^{(1)} \rangle + \langle \psi_n^{(1)} | \psi_m^{(2)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(3)} \rangle = 0. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Um alle Freiheiten auszunutzen, wird noch gefordert, daß für alle natürlichen Zahlen i und j gelten soll

$$\langle \psi_n^{(i)} | \psi_m^{(j)} \rangle = \langle \psi_n^{(j)} | \psi_m^{(i)} \rangle. \quad (5.13)$$

Jeder Zustand $|\psi_k^{(i)}\rangle$ mit natürlichen Zahlen i wird nach dem vollständigen Satz von Eigenzuständen von \hat{H}_0 entwickelt:

$$|\psi_n^{(i)}\rangle = \sum_m c_{n,m}^{(i)} |\psi_m^{(0)}\rangle. \quad (5.14)$$

Im folgenden sind die Entwicklungskoeffizienten $c_{n,m}^{(i)}$ für jede Ordnung aus den Bedingungen (5.9), (5.12) und (5.13) zu bestimmen.

Störungstheorie erster Ordnung

Setzt man (5.14) mit $i = 1$ in die erste Zeilen von (5.9) ein und multipliziert mit dem Bra-Vektor $\langle \psi_k^{(0)} |$, so folgt unter Verwendung der Orthonormalität der ungestörten Zustände (5.4) und der Schrödinger-Gleichung (5.3) die Beziehung

$$[E_n^{(0)} - E_k^{(0)}]c_{n,k}^{(1)} = \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(1)} \rangle - E_n^{(1)}\delta_{n,k}. \quad (5.15)$$

Daraus ergeben sich für $n = k$ die Energiekorrektur

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle \quad (5.16)$$

und für $n \neq k$ die Entwicklungskoeffizienten

$$c_{n,k}^{(1)} = \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (5.17)$$

Aus (5.14) und (5.17) folgt damit

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = c_{n,n}^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle. \quad (5.18)$$

Multipliziert man (5.18) schließlich mit dem Bra-Vektor $\langle \psi_n^{(0)} |$, so legt dies unter Beachtung der ersten Zeile von (5.12), der Forderung (5.13) und der Orthonormalität der ungestörten Zustände den verbleibenden Entwicklungskoeffizienten fest:

$$c_{n,n}^{(1)} = 0. \quad (5.19)$$

Störungstheorie zweiter Ordnung

Hier setzt man (5.14) mit $i = 2$ in die zweiten Zeile von (5.9) ein und erhält nach Multiplikation mit dem Bra-Vektor $\langle \psi_k^{(0)} |$ zunächst

$$[E_n^{(0)} - E_k^{(0)}] c_{n,k}^{(2)} = \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(1)} \rangle - E_n^{(1)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle - E_n^{(2)} \delta_{n,k}. \quad (5.20)$$

Hieraus folgt für $n = k$ unter Beachtung von (5.18) und (5.19) die Energiekorrektur

$$E_n^{(2)} = - \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}. \quad (5.21)$$

Im Falle $n \neq k$ ergeben sich wieder unter Beachtung der Ergebnisse aus (5.18) und (5.19) die Entwicklungskoeffizienten

$$c_{n,k}^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle \langle \psi_m^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle}{[E_n^{(0)} - E_k^{(0)}][E_n^{(0)} - E_m^{(0)}]} - \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_k^{(0)} \rangle \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle}{[E_n^{(0)} - E_k^{(0)}]^2}. \quad (5.22)$$

Die zweite Zustandskorrektur wird demzufolge nach (5.14) und (5.22)

$$\begin{aligned} |\psi_n^{(2)}\rangle &= c_{n,n}^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle \langle \psi_m^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle}{[E_n^{(0)} - E_k^{(0)}][E_n^{(0)} - E_m^{(0)}]} |\psi_k^{(0)}\rangle \\ &\quad - \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_k^{(0)} \rangle \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle}{[E_n^{(0)} - E_k^{(0)}]^2} |\psi_k^{(0)}\rangle. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Multiplikation mit dem Bra-Vektor $\langle \psi_n^{(0)} |$ und Berücksichtigung der zweiten Zeile von (5.12), der Forderung (5.13), der Orthonormalität der ungestörten Zustände (5.4) und der Ergebnisse aus (5.18) und (5.19) liefern schließlich den Entwicklungskoeffizienten

$$c_{n,n}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_k^{(0)} \rangle|^2}{[E_n^{(0)} - E_k^{(0)}]^2}. \quad (5.24)$$

Störungstheorie dritter Ordnung

Die explizite Berechnung der Energiekorrekturen soll schließlich bis zur dritten Ordnung vorgenommen werden, da auf dieses Ergebnis in Kapitel 8 Bezug genommen wird. Wir setzen dazu (5.14) mit $i = 3$ in die dritte Zeile von (5.9) ein und erhalten nach Multiplikation mit dem Bra-Vektor $\langle \psi_k^{(0)} |$ die Bestimmungsgleichung

$$\begin{aligned} [E_n^{(0)} - E_k^{(0)}]c_{n,k}^{(3)} &= \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(2)} \rangle - E_n^{(1)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle \\ &\quad - E_n^{(2)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle - E_n^{(3)} \delta_{n,k}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Im Falle $n = k$ verschwindet der vorletzte Term von (5.25) wegen (5.18) und (5.19), und es folgt unter Beachtung der Darstellungen von $|\psi_n^{(1)}\rangle$ und $|\psi_n^{(2)}\rangle$ durch (5.18), (5.19), (5.23) und (5.24) die Energiekorrektur

$$\begin{aligned} E_n^{(3)} &= \sum_{m \neq n} \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_k^{(0)} \rangle \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle \langle \psi_m^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle}{[E_k^{(0)} - E_n^{(0)}][E_m^{(0)} - E_n^{(0)}]} \\ &\quad - \sum_{k \neq n} \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle \frac{|\langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_k^{(0)} \rangle|^2}{[E_k^{(0)} - E_n^{(0)}]^2}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

5.2 Variationsstörungstheorie für die Energieeigenwerte

Die Variationsstörungstheorie für die Energieeigenwerte unterscheidet sich von der zeitunabhängigen Störungstheorie dadurch, daß ein *parameterabhängiges* Vergleichssystem $\hat{H}_0(\Omega)$ gewählt wird. Die einfachste nicht-triviale Näherung eines bezüglich Spiegelung an x_0 geraden Potentials

$V(x)$, daß dort verschwindet, wird durch seine Taylorentwicklung bis zur zweiten Ordnung gegeben:

$$V(x) \approx \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} V(x) \right]_{x=x_0} \frac{(x-x_0)^2}{2!}. \quad (5.27)$$

Dieses Vergleichspotential entspricht einem Oszillatorpotential mit der Ruhelage x_0 und der Frequenz

$$\Omega^2 = \sqrt{\frac{2}{M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} V(x) \Big|_{x=x_0}}. \quad (5.28)$$

Dieser Idee folgend schreibt man den Standard-Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (5.29)$$

eines quantenmechanischen Systems um in

$$\hat{H} = \hat{H}_\Omega + \epsilon V_{\text{int}} \quad (5.30)$$

mit

$$\hat{H}_\Omega := \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{M}{2} \Omega^2 (x-x_0)^2, \quad \epsilon V_{\text{int}} := V(x) - \frac{M}{2} \Omega^2 (x-x_0)^2. \quad (5.31)$$

Die Störungstheorie an den Energieeigenwerten, angewandt auf (5.30), liefert analog zum vorangegangenen Kapitel Ω -abhängige Partialsummen N -ter Ordnung der Reihe (5.6) zur Approximation der Energieeigenwerte. Man nimmt auch hier wie im Falle der Variationsstörungstheorie für die quantenmechanischen Zustandssumme an, daß bei einer geeigneten Wahl des Parameters Ω eine in allen Kopplungsstärken ϵ konvergente Partialsummenfolge

$$E_k^N(\Omega) = \sum_{n=1}^N \epsilon^n E_k^{(n)}(\Omega) \quad (5.32)$$

entsteht. Man geht weiter davon aus, daß die Vorschrift zur Bestimmung von Ω , die am Ende von Kapitel 2 erklärt wurde, bei allen physikalischen Potentialen erhalten bleibt, so daß die Variationsstörungstheorie für die Energieeigenwerte eine universell konvergente Theorie darstellt. Um die Richtigkeit dieser beiden Annahmen beispielhaft zu untersuchen, wird im Kapitel 8 die aus dieser Theorie folgende Reihenentwicklung der Grundzustandsenergie des Coulomb-Problems bis zur dritten Ordnung berechnet.

Kapitel 6

Erstes Beispiel: Der anharmonische Oszillator

Die im Kapitel 2 entwickelte Theorie wird nun unter Verwendung der Verschmierungsformel (3.64) aus Kapitel 3 angewandt, um das effektive Potential des anharmonischen Oszillatorpotentials

$$V(x) = \frac{M}{2}\omega^2 x^2 + \frac{g}{4}x^4 \quad (6.1)$$

bis zur zweiten Ordnung zu berechnen. Es werden dabei die Ergebnisse von H. Meyer reproduziert [10].

6.1 Approximation erster Ordnung

Die Approximation erster Ordnung ist durch (4.9) gegeben. Es ist nur noch der Erwartungswert $\langle V(x(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{x_0} = V_{a^2}(x_0)$ zu berechnen. Nach den vorbereitenden Rechnungen in Kapitel 4 lassen sich Erwartungswerte ganzzahliger Potenzen von $[x(\tau_1) - x_0]$ besonders leicht auswerten. Deshalb wird das Potential (6.1) in ein Polynom dieser Differenzen entwickelt:

$$\begin{aligned} V(x(\tau_1)) &= V(x_0) + (gx_0^3 + M\omega^2 x_0)[x(\tau_1) - x_0] \\ &+ \left(\frac{M}{2}\omega^2 + \frac{3}{2}gx_0^2\right)[x(\tau_1) - x_0]^2 + gx_0[x(\tau_1) - x_0]^3 + \frac{g}{4}[x(\tau_1) - x_0]^4. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Die Erwartungswerte solcher Potenzen sind bereits in Kapitel 4.4 berechnet worden. Damit folgt für die erste Näherung des effektiven Potentials

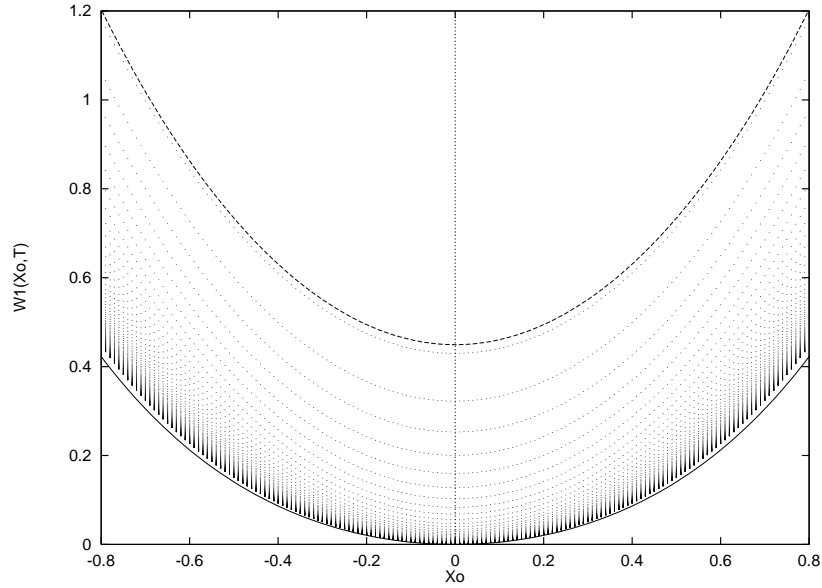


Abbildung 6.1: Die erste Approximation $W_{\Omega}^1(x_0)$ des effektiven Potentials $V^{\text{eff}}(x_0)$ für den quantenmechanischen anharmonischen Oszillator (6.1) mit $M = \omega = g = 1$. Ferner wurden die natürliche Einheiten $\hbar = k_B = 1$ verwandt. Die oberste Kurve gilt für $T = 0$, die unterste für $T = \infty$. Dazwischen liegen Kurven endlicher Temperaturen, wobei die Differenzen äquidistant gewählt sind. Der endliche Wert von $W_{\Omega}^1(x_0)$ bei $T = 0$ approximiert die Nullpunktenergie des quantenmechanischen anharmonischen Oszillators.

in (4.9)

$$W_{\Omega}^1(x_0) = \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{\sinh(\hbar\Omega(x_0)\beta/2)}{\hbar\Omega(x_0)\beta/2} \right) - \frac{M}{2}\Omega^2 a^2(x_0) + V(x_0) + \left(\frac{M}{2}\omega^2 + \frac{3}{2}gx_0^2 \right) a^2(x_0) + \frac{3}{4}ga^4(x_0). \quad (6.3)$$

Die Bestimmungsgleichung (4.15) für die optimale Frequenz $\Omega(x_0)$ lautet

$$\Omega^2(x_0) = \frac{M}{2}\omega^2 + \frac{3}{2}gx_0^2 + \frac{3}{2}ga^2(x_0). \quad (6.4)$$

(6.3) ist in Abbildung 6.1 für verschiedene Temperaturen über x_0 aufgetragen. Man erkennt deutlich das monotone Verhalten mit der Tem-

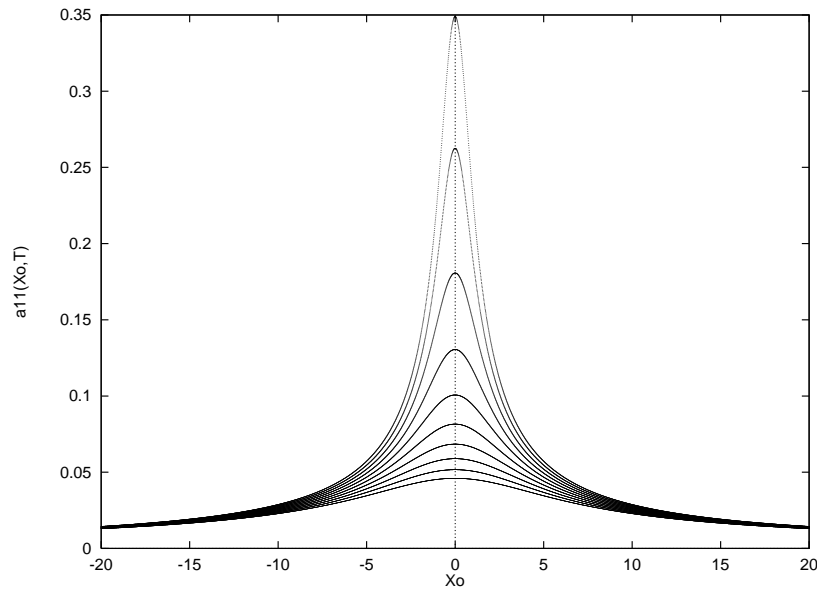


Abbildung 6.2: Hier ist die Abhängigkeit der Fluktuationsbreite $a^2(x_0)$ von der Koordinate x_0 für verschiedene Temperaturen und mit aus (6.4) bestimmtem $\Omega(x_0)$ dargestellt. Es wurden wiederum natürliche Einheiten $\hbar = k_B = 1$ und $M = g = \omega = 1$ verwandt. Die oberste Kurve entspricht der Temperatur $T = 0.001K^*$, mit jeder weiteren steigt die Temperatur um $0.2K^*$. Die zu den SI-Einheiten korrespondierenden natürlichen Einheiten werden durch Sterne gekennzeichnet (vgl. zur Umrechnung Anhang E).

peratur, wobei für $T = \infty$ die Approximation exakt ist, wie schon in Gleichung (4.23) diskutiert. Das monotone Verhalten war zu erwarten, da die Fluktuationsbreite $a^2(x_0)$ einen mit der Temperatur T ebenfalls monotonen Abfall zeigt, wie in Abbildung (6.2) zu sehen ist. Zum Vergleich mit der Abbildung 4.1 für festes Ω , ist $a^2(x_0)$ in Abbildung 6.3 für verschiedene x_0 über der Temperatur aufgetragen.

6.2 Approximation zweiter Ordnung

Es wird nun die nächsthöhere Korrektur im effektiven Potential (2.22), also

$$-\frac{1}{2\hbar^2\beta}\langle\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau_1)]\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau_2)]\rangle_{\Omega,c}^{x_0} = -\frac{1}{2\hbar^2\beta}\langle\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau_1)]\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau_2)]\rangle_{\Omega}^{x_0} + \frac{1}{2\hbar^2\beta}\{\langle\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau_1)]\rangle_{\Omega}^{x_0}\}^2 \quad (6.5)$$

berücksichtigt. Die dabei auftretende Wirkung (2.12) hat mit (6.1) die Gestalt

$$\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2}\omega^2 x(\tau)^2 + \frac{g}{4}x(\tau)^4 - \frac{M}{2}\Omega^2(x_0)[x(\tau) - x_0]^2 \right\}. \quad (6.6)$$

Zur weiteren Auswertung wird das Argument der Wirkung wieder in Potenzen von $[x(\tau) - x_0]$ entwickelt, was auf

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}[x(\tau)] = & \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ V(x_0) + (gx_0^3 + M\omega^2 x_0)[x(\tau) - x_0] \right. \\ & + \left[\frac{M}{2}[\omega^2 - \Omega^2(x_0)] + \frac{3}{2}gx_0^2 \right] [x(\tau) - x_0]^2 \\ & \left. + gx_0[x(\tau) - x_0]^3 + \frac{g}{4}[x(\tau) - x_0]^4 \right\} \end{aligned} \quad (6.7)$$

führt. Somit kann die Korrektur (6.5) durch Erwartungswerte vom Typ

$$\langle [x(\tau_1) - x_0]^n [x(\tau_2) - x_0]^m \rangle_{\Omega}^{x_0} \quad (6.8)$$

mit ganzen Zahlen $n, m = 1, 2, 3, 4$ ausgedrückt werden. Jedes der Integrale (6.8) läßt sich dabei auf eine Summe von Produkten der sogenannten Zweipunktkorrelationen $\langle (x(\tau_1) - x_0)(x(\tau_2) - x_0) \rangle_{\Omega}^{x_0}$ zurückführen, wie im Kapitel 3 explizit gezeigt wurde. Dieser Sachverhalt wurde dort auch allgemein mit dem aus der Feldtheorie bekannten Wick-Theorem gezeigt. Insgesamt lautet damit die zweite Approximation des effektiven Potentials unter Verwendung der Erwartungswerte aus dem Kapitel 3

$$W_{\Omega}^2(x_0) = \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{\sinh(\hbar\Omega(x_0)\beta/2)}{\hbar\Omega(x_0)\beta/2} \right) + V(x_0) \quad (6.9)$$

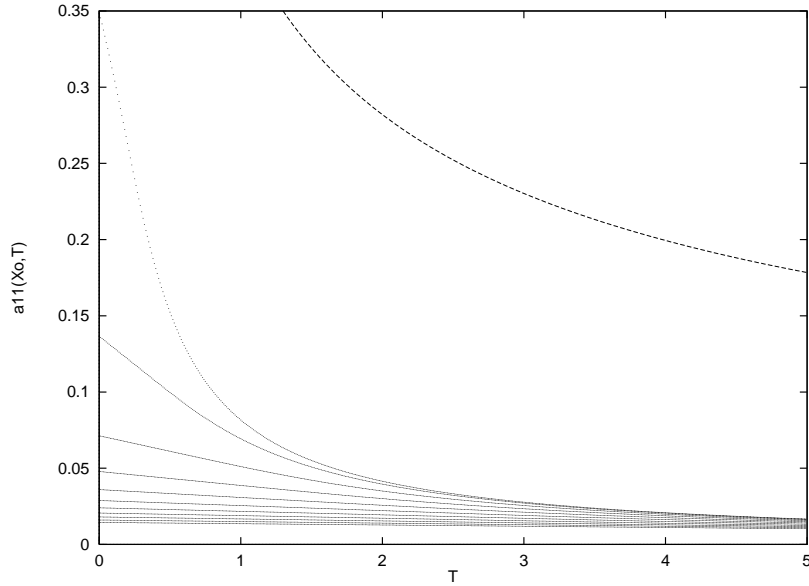


Abbildung 6.3: Die Fluktuationsbreite über der Temperatur T für verschiedene Werte von x_0 unter Verwendung von (6.4) zur Bestimmung von $\Omega(x_0)$: Für die oberste gepunktete Kurve gilt $x_0 = 0$. Mit jeder darunterliegenden steigt x_0 um $2m^*$. Man beachte zum Vergleich Abb. 4.1 die die Fluktuationsbreite für festes Ω wiedergibt. Die gestrichelte Kurve entspricht der thermischen Wellenlänge $\lambda = 1/\sqrt{2\pi T}$, die für alle x_0 und alle Temperaturen T über der Fluktuationsbreite $a^2(x_0)$ liegt [21]. Es sind wieder natürliche Einheiten verwandt worden.

$$\begin{aligned}
& + \left[\frac{g_2(x_0)}{2} a^2 + \frac{g_4(x_0)}{8} a^4 \right] \\
& + \frac{1}{2\hbar\Omega(x_0)} \left[\frac{g_2^2(x_0)}{2} a^4 + \frac{g_2(x_0)g_4}{2} a_2^4 a^2 + \frac{g_3^2(x_0)}{6} a_2^6 + \frac{g_4^2}{24} a_2^8 + \frac{g_4^2}{8} a_2^4 a^4 \right],
\end{aligned}$$

wobei die Zeitintegrationen in den Abkürzungen a_2^{2m} enthalten sind:

$$a_2^{2m} := \frac{\Omega(x_0)}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 (\langle [x(\tau_1) - x_0][x(\tau_2) - x_0] \rangle_{\Omega}^{x_0})^m. \quad (6.10)$$

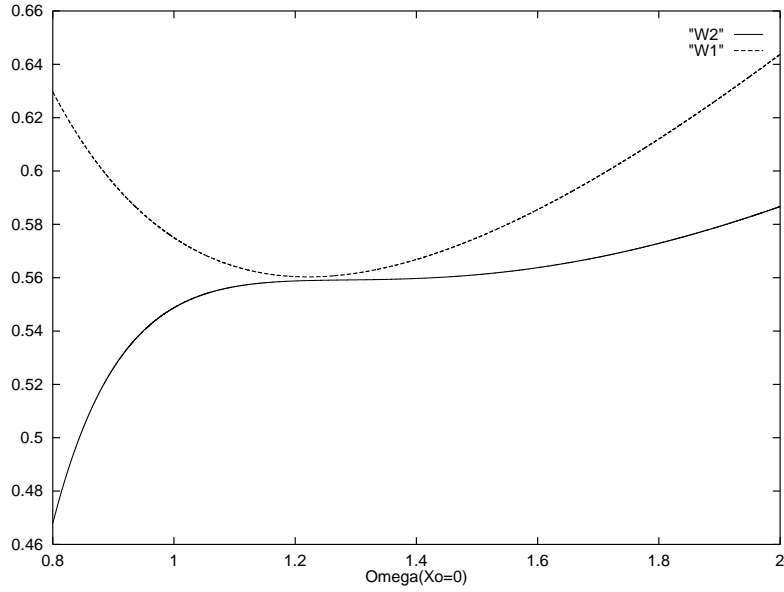


Abbildung 6.4: Die Ω -Abhängigkeit der Approximation des effektiven Potentials $W_{\Omega}^N(x_0)$ für $N = 1, 2$, bei $M = \omega = 1$, $T = x_0 = 0$ und $g = 0.4$. Die erste Näherung besitzt ein Minimum, während die zweite Näherung über einen Wendepunkt verfügt. Auch hier wurden natürliche Einheiten verwandt.

Die Ergebnisse sind im einzelnen im Anhang D aufgeführt. Die Einpunkt- oder Selbstkorrelation $a^2(x_0)$ bekommt die Bezeichnung

$$a^2 := \langle [x(\tau) - x_0][x(\tau) - x_0] \rangle_{\Omega}^{x_0}. \quad (6.11)$$

Die Abkürzungen $g_j(x_0)$ in (6.9) schließlich bedeuten

$$\begin{aligned} g_2(x_0) &:= M[\omega^2 - \Omega^2(x_0)] + 3gx_0^2, \\ g_3(x_0) &:= 6gx_0, \\ g_4(x_0) &:= 6g. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Die Bedingung zum Auffinden der Funktion $\Omega(x_0)$ wird hier nicht über (2.25) bestimmt, vielmehr wird die Stelle, an der die Ω -Abhängigkeit des Potentials $W_{\Omega}^N(x_0)$ am kleinsten ist, direkt abgelesen: In Abbildung 6.4 ist deutlich zu sehen, daß $W_{\Omega}^1(x_0)$ über ein Minimum verfügt, während

$W_{\Omega}^2(x_0)$ einen Wendepunkt besitzt. Dieses Verhalten setzt sich in höheren Ordnungen fort, d.h. gerade Approximationen haben Wendepunkte, während ungerade über Minima verfügen [1, S. 277 ff.]. Das numerische Ableiten von $W_{\Omega}^N(x_0)$ ist der direktere Weg zur Bestimmung von dessen x_0 -Abhängigkeit, da die Bestimmungsgleichung für $\Omega(x_0)$ (2.25) transzendent ist, also ebenfalls per Iteration numerisch gelöst werden muß.

Die Auftragung von $W_{\Omega}^2(x_0)$ über x_0 für verschiedene Temperaturen liefert gegenüber derjenigen von $W_{\Omega}^1(x_0)$ in Abbildung (6.1) qualitativ kein neues Verhalten. Deshalb wird zur weiteren Auswertung die “integrale Information” in Form der freien Energie berechnet. Dazu bestimmt man aus der Approximation des effektiven Potentials $W_{\Omega}^N(x_0)$ durch numerische Integration über die Variable x_0 in (2.9) die N -te Approximation der Zustandssumme Z_N . Die angenäherte freie Energie F_N folgt dann durch $F_N = -k_B T \ln Z_N$ und ist in Tabelle 6.1 für verschiedene Kopplungskonstanten g und Temperaturen T angegeben.

$g/4$	β	F_1	F_2	F_{ex}
0.1	1	0.226083	0.226075	0.226071
0.1	5	0.559157	0.558681	0.558675
0.2	1	0.321996	0.321970	0.321970
0.2	5	0.603383	0.602193	0.602169
0.3	1	0.391161	0.391112	0.391112
0.3	5	0.639807	0.637909	0.637855
0.4	1	0.446326	0.446241	0.446250
0.4	5	0.671341	0.668780	0.668686
0.5	1	0.492685	0.492578	0.492579
0.5	5	0.699435	0.696248	0.696118
0.6	1	0.532928	0.532787	0.532788
0.6	5	0.724935	0.721174	0.720998
0.7	1	0.568643	0.568468	0.568469
0.7	5	0.748394	0.744091	0.743875
0.8	1	0.600857	0.600645	0.600645
0.8	5	0.770191	0.765388	0.765122
0.9	1	0.630273	0.630022	0.630022
0.9	5	0.790603	0.785317	0.785016
1	1	0.657396	0.657105	0.657105
1	5	0.809838	0.804102	0.803758
10	1	1.48838	1.48317	1.48307
10	5	1.52878	1.50692	1.50497

Tabelle 6.1: Die erste und zweite Approximation der freien Energie. Die exakten Werte der Freien Energie sind nach $F = -1/\beta \ln Z$ berechnet, wobei in der Summe $Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta E_n)$ nur die ersten acht Summanden berücksichtigt wurden. Die exakten Energieeigenwerte entstammen dabei [1, S. 266]. Die jeweils letzte der Ziffern gilt aufgrund der numerischen Berechnung der Werte als unsicher.

Kapitel 7

Zweites Beispiel: Das Coulomb-Problem

Die Behandlung des Coulomb-Problems durch die Variationsstörungstheorie dient einerseits als weitere Illustration der Anwendbarkeit der Theorie, aber auch dazu, ihre Konvergenzeigenschaften beispielhaft zu untersuchen. Dazu wird das effektive Potential des Coulomb-Problems in der zweiten Näherung untersucht. Darüber hinaus stellt das Coulomb-Problem eine wichtige Anwendung der Verschmierungsformel (3.45) dar. Eine Entwicklung des Coulomb-Potentials $\alpha/|\mathbf{x}|$ nach Potenzen von Differenzen $\mathbf{x} - \mathbf{x}_0$ liefert eine unendliche Reihe von Beiträgen, so daß die Auswertung der Korrekturterme

$$\frac{(-1)^{N+1}}{N! \hbar^N \beta} \langle (\mathcal{A}_{\text{int}}^{\mathbf{x}_0})^N \rangle_{\Omega, c}^{\mathbf{x}_0} . \quad (7.1)$$

in (2.23) nicht durch das Wick-Theorem (3.90) erfolgen kann. Die Verschmierungsformel (3.45) erschließt somit eine neue Klasse von Potentialen, auf die sich die Variationsstörungstheorie für die Zustandssumme anwenden läßt. Die angestrebte Untersuchung des Coulomb-Problems macht es freilich notwendig, die Theorie auf mehrere Raumdimensionen zu erweitern.

7.1 Variationsstörungstheorie in D Raumdimensionen

Die Verallgemeinerung der Zustandssumme (2.1) auf D Raumdimensionen lautet

$$Z = \oint \mathcal{D}x_1(\tau) \dots \oint \mathcal{D}x_D(\tau) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x_1(\tau), \dots, x_D(\tau)] \right\} \quad (7.2)$$

mit der euklidischen Wirkung

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[x_1(\tau), \dots, x_D(\tau)] = \\ \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} [\dot{x}_1^2(\tau) + \dots + \dot{x}_D^2(\tau)] + V(x_1(\tau), \dots, x_D(\tau)) \right\}. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Auch hier ist es sinnvoll, sowohl im Pfad \mathbf{x} , als auch im Pfadmittel \mathbf{x}_0 zur Vektorschreibweise überzugehen

$$\mathbf{x}(\tau) := \begin{pmatrix} x_1(\tau) \\ \vdots \\ x_D(\tau) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}_0 := \begin{pmatrix} (x_0)_1 \\ \vdots \\ (x_0)_D \end{pmatrix}, \quad (7.4)$$

wodurch (7.2) und (7.3) die folgenden einfachen Formen

$$Z = \oint \mathcal{D}^D \mathbf{x}(\tau) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[\mathbf{x}(\tau)] \right\} \quad (7.5)$$

und

$$\mathcal{A}[\mathbf{x}(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + V(\mathbf{x}(\tau)) \right\} \quad (7.6)$$

annehmen. Im Hinblick auf die Anwendung auf das Coulomb-Potential beschränken wir uns beim Vergleichssystem der Einfachheit halber auf einen isotropen harmonischen Oszillator, der das Potential $V(\mathbf{x}(\tau))$ annähern soll. Die Verallgemeinerungen von (2.11), (2.12), (2.15), (2.16) und (2.23) aus dem Kapitel 2 lauten dann wie folgt. Die harmonischen

Erwartungswerte werden

$$\begin{aligned} \langle F_1(\mathbf{x}(\tau_1)) \dots F_N(\mathbf{x}(\tau_N)) \rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} &= \frac{1}{Z_{\Omega}^{\mathbf{x}_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}}^D \\ &\times \oint \mathcal{D}^D \mathbf{x}(\tau) F_1(\mathbf{x}(\tau_1)) \dots F_N(\mathbf{x}(\tau_N)) \delta(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_0) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_{\Omega}^{\mathbf{x}_0}[\mathbf{x}(\tau)] \right\} \end{aligned} \quad (7.7)$$

mit der lokalen harmonischen Zustandssumme

$$Z_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}}^D \oint \mathcal{D}^D \mathbf{x}(\tau) \delta(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_0) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_{\Omega}^{\mathbf{x}_0}[\mathbf{x}(\tau)] \right\} \quad (7.8)$$

und den Wirkungen

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\Omega}^{\mathbf{x}_0}[\mathbf{x}(\tau)] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}(\tau)^2 + \Omega^2(\mathbf{x}_0) \frac{M}{2} [\mathbf{x}(\tau) - \mathbf{x}_0]^2 \right\}, \\ \mathcal{A}_{\text{int}}^{\mathbf{x}_0}[\mathbf{x}(\tau)] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ V(\mathbf{x}(\tau)) - \Omega^2(\mathbf{x}_0) \frac{M}{2} [\mathbf{x}(\tau) - \mathbf{x}_0]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Sie führen zusammen auf die folgende Approximation des effektiven Potentials

$$W_{\Omega}^N(\mathbf{x}_0) = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} + \sum_{n=1}^N \frac{(-1)^{n+1}}{n! \hbar^n \beta} \langle (\mathcal{A}_{\text{int}}^{\mathbf{x}_0})^n \rangle_{\Omega, c}^{\mathbf{x}_0}. \quad (7.10)$$

7.2 Harmonische Erwartungswerte in D Dimensionen

Schreibt man (7.7) als

$$\begin{aligned} &\frac{1}{Z_{\Omega}^{(x_0)_1}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \oint \mathcal{D}x_1(\tau) \delta(\bar{x}_1 - (x_0)_1) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_{\Omega}^{(x_0)_1}[x_1(\tau)] \right\} \dots \\ &\times \frac{1}{Z_{\Omega}^{(x_0)_D}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \oint \mathcal{D}x_D(\tau) \delta(\bar{x}_D - (x_0)_D) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_{\Omega}^{(x_0)_D}[x_D(\tau)] \right\} \\ &\times F_1(\mathbf{x}(\tau_1)) \dots F_N(\mathbf{x}(\tau_N)), \end{aligned} \quad (7.11)$$

so führt D -faches Anwenden von (3.64) auf

$$\begin{aligned} \langle F_1(\mathbf{x}(\tau_1)) \dots F_N(\mathbf{x}(\tau_N)) \rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} &= \left\{ \prod_{j=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} d^D \mathbf{y}_j F_j(\mathbf{y}_j) \right\} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det(A)}^D} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N (A^{-1}(\mathbf{x}_0))_{jj'} [\mathbf{y}_j - \mathbf{x}_0]^T [\mathbf{y}_{j'} - \mathbf{x}_0] \right\}. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Die Matrix $A^{-1}(\mathbf{x}_0)$ weist dieselben Elemente auf wie schon zuvor, d.h. es handelt sich um die inverse Matrix von $A(x_0) := (a_{jj'}(\mathbf{x}_0))$. Die lokale harmonische Zustandssumme $Z_{\Omega}^{\mathbf{x}_0}$ ergibt schlicht die D -fache Potenz der eindimensionalen Größe (3.8):

$$Z_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} = (Z_{\Omega}^{x_0})^D. \quad (7.13)$$

7.3 Approximation erster Ordnung

Für die folgenden Anwendungen gilt die Dimension $D=3$, wobei das Potential der Coulomb-Wechselwirkung durch

$$V(\mathbf{x}) = \frac{\alpha}{|\mathbf{x}|} \quad (7.14)$$

gegeben ist mit $\alpha = -e^2$ und der Elementarladung e . Es wird zunächst die Korrektur erster Ordnung in (7.10)

$$\frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \langle V_{\text{int}}(\mathbf{x}(\tau_1)) \rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} \quad (7.15)$$

mit

$$V_{\text{int}}(\mathbf{x}) = \frac{\alpha}{|\mathbf{x}|} - \frac{M}{2} \Omega^2(\mathbf{x}_0) [\mathbf{x}(\tau) - \mathbf{x}_0]^2 \quad (7.16)$$

berechnet. Der Oszillatoranteil ergibt mit (7.12) für $N = 1$ den harmonischen Erwartungswert

$$\left\langle -\frac{M}{2} \Omega^2(\mathbf{x}_0) [\mathbf{x}(\tau) - \mathbf{x}_0]^2 \right\rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} = -\frac{3M\Omega^2(\mathbf{x}_0)}{2} a^2(\mathbf{x}_0). \quad (7.17)$$

Der harmonische Erwartungswert des Coulomb-Potentials wird in Kugelkoordinaten ausgewertet:

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{\alpha}{|\mathbf{x}|} \right\rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} &= \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 \mathbf{y}}{\sqrt{2\pi a^2(\mathbf{x}_0)}^3 |\mathbf{y}|} \exp \left\{ -\frac{1}{2a^2(\mathbf{x}_0)} [\mathbf{y} - \mathbf{x}_0]^2 \right\} \\
&= \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2\pi r dr \sin \theta d\theta}{\sqrt{2\pi a^2(\mathbf{x}_0)}^3} \exp \left\{ -\frac{1}{2a^2(\mathbf{x}_0)} (r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos \theta) \right\} \\
&= \frac{\alpha}{r_0} \operatorname{erf}(r_0/\sqrt{2a^2(\mathbf{x}_0)})
\end{aligned} \tag{7.18}$$

mit der Fehler-Funktion

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dz \exp(-z^2). \tag{7.19}$$

Es folgt daher

$$\begin{aligned}
W_{\Omega}^1(\mathbf{x}_0) &= \frac{3}{\beta} \ln \left[\frac{\sinh(\hbar\Omega(\mathbf{x}_0)\beta/2)}{\hbar\Omega(\mathbf{x}_0)\beta/2} \right] - \frac{3M}{2} \Omega^2(\mathbf{x}_0) a^2(\mathbf{x}_0) \\
&\quad + \frac{\alpha}{r_0} \operatorname{erf} \left[r_0/\sqrt{2a^2(\mathbf{x}_0)} \right].
\end{aligned} \tag{7.20}$$

Die Selbstkonsistenzgleichung (4.17) wird schließlich

$$\Omega^2(\mathbf{x}_0) = \frac{2}{3} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{a_{\tau_1 \tau_1}^3(\mathbf{x}_0)}} \exp \left\{ \frac{-r_0^2}{2a^2(\mathbf{x}_0)} \right\}. \tag{7.21}$$

Sie zeigt eine Isotropie in \mathbf{x}_0 , so daß es ausreicht, den Betrag r_0 als variabel aufzufassen. Der resultierende Verlauf des effektiven Potentials in erster Ordnung ist in Abbildung 7.1 für verschiedene Temperaturen aufgetragen. Da diese Näherung des effektiven Potentials ein Minimum bei $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$ besitzt, legen die Erkenntnisse von Kapitel 4 in einer Dimension die Verallgemeinerung des Resultats (4.31) auf D Dimensionen nahe.

7.4 Tieftemperaturgrenzfall am Ortsnullpunkt

In Kapitel 4 wurde schon die allgemeine Form des Tieftemperaturgrenzwertes von W_{Ω}^1 in einer Dimension mit Hilfe der Sattelpunktsapproximati-

on herausgearbeitet. Mit dreidimensionalem \mathbf{x}_0 gilt analog zur Gleichung (4.30)

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_{\Omega}^1(\mathbf{x}_0) = \frac{3}{4} \hbar \Omega(\mathbf{x}_0) + \langle V(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0}. \quad (7.22)$$

Die Approximation der Grundzustandsenergie lautet nach Formel (4.31), die sich ebenfalls mühelos auf D -Dimensionen übertragen läßt:

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_{\Omega}^N(\mathbf{x}_{\min}) = E_N. \quad (7.23)$$

Entwickelt man die Fehler-Funktion (7.19) für kleine Argumente, folgt mit dem Tieftemperaturgrenzwert von a^2 in (4.20)

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_{\Omega}^1(\mathbf{x}_{\min}) = \frac{3}{4} \hbar \Omega(\mathbf{x}_{\min}) + \sqrt{\frac{M\Omega(\mathbf{x}_{\min})}{\pi \hbar}} 2\alpha. \quad (7.24)$$

In der Abbildung 7.1 ist zu erkennen, daß die erste Approximation des effektiven Potentials ihr Minimum bei $\mathbf{x}_{\min} = \mathbf{0}$ aufweist, woraus

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_{\Omega}^1(\mathbf{x}_{\min}) = \frac{3}{4} \hbar \Omega(\mathbf{0}) + \sqrt{\frac{M\Omega(\mathbf{0})}{\pi \hbar}} 2\alpha \quad (7.25)$$

folgt. Die selbstkonsistent zu lösende Gleichung für $\Omega(\mathbf{0})$ lautet also

$$\Omega_1(\mathbf{0}) = -\frac{16M\alpha}{9\hbar^3\pi}. \quad (7.26)$$

Die optimierte Frequenz (7.26) wird in (7.25) eingesetzt, und wir erhalten damit unter Beachtung von (7.23) als erste Approximation der Grundzustandsenergie des Coulombsystems

$$E_1 = -\frac{4}{3} \frac{M}{\hbar^2\pi} \alpha + \frac{8}{3} \frac{M}{\hbar^2\pi} \alpha \sqrt{-\alpha} \quad (7.27)$$

und mit $\alpha = -1$

$$E_1 = -\frac{4}{3} \frac{M}{\hbar^2\pi}. \quad (7.28)$$

In natürlichen Einheiten $\hbar = k_B = 1$ und mit $M = 1$ entspricht das einer Energie von

$$E_1 = -0.4244J^*. \quad (7.29)$$

Zum Vergleich sei die exakte Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms angegeben, sie beträgt $E = -0.5J^* = -13.6eV$.

7.5 Approximation zweiter Ordnung

Die zweite Korrektur lautet nach (7.10) und der Definition von $\mathcal{A}_{\text{int}}^{\mathbf{x}_0}[\mathbf{x}(\tau)]$ durch (7.9)

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2\hbar^2\beta} \langle (\mathcal{A}_{\text{int}}^{\mathbf{x}_0})^2 \rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} = \\
& -\frac{1}{2\hbar^2\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \left(\frac{M^2\Omega^4(\mathbf{x}_0)}{4} \langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 [\mathbf{x}(\tau_2) - \mathbf{x}_0]^2 \rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} \right. \\
& \left. - M\Omega^2(\mathbf{x}_0) \alpha \left\langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} + \alpha^2 \left\langle \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_1)|} \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} \right). \tag{7.30}
\end{aligned}$$

Für Kummulanten von zwei Funktionen gilt allgemein unter Verwendung der Vorschrift (2.20) zur Berechnung von Kummulanten aus Momenten, der Definition der Erwartungswerte in (7.12) mit $D = 3$ und einer Variablentranslation um den Vektor \mathbf{x}_0

$$\begin{aligned}
\langle F_1(\mathbf{x}(\tau_1)) F_2(\mathbf{x}(\tau_2)) \rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{y} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{x} \frac{F_1(\mathbf{x} + \mathbf{x}_0) F_2(\mathbf{y} + \mathbf{x}_0)}{\sqrt{(2\pi)^2 \det(A)}^3} \\
&\times \left\{ \exp \left[\frac{-a_{\tau_1\tau_1}}{2\det(A)} [\mathbf{x}^2 + \mathbf{y}^2] + \frac{a_{\tau_1\tau_2}}{\det(A)} \mathbf{x}\mathbf{y} \right] - \exp \left[\frac{-a_{\tau_1\tau_1}}{2\det(A)} [\mathbf{x}^2 + \mathbf{y}^2] \right] \right\} \tag{7.31}
\end{aligned}$$

mit $\det(A) = a_{\tau_1\tau_1}^2 - a_{\tau_2\tau_2}^2$. Es werden deshalb zuerst die Erwartungswerte

$$\langle F_1(\mathbf{x}(\tau_1)) F_2(\mathbf{x}(\tau_2)) \rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} \tag{7.32}$$

berechnet, und zur Bestimmung der Kummulante

$$\langle F_1(\mathbf{x}(\tau_1)) F_2(\mathbf{x}(\tau_2)) \rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} \tag{7.33}$$

wird von (7.32) der Erwartungswert mit verschwindendem $a_{\tau_1\tau_2} \equiv 0$ subtrahiert.

7.5.1 Raumintegrationen

Wir beginnen mit der Berechnung der Raumintegrale. Schon in (3.77) wurde gezeigt, daß gilt:

$$\langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 [\mathbf{x}(\tau_2) - \mathbf{x}_0]^2 \rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} = 9a_{\tau_1\tau_1}^2 + 6a_{\tau_1\tau_2}^2. \tag{7.34}$$

Die verbleibenden Erwartungswerte in (7.30)

$$\left\langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} \quad (7.35)$$

und

$$\left\langle \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_1)|} \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} \quad (7.36)$$

werden durch die Verschmierungsformel (7.12) auf Gaußsche Form gebracht. Es wird dazu die Umschreibung

$$\frac{1}{|\mathbf{x} + \mathbf{x}_0|} = 4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_0^{+\infty} d\phi \exp \left\{ -\phi \mathbf{k}^2 - i\mathbf{k}(\mathbf{x} + \mathbf{x}_0) \right\} \quad (7.37)$$

benutzt. Schreibt man \mathbf{k} in Kugelkoordinaten, so läßt sich die Richtigkeit von (7.37) in direkter Rechnung bestätigen. Setzt man (7.37) in (3.41) ein, so lassen sich durch quadratische Ergänzung die Raumintegrationen in (7.35) ausführen, und es folgt

$$\begin{aligned} & \left\langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} = \\ & 4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_0^{+\infty} d\phi \left[3a_{\tau_1 \tau_1} - \mathbf{k}^2 a_{\tau_1 \tau_2}^2 \right] \exp \left\{ -\phi \mathbf{k}^2 - i\mathbf{k}(\mathbf{x} + \mathbf{x}_0) \right\} \end{aligned} \quad (7.38)$$

und nach der \mathbf{k} -Integration

$$\left\langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} = \frac{3}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} d\phi \frac{2a_{\tau_1 \tau_1} \phi + a_{\tau_1 \tau_1}^2 - a_{\tau_1 \tau_2}^2}{\sqrt{\phi + a_{\tau_1 \tau_1}/2}}. \quad (7.39)$$

Der dritte Ausdruck (7.36) wird unter der Umformung (7.37)

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_1)|} \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} = (4\pi)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \int_0^{+\infty} d\phi_1 \int_0^{+\infty} d\phi_2 \\ & \times \exp \left\{ -\frac{a_{\tau_1 \tau_1}}{2} (\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2) - a_{\tau_1 \tau_2} \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - i\mathbf{x}_0 (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) - \phi_1 \mathbf{k}_1^2 - \phi_2 \mathbf{k}_2^2 \right\}, \end{aligned} \quad (7.40)$$

bzw. nach der \mathbf{k} - Integration

$$\left\langle \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_1)|} \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega}^{\mathbf{x}_0} = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} d\phi_1 \int_0^{+\infty} d\phi_2 \frac{1}{\sqrt{(a_{\tau_1\tau_1} + 2\phi_1)(a_{\tau_1\tau_1} + 2\phi_2) - a_{\tau_1\tau_2}^2}^3} \\ \times \exp \left\{ -\mathbf{x}_0^2 \frac{a_{\tau_1\tau_1} + \phi_1 + \phi_2 - a_{\tau_1\tau_2}}{(a_{\tau_1\tau_1} + 2\phi_1)(a_{\tau_1\tau_1} + 2\phi_2) - a_{\tau_1\tau_2}^2} \right\}. \quad (7.41)$$

7.5.2 Bildung der Kummulanten

Beim Bilden der Kummulanten in (7.30) heben sich Anteile weg, und es folgt für den ersten Term in (7.30)

$$\langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 [\mathbf{x}(\tau_2) - \mathbf{x}_0]^2 \rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} = 6a_{\tau_1\tau_2}^2. \quad (7.42)$$

Die τ -Integrationen sind ebenfalls elementar durchführbar, daher gilt

$$-\frac{1}{2\hbar^2\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 [\mathbf{x}(\tau_2) - \mathbf{x}_0]^2 \rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} = -\frac{6}{2\hbar\Omega} a_2^4 \quad (7.43)$$

mit der Abkürzung a_2^4 , die im Anhang D explizit angegeben ist. Weiter gilt

$$\left\langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} = -\frac{3a_{\tau_1\tau_2}^2}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{d\phi}{\sqrt{\phi + a_{\tau_1\tau_1}/2}^5}, \quad (7.44)$$

so daß sich die elementare ϕ -Integration ausführen läßt:

$$\left\langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} = -\frac{a_{\tau_1\tau_2}^2}{\sqrt{\pi a_{\tau_1\tau_1}^3/2}}. \quad (7.45)$$

Die τ -Integrationen liefern hier

$$-\frac{1}{2\hbar^2\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \left\langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} = \frac{1}{\hbar\Omega\sqrt{2\pi a_{\tau_1\tau_1}^3}} a_2^4. \quad (7.46)$$

Der dritte Beitrag in (7.30) wird zu

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_1)|} \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega, c}^{\mathbf{x}_0} &= \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} d\phi_1 \int_0^{+\infty} d\phi_2 \\
&\times \left\{ \frac{1}{\sqrt{(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_1)(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_2) - a_{\tau_1 \tau_2}^2}^3} \right. \\
&\times \exp \left[-\mathbf{x}_0^2 \frac{a_{\tau_1 \tau_1} + \phi_1 + \phi_2 - a_{\tau_1 \tau_2}}{(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_1)(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_2) - a_{\tau_1 \tau_2}^2} \right] \\
&\left. - \frac{1}{\sqrt{(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_1)(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_2)}^3} \exp \left[-\mathbf{x}_0^2 \frac{a_{\tau_1 \tau_1} + \phi_1 + \phi_2}{(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_1)(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_2)} \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{7.47}$$

7.5.3 Numerische Berechnung der zweiten Ordnung des effektiven Potentials

Die in (7.47) verbleibenden Integrale konnten nicht vollständig analytisch gelöst werden. Um wenigstens eine numerische Berechnung zu ermöglichen, wird die ϕ_2 -Integration durchgeführt und dazu substituiert:

$$\gamma(\phi_1) := \frac{a_{\tau_1 \tau_1} + \phi_1 + \phi_2 - a_{\tau_1 \tau_2}}{(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_1)(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_2) - a_{\tau_1 \tau_2}^2}. \tag{7.48}$$

Wir erhalten

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_1)|} \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega, c}^{\mathbf{x}_0} &= \\
&= \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} d\phi_2 \frac{1}{(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_2 - a_{\tau_1 \tau_2})} \frac{1}{\sqrt{2(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_2)}} \int_b^a d\gamma \frac{\exp\{-x_0^2 \gamma\}}{\sqrt{\gamma - a}}
\end{aligned} \tag{7.49}$$

mit

$$\begin{aligned}
a &= 1/(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_2) \\
b &= (a_{\tau_1 \tau_1} + \phi_2 - a_{\tau_1 \tau_2}) / [(a_{\tau_1 \tau_1} + 2\phi_2)a_{\tau_1 \tau_1} - a_{\tau_1 \tau_2}^2].
\end{aligned} \tag{7.50}$$

Nach einer weiteren Variablen-Verschiebung

$$t := \gamma - a \tag{7.51}$$

und unter Verwendung der Integralformel [3, 3.361.1]

$$\int_0^u dx \frac{\exp\{-qx\}}{\sqrt{qx}} = \frac{\sqrt{\pi}}{q} \operatorname{erf}(\sqrt{qu}) \quad (7.52)$$

folgt bei Hinzunahme der τ -Integrationen und Vorfaktoren dieses Summanden in (7.30) der Beitrag

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2\hbar^2\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \left\langle \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_1)|} \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} = -\frac{1}{\hbar^2\beta x_0 \sqrt{\pi}} \\ & \times \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{+\infty} d\phi_2 \frac{\exp\{-x_0^2/(a_{\tau_1\tau_1} + 2\phi_2)\}}{(a_{\tau_1\tau_1} + 2\phi_2 - a_{\tau_1\tau_2})} \frac{1}{\sqrt{2(a_{\tau_1\tau_1} + 2\phi_2)}} \\ & \operatorname{erf} \left\{ x_0 \frac{a_{\tau_1\tau_1} + 2\phi_2 - a_{\tau_1\tau_2}}{\sqrt{2[(a_{\tau_1\tau_1} + 2\phi_2)a_{\tau_1\tau_1} - a_{\tau_1\tau_2}^2]}(a_{\tau_1\tau_1} + 2\phi_2)} \right\} \quad (7.53) \end{aligned}$$

wobei $\operatorname{erf}(x)$ die Fehler-Funktion, wie in (7.19) definiert, darstellt. Wir setzen (7.43), (7.46), (7.53) in die zweite Korrektur des effektiven Potentials (7.30) ein, und erhalten zusammen mit der Approximation erster Ordnung (7.20) die zweite Approximation des effektiven Potentials. Das optimale $\Omega(\mathbf{x}_0)$ wird dabei direkt durch das Aufsuchen der Minima bzw. Wendepunkte von $W_\Omega^2(\mathbf{x}_0)$ bestimmt. Die Abbildung 7.2 stellt dieses Ergebnis graphisch dar.

7.5.4 Spezialisierung auf den Orts- und Temperaturnullpunkt

Ein weiterer gangbarer Weg physikalisch bedeutsame Ergebnisse zu erzielen, wird durch die Beziehung (7.23) zwischen Grundzustandsenergie und effektivem Potential zweiter Ordnung an dessen Minimum \mathbf{x}_{\min} gegeben. Ein Blick auf die Abb. 7.2 zeigt, daß für endliche Temperaturen ein Minimum am Ortsnullpunkt besteht, von dem wir annehmen, daß es im Temperaturnullpunkt erhalten bleibt. Am Ortsnullpunkt $\mathbf{x}_{\min} = \mathbf{0}$ wird es möglich (7.47) analytisch zu berechnen, und wir erhalten deshalb im Grenzfall $T \rightarrow 0$ die zweite Approximation der Grundzustandsenergie.

Der Tieftemperaturgrenzwert von $a_{\tau_1\tau_2}^2$ ist durch (4.27) gegeben. Mit der Hinzunahme der τ -Integrationen wird der Beitrag von (7.47) zur zweiten Korrektur (7.30)

$$\begin{aligned} & \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left\{ -\frac{1}{2\hbar^2\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \left\langle \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_1)|} \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} \right\} = \\ & \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left\{ -\frac{1}{\hbar^2\beta\pi} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{+\infty} d\phi_2 \int_0^{+\infty} d\phi_1 \right. \\ & \times \left. \left\{ \frac{1}{\sqrt{(\frac{\hbar}{2M\Omega} + 2\phi_1)(\frac{\hbar}{2M\Omega} + 2\phi_2) - (\frac{\hbar}{2M\Omega})^2} \exp(-2\Omega|\tau_2 - \tau_1|)} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{\sqrt{(\frac{\hbar}{2M\Omega} + 2\phi_2)(\frac{\hbar}{2M\Omega} + 2\phi_1)}} \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (7.54)$$

Um die Rechnung übersichtlich zu gestalten, wird der Grenzübergang ans Ende der Rechnung verschoben, und es wird mehrfach substituiert:

$$\epsilon := 4M\Omega/\hbar, k(\phi_1) := (1 + \epsilon\phi_1)(1 + \epsilon\phi_2), f(\phi_2) := 1 + \epsilon\phi_2. \quad (7.55)$$

Wir berechnen also im ersten Schritt

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2\hbar^2\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \left\langle \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_1)|} \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} = \\ & \frac{-M\Omega}{2\hbar^3\beta\pi} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_1^{+\infty} \frac{df}{f} \int_f^{+\infty} dk \left\{ \frac{1}{\sqrt{k - \exp(-2\Omega|\tau_2 - \tau_1|)}} - \frac{1}{\sqrt{k}} \right\}. \end{aligned} \quad (7.56)$$

Die k -Integration ist elementar, während im f -Integral die Formel [3, 2.224.5]

$$\int \frac{dx}{x\sqrt{a+bx}} = \frac{2}{\sqrt{-a}} \arctan \sqrt{\frac{a+bx}{-a}} \quad (7.57)$$

mit $a < 0$ zur Anwendung kommt. Es folgt für (7.57)

$$\begin{aligned} & -\frac{M\Omega}{\hbar^3\beta\pi} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \left\{ \pi \exp(\Omega|\tau_2 - \tau_1|) \right. \\ & \left. - 2 \exp(\Omega|\tau_2 - \tau_1|) \arctan \sqrt{\exp(2\Omega|\tau_2 - \tau_1|) - 1} - 2 \right\}. \end{aligned} \quad (7.58)$$

Die τ -Integrationen führen über ein Quadrat im ersten Quadranten, das von der Geraden $\tau_1 = \tau_2$ halbiert wird. Der Integrand von (7.58) ist symmetrisch bezüglich Spiegelung an dieser Geraden. Deshalb kann (7.58) auch durch das zweifach zu wertende Integral über das untere Dreieck ausgedrückt werden, was die Betragsstriche überflüssig macht:

$$-\frac{2M\Omega}{\hbar^3\beta\pi} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \left\{ \pi \exp[\Omega(\tau_2 - \tau_1)] - 2 \exp[\Omega(\tau_2 - \tau_1)] \arctan \sqrt{\exp[2\Omega(\tau_2 - \tau_1)] - 1} - 2 \right\}. \quad (7.59)$$

Wir teilen den Integranden auf und finden durch elementare Integration

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \exp[\Omega(\tau_2 - \tau_1)] = \frac{1}{\Omega^2} [\exp(\hbar\beta\Omega) - 1] - \frac{\hbar\beta}{\Omega}. \quad (7.60)$$

Im nächsten Schritt untersuchen wir

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \exp[\Omega(\tau_2 - \tau_1)] \arctan \sqrt{\exp[2\Omega(\tau_2 - \tau_1)] - 1}. \quad (7.61)$$

Unter Verwendung der trigonometrischen Beziehung [19, 2.5.2.1.7]

$$\arctan x = \arcsin \frac{x}{\sqrt{1+x^2}} \quad (7.62)$$

und Einführung der Substitutionen

$$\begin{aligned} c(\tau_1) &= \sqrt{1 - \exp[-2\Omega(\tau_2 - \tau_1)]} \\ \tilde{c}(\tau_2) &= \sqrt{1 - \exp(-2\Omega\tau_2)}, \end{aligned} \quad (7.63)$$

wird (7.61) zu

$$\frac{1}{\Omega^2} \int_0^b d\tilde{c} \frac{\tilde{c}}{1 - \tilde{c}^2} \int_0^{\tilde{c}} dc \frac{c}{\sqrt{1 - c^2}^3} \arcsin c \quad (7.64)$$

mit der oberen Integrationsgrenze $b = \sqrt{1 - \exp(-2\Omega\hbar\beta)}$. Die Formel [3, 2.838.2]

$$\int \frac{x}{\sqrt{1-x^2}^3} \arcsin x = \frac{\arcsin x}{\sqrt{1-x^2}} + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1-x}{1+x} \right) \quad (7.65)$$

gestattet es uns dann, die c -Integration durchzuführen, und wir erhalten für (7.64)

$$\frac{1}{\Omega^2} \int_0^b d\tilde{c} \frac{\tilde{c}}{1-\tilde{c}^2} \left\{ \frac{\arcsin \tilde{c}}{\sqrt{1-\tilde{c}^2}} + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1-\tilde{c}}{1+\tilde{c}} \right) \right\}. \quad (7.66)$$

Der erste der Beiträge läßt sich wiederum mit (7.65) berechnen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega^2} \int_0^b d\tilde{c} \frac{\tilde{c}}{\sqrt{1-\tilde{c}^2}^3} \arcsin \tilde{c} &= \frac{1}{\Omega^2} \exp(\Omega\hbar\beta) \arcsin \sqrt{1-\exp(-2\Omega\hbar\beta)} \\ &+ \frac{1}{2\Omega^2} \ln \left[\frac{1-\sqrt{1-\exp(-2\Omega\hbar\beta)}}{1+\sqrt{1-\exp(-2\Omega\hbar\beta)}} \right]. \end{aligned} \quad (7.67)$$

Den zweiten Beitrag in (7.66) bringen wir durch eine weitere Substitution

$$y(\tilde{c}) = \frac{1-\tilde{c}}{1+\tilde{c}} \quad (7.68)$$

und eine Partialbruchzerlegung auf die Form

$$\frac{1}{2\Omega^2} \int_0^b d\tilde{c} \frac{\tilde{c}}{1-\tilde{c}^2} \ln \left(\frac{1-\tilde{c}}{1+\tilde{c}} \right) = -\frac{1}{8\Omega^2} (\ln \tilde{y})^2 - \frac{1}{2\Omega^2} \int_{\tilde{y}}^1 dy \frac{\ln y}{1+y} \quad (7.69)$$

mit

$$\tilde{y} = \frac{1-\sqrt{1-\exp(-2\Omega\hbar\beta)}}{1+\sqrt{1-\exp(-2\Omega\hbar\beta)}}. \quad (7.70)$$

Der letzte der Summanden in (7.59) ist ebenfalls elementar zu integrieren:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 1 = \frac{(\hbar\beta)^2}{2}. \quad (7.71)$$

Unter Beachtung von (7.60), (7.67), (7.69), (7.71) wird (7.57) schließlich zu

$$\begin{aligned} \frac{4M\Omega}{\pi\hbar^3\beta} \left\{ -\frac{\pi}{2\Omega^2} [\exp(\hbar\beta\Omega) - 1] + \frac{\pi\hbar\beta}{2\Omega} \right. \\ \left. + \frac{1}{\Omega^2} \exp(\Omega\hbar\beta) \arcsin \sqrt{1-\exp(-2\Omega\hbar\beta)} \right. \\ \left. + \frac{1}{2\Omega^2} \ln \tilde{y} - \frac{1}{8\Omega^2} (\ln \tilde{y})^2 - \frac{1}{2\Omega^2} \int_{\tilde{y}}^1 dy \frac{\ln y}{1+y} + \frac{(\hbar\beta)^2}{2} \right\}. \end{aligned} \quad (7.72)$$

Um den Grenzübergang $\beta \rightarrow \infty$ vollziehen zu können, werden einige der Terme aus (7.72) in Potenzen von $\exp(-2\Omega\hbar\beta)$ taylorentwickelt. Es gilt für große Werte von β :

$$\frac{1 - \sqrt{1 - \exp(-2\Omega\hbar\beta)}}{1 + \sqrt{1 - \exp(-2\Omega\hbar\beta)}} \approx \frac{1}{4} \exp(-2\hbar\beta\Omega) \quad (7.73)$$

und damit

$$\ln \left[\frac{1 - \sqrt{1 - \exp(-2\Omega\hbar\beta)}}{1 + \sqrt{1 - \exp(-2\Omega\hbar\beta)}} \right] \approx -\ln 4 - 2\hbar\beta\Omega. \quad (7.74)$$

Die Integrationsgrenze \tilde{y} verschwindet nach (7.73) im Grenzübergang $\beta \rightarrow \infty$ und es gilt [3, 4.231.1]

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \int_{\tilde{y}}^1 dy \frac{\ln y}{1+y} = -\frac{\pi^2}{12}. \quad (7.75)$$

Mit diesen Vorbereitungen läßt sich der Grenzübergang in (7.72) durchführen, und wir erhalten für (7.54) das Ergebnis

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left\{ -\frac{1}{2\hbar^2\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \left\langle \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_1)|} \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} \right\} \\ = \frac{-4M}{\hbar^2\pi} \left(1 - \frac{\pi}{2} + \ln 2 \right). \end{aligned} \quad (7.76)$$

Berücksichtigt man den Tieftemperaturgrenzwert von a_2^4 nach (D.1)

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow \infty} a_2^4 &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left\{ \left[\frac{\hbar}{M^2\Omega(x_0)} \right]^2 \frac{1}{8\hbar\beta\Omega(x_0)} \frac{1}{\sinh^2(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} \right. \\ &\times \left. \left\{ 4 + [\hbar\beta\Omega(x_0)]^2 - 4 \cosh \hbar\beta\Omega(x_0) + \hbar\beta\Omega(x_0) \sinh \hbar\beta\Omega(x_0) \right\} \right\} \\ &= \left(\frac{\hbar}{2M\Omega} \right)^2, \end{aligned} \quad (7.77)$$

so wird aus (7.43)

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \left\{ \frac{-1}{2\hbar^2\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 [\mathbf{x}(\tau_2) - \mathbf{x}_0]^2 \rangle_{\Omega,c}^{\mathbf{x}_0} \right\} = \frac{-3\hbar}{4M^2\Omega^3} \quad (7.78)$$

und (7.46) wird

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \left\{ \frac{-1}{2\hbar^2\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \left\langle [\mathbf{x}(\tau_1) - \mathbf{x}_0]^2 \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau_2)|} \right\rangle_{\Omega, c}^{\mathbf{x}_0} \right\} = \frac{1}{2\sqrt{\pi M \hbar \Omega^3}}. \quad (7.79)$$

Wir setzen die Beiträge (7.76), (7.78), (7.79) in die Korrektur (7.30) des effektiven Potentials ein, und erhalten zusammen mit der Approximation erster Ordnung (7.25) im Spezialfall $T = 0$ und $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$ das Ergebnis

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} W_{\Omega}^2(\mathbf{0}) = \frac{9}{16} \hbar \Omega(\mathbf{0}) + \frac{3}{2} \sqrt{\frac{M \Omega(\mathbf{0})}{\hbar \pi}} \alpha - \frac{4M}{\hbar^2 \pi} \left(1 + \ln 2 - \frac{\pi}{2}\right) \alpha^2. \quad (7.80)$$

Die Selbstkonsistenzgleichung (4.17) ist auch in zweiter Ordnung, wie schon im Tieftemperaturgrenzfall der ersten Ordnung, durch (7.26) gegeben. Aus (7.80) und (7.26) zusammengenommen, folgt unter Beachtung von (7.23) die zweite Approximation der Grundzustandsenergie des Coulombsystems zu

$$E_2 = -\frac{M}{\hbar^2 \pi} \alpha + 2 \frac{M}{\hbar^2 \pi} \alpha \sqrt{-\alpha} - \frac{4M}{\hbar^2 \pi} \left(1 + \ln 2 - \frac{\pi}{2}\right) \alpha^2 \quad (7.81)$$

und mit $\alpha = -1$

$$E_2 = -\frac{4M}{\hbar^2 \pi} \left(\frac{5}{4} + \ln 2 - \frac{\pi}{2}\right). \quad (7.82)$$

Zusammenfassend wird in natürlichen Einheiten, d.h. $\hbar = K_B = 1$ sowie $M = 1$, die Energieapproximation in zweiter Ordnung nach (7.82)

$$E_2 = -0.4741 J^*. \quad (7.83)$$

Demgegenüber beträgt die exakte Grundzustandsenergie $E_{\text{ex}} = 0.5 J^*$.

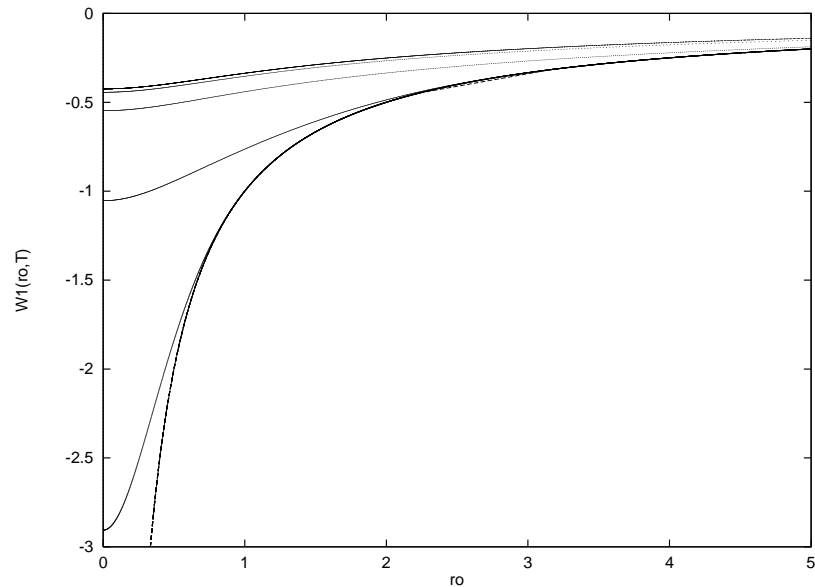


Abbildung 7.1: Der Potentialverlauf der ersten Approximation des effektiven Potentials vom Coulomb-System mit $\alpha = -1$ für verschiedene Temperaturen in natürlichen Einheiten. Die unterste Kurve gibt den exakten Potentialverlauf wieder. Die nächste darüberliegende Kurve stellt den Verlauf von $W_{\Omega}^1(r_0)$ bei $T = 1K^*$ dar. Die Temperaturen darüberliegender Kurven sind jeweils um eine Zehnerpotenz kleiner gewählt. Der verwendete Rechneralgorithmus ließ Berechnungen für Temperaturen $T \geq 10^{-7}K^*$ und Radien $r_0 \geq 0.0001m^*$ zu. An der Stelle $T = 10^{-7}K^*$, $r_0 = 0.0001m^*$ beträgt der numerisch berechnete Wert $W_{\Omega}^1 = -0.4246J^*$. Zum Vergleich: Die analytische Berechnung durch (7.25) und (7.26) liefert am Orts- und Temperaturnullpunkt $r_0 = T = 0$ das Ergebnis $W_{\Omega}^1 = -0.4244J^*$.

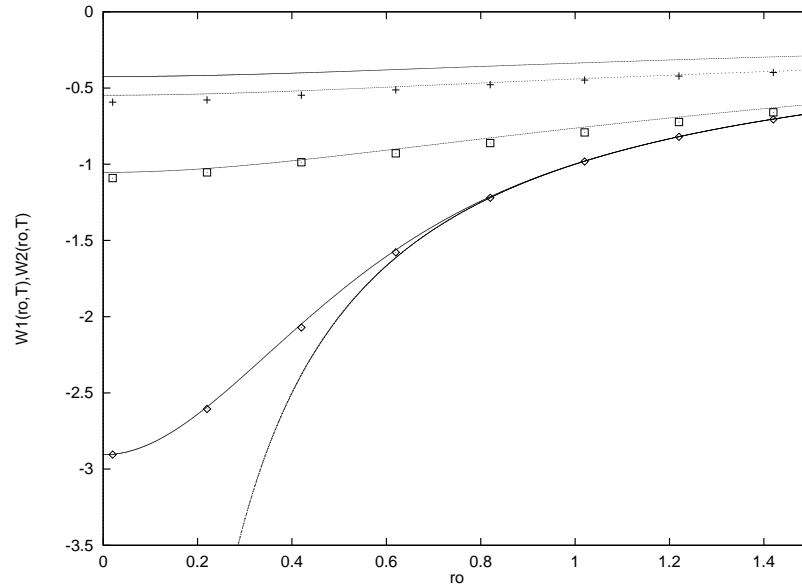


Abbildung 7.2: Der Potentialverlauf der ersten und der zweiten Approximation des effektiven Potentials. Die durchgezogenen Linien sind eine Auswahl von Kurven aus der Abbildung 7.1 zur ersten Approximation des effektiven Potentials. Die Punkt-Kurven entsprechen der zweiten Approximation des effektiven Potentials bei verschiedenen Temperaturen. Die unterste gilt bei $T = 1K^*$, die mittlere bei $T = 0.1K^*$ und die oberste bei $T = 0.01K^*$. Jeweils darüberliegende durchgezogene Kurven geben die erste Approximation zur selben Temperatur wieder. Die Differenzen am Ortsnullpunkt zwischen erster und zweiter Approximation ist bei $T = 0K^*$ analytisch berechnet worden und beträgt: $\delta = 0.050J^*$. Die Differenzen bei höheren Temperaturen werden aus den Zahlenwerten zur Abb. 7.2 bestimmt und betragen bei $T = 1K^*$: $\delta = 0.01J^*$, bei $T = 0.1K^*$: $\delta = 0.04J^*$ und bei $T = 0.01K^*$: $\delta = 0.05J^*$.

Kapitel 8

Das Coulomb-Problem in der Variationsstörungstheorie der Grundzustandsenergie

In [1, S. 177 ff.] wird gezeigt, daß im Tieftemperaturgrenzfall die N -ten Approximationen der Grundzustandsenergie, die sich der aus Variationsstörungstheorie für die quantenmechanische Zustandssumme und der Variationsstörungstheorie für die Energieeigenwerte ergeben, übereinstimmen, falls in beiden Formulierungen ein harmonischer Oszillator zur Approximation genutzt wird. Die Ergebnisse des letzten Kapitels sollen deshalb wie in Kapitel 4 angedeutet, auch durch die Variationsstörungstheorie für die Grundzustandsenergie erhalten werden. Dieses ist möglich, da die Freiheit der Variationsstörungstheorie an der Zustandssumme, das Oszillator-Potential als von der "klassischen" Koordinate x_0 abhängig zu betrachten, im Tieftemperaturgrenzfall wegfällt. Die allgemeine Vorgehensweise der Variationsstörungstheorie für die Energieeigenwerte wurde schon in Kapitel 5 erläutert. Gesucht ist eine Störungsreihe mit einem Variationsparameter zum niedrigsten Energieeigenwert vom Hamilton-Operator des Coulomb-Systems in Ortsdarstellung

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{\alpha}{|\mathbf{x}|} \quad (8.1)$$

mit dem Laplace-Operator Δ , der Konstanten $\alpha = -e^2$ und der Elementarladung e . Um die erwähnte Übereinstimmung mit den Ergebnissen

des letzten Kapitels zu erreichen, wird auch hier ein approximierender Oszillator, jedoch mit *fester* Frequenz Ω eingeführt:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{M}{2}\Omega^2\mathbf{x}^2 + \left(\frac{\alpha}{|\mathbf{x}|} - \frac{M}{2}\Omega^2\mathbf{x}^2\right). \quad (8.2)$$

Die Störungsentwicklung ist im Klammerausdruck vorzunehmen. Um die Rechnungen übersichtlich zu gestalten, wird ein indirekter Weg eingeschlagen.

8.1 Störungsreihe eines Hilfssystems

Es wird ein Hilfssystem mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H}^h = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{M}{2}\omega^2\mathbf{x}^2 + \frac{\alpha}{|\mathbf{x}|} \quad (8.3)$$

betrachtet, der im Ladungsquadrat α bis zur N -ten Ordnung störungsentwickelt wird. Die zu berechnenden Matrixelemente in den Korrekturen (5.16), (5.21) und (5.26) sind hierbei leichter zu berechnen. Nach dem Einsetzen der Frequenz

$$\omega := \sqrt{\Omega^2 - \gamma\frac{2\alpha}{M}} \quad (8.4)$$

und erneuter Entwicklung bis zur N -ten Ordnung in α , wird γ gewählt

$$\gamma := \frac{M\Omega^2}{2\alpha}, \quad (8.5)$$

was einer direkten Entwicklung von (8.2) bis zur N -ten Ordnung in α gleichkommt: Setzt man (8.4) in (8.3) ein, ergibt sich

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{M}{2}\Omega^2\mathbf{x}^2 + \alpha\left(\frac{1}{|\mathbf{x}|} - \gamma\mathbf{x}^2\right). \quad (8.6)$$

Mit der Wahl von γ in (8.5) stimmt (8.6) offensichtlich mit (8.2) überein. Im folgenden wird die N -te Partialsumme der Entwicklung der Grundzustandsenergie (5.6) des hilfswise eingeführten Hamilton-Operators (8.3) mit E_N^h bezeichnet, während diejenige des Operators (8.2) das Symbol E_N erhält.

8.2 Berechnung der Matrixelemente der Störungsreihe

In einem ersten Schritt wird der Hamilton-Operator des dreidimensionalen harmonischen Oszillators in (8.3) als \hat{H}_0 aufgefaßt, während das Coulomb-Potential die Störung $\epsilon\hat{V}$ darstellt. Als Kleinheitsparameter ϵ kann das Produkt der Ladungen α aufgefaßt werden. Im Temperaturnullpunkt ist der ungestörte Zustand der Grundzustand des dreidimensionalen harmonischen Oszillators, entsprechend ist die ungestörte Energie $E^{(0)} = \frac{3}{2}\hbar\omega$. Für die höheren Korrekturen (5.16), (5.21) und (5.26) sind die Matrixelemente, in der Diracschen Schreibweise

$$\langle n_r, m, l || \mathbf{x}^{-1} | n'_r, m', l' \rangle, \quad (8.7)$$

zu berechnen, wobei n_r, m, l bzw. n'_r, m', l' das dreier-Tupel der Quantenzahlen des dreidimensionalen harmonischen Oszillators darstellt. Um die Rotationssymmetrie des Coulomb-Systems auszunutzen, werden die Eigenfunktionen des dreidimensionalen harmonischen Oszillators in Kugelkoordinaten geschrieben [1, 9.76, 9.77, 9.84]

$$\begin{aligned} \psi_{n_r, l, m}(r, \theta, \phi) = & \frac{1}{r} \frac{\sqrt{2}}{\Gamma(\frac{3}{2} + l)} \sqrt{\frac{\Gamma(n_r + l + \frac{3}{2})}{n_r!}} \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} r^2\right)^{\frac{l+1}{2}} \\ & \exp\left(-\frac{M\omega r^2}{2\hbar}\right) {}_1F_1\left(-n_r, l + \frac{3}{2}, M\omega r^2/\hbar\right) Y_{l, m}(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (8.8)$$

wobei ${}_1F_1(-n_r, l + \frac{3}{2}, M\omega r^2/\hbar)$ die konfluent hypergeometrische Reihe (engl. "degenerate hypergeometric function", Reihendarstellung siehe [3, (9.210.1)] oder (8.28) mit $p = q = 1$) und $Y_{l, m}(\theta, \phi)$ die Kugelflächenfunktionen darstellen. Diese lassen sich ihrerseits durch zugeordnete Legendre-Polynome P_l^m ausdrücken [1, (8.84)]

$$Y_{l, m}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(l-m)!(2l+1)}{(l+m)!4\pi}} P_l^m(\cos\theta) \exp(im\phi). \quad (8.9)$$

Sie haben die Form [1, (8.86)]

$$P_l^m(z) = \frac{(1-z^2)^{\frac{m}{2}} (l-m)!}{2^l l! (l+m)!} \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2 - 1)^l. \quad (8.10)$$

Die Quantenzahlen nehmen die Werte $n_r = 0, 1, 2, \dots, l = 0, 1, 2, \dots$ und $-l \leq m \leq l$ an. Die zugehörigen Energieeigenwerte sind in diesen Koordinaten [1, (9.60)]

$$E_{n_r, l} = \hbar\omega \left(2n_r + l + \frac{3}{2} \right). \quad (8.11)$$

Man erkennt, daß nur im Grundzustand keine Entartung besteht. Schon für den ersten Anregungszustand, $n_r = 0$ und $l = 1$, besteht Entartung der Energie bezüglich der Quantenzahlen $m = -1, 0, 1$. Die vorliegende Rechnung kann demnach nicht zur Approximtion höherer Anregungszustände benutzt werden, da die Ableitung der Energiekorrekturen (5.16), (5.21) und (5.26) im 2.Kapitel eine Entartung der Zustände explizit ausschloß. Nutzt man die Orthonormalität der Kugelfunktionen [1, (8.90)]

$$\int_{-\pi}^{+\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d \cos \theta Y_{l', m'}(\theta, \phi) Y_{l, m}(\theta, \phi) = \delta_{l', l} \delta_{m, m'}, \quad (8.12)$$

folgt unmittelbar

$$\langle n_r, m, l | |\mathbf{x}|^{-1} | n'_r, m', l' \rangle = \delta_{l', l} \delta_{m, m'} V_{n_r, n'_r, l} \quad (8.13)$$

mit den Abkürzungen

$$V_{n_r, n'_r, l} := \int_0^{\infty} dr \frac{1}{r} R_{n_r, l}(r) R_{n'_r, l}(r) \quad (8.14)$$

und

$$R_{n_r, l}(r) =: \frac{1}{r} \frac{\sqrt{2}}{\Gamma(\frac{3}{2} + l)} \sqrt{\frac{\Gamma(n_r + l + \frac{3}{2})}{n_r!}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} r^2 \right)^{\frac{l+1}{2}} \exp\left(-\frac{M\omega r^2}{2\hbar} \right) {}_1F_1\left(-n_r, l + \frac{3}{2}, M\omega r^2 / \hbar \right). \quad (8.15)$$

Um die verbleibende r -Integration in (8.14) auszuführen, werden die konfluent hypergeometrischen Funktionen durch Laguerre-Polynome [3, 8.972.1] und Gamma-Funktionen dargestellt

$${}_1F_1\left(-n_r, l + \frac{3}{2}, M\omega r^2 / \hbar \right) = \frac{n_r! \Gamma(l + \frac{3}{2})}{\Gamma(n_r + l + \frac{3}{2})} L_{n_r}^{l + \frac{1}{2}} \left(\frac{M\omega r^2}{2\hbar} \right), \quad (8.16)$$

und es wird substituiert

$$u := \frac{M\omega}{\hbar} r^2. \quad (8.17)$$

Die Matrixelemente $V_{n_r, n'_r, l}$ gewinnen dabei die Form

$$V_{n_r, n'_r, l} = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} \sqrt{\frac{n_r! n'_r}{\Gamma(n_r + l + \frac{3}{2}) \Gamma(n'_r + l + \frac{3}{2})}} \int_0^\infty du u^l e^{-u} L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(u) L_{n'_r}^{l+\frac{1}{2}}(u). \quad (8.18)$$

Unter Verwendung der Integralformel [20, (2.19.14.15)]

$$\int_0^\infty dx x^{\alpha-1} e^{-cx} L_m^\gamma(cx) L_{m'}^\lambda(u) = \frac{(1+\gamma)_m (\lambda-\alpha+1)_{m'} \Gamma(\alpha)}{m! m'! c^\alpha} {}_3F_2(-m, \alpha, \alpha-\lambda; \gamma+1, \alpha-\lambda-m'; 1) \quad (8.19)$$

folgt mit $\alpha = l+1, c = 1, \gamma = \lambda = l + \frac{1}{2}, m = n_r$ und $m' = n'_r$ das vorläufige Ergebnis

$$V_{n_r, n'_r, l} = \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar}} \frac{\Gamma(l+1) \Gamma(n_r + \frac{1}{2})}{\Gamma(l + \frac{3}{2})} \sqrt{\frac{\Gamma(n'_r + l + \frac{3}{2})}{n_r! n'_r! \Gamma(n_r + l + \frac{3}{2})}} {}_3F_2(-n'_r, l+1, \frac{1}{2}; l + \frac{3}{2}, \frac{1}{2} - n_r; 1) \quad (8.20)$$

wobei ${}_3F_2$ eine verallgemeinerte hypergeometrische Funktion darstellt. Um die Berechnungen spezieller Matrixelemente vorzubereiten, werden diese und einige andere Funktionen kurz erläutert.

Gamma-Funktion

Diese Funktion genügt dem Legendreschen Verdopplungssatz [19, S. 331]

$$\Gamma(x) \Gamma(x + \frac{1}{2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2x-1}} \Gamma(2x), \quad (8.21)$$

der Funktionalgleichung

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad \text{mit} \quad \Gamma(1) = 1 \quad (8.22)$$

sowie dem Ergänzungssatz

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin x\pi} \quad \text{für } 0 \leq x \leq 1. \quad (8.23)$$

Darüber hinaus beziehen wir uns auf das Pochhammer Symbol.

Pochhammer Symbol

Es ist allgemein durch

$$(\alpha)_k = \alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\dots(\alpha+k-1) \quad (8.24)$$

und

$$(\alpha)_0 = 1 \quad (8.25)$$

definiert, woraus

$$(1)_k = k!, \quad (0)_k = \delta_{k,0} \quad (8.26)$$

und mit (8.22)

$$(\alpha)_k = \frac{\Gamma(\alpha+k)}{\Gamma(\alpha)} \quad (8.27)$$

für nichtnegative ganze Zahlen k folgen. Das Pochhammer-Symbol erscheint in der Reihendarstellung der verallgemeinerten hypergeometrischen Reihe aus (8.20), die hier ebenfalls kurz diskutiert wird.

Verallgemeinerte hypergeometrische Funktion

Die Reihendarstellung der verallgemeinerten hypergeometrischen Funktion lautet [3, 9.14.1]

$${}_pF_q(\alpha_1, \dots, \alpha_p; \beta_1, \dots, \beta_q; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha_1)_k, \dots, (\alpha_p)_k}{(\beta_1)_k, \dots, (\beta_q)_k} \frac{z^k}{k!}. \quad (8.28)$$

Ist $p = 3$ und $q = 2$, ergibt sich

$${}_3F_2(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \beta_1, \beta_2; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha_1)_k, (\alpha_2)_k, (\alpha_3)_k}{(\beta_1)_k, (\beta_2)_k} \frac{z^k}{k!}. \quad (8.29)$$

Betrachten wir speziell ${}_3F_2(0, 1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; 1)$, so liefern die Formeln (8.26) und (8.29) unmittelbar

$${}_3F_2(0, 1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; 1) = 1. \quad (8.30)$$

Analog folgt für ${}_3F_2(0, 1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2} - n; 1)$ mit natürlichen Zahlen n :

$${}_3F_2(0, 1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2} - n; 1) = 1. \quad (8.31)$$

Die Reihe ${}_3F_2(-n, 1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; 1)$ ergibt für natürlichen Zahlen n nach kurzer Rechnung

$${}_3F_2(-n, 1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; 1) = {}_2F_1(-n, 1; \frac{3}{2}; 1). \quad (8.32)$$

Unter Verwendung von [3, 9.122.1]

$${}_2F_1(-n, 1; \frac{3}{2}; 1) = \frac{\Gamma(3/2)\Gamma(3/2 + n + 1)}{\Gamma(3/2)\Gamma(3/2 - 1)} \quad (8.33)$$

sowie den Formeln (8.21), (8.22) und (8.23) folgt schließlich der Ausdruck

$${}_3F_2(-n, 1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; 1) = \frac{1/2}{n + 1/2}. \quad (8.34)$$

8.3 Erste Korrektur der Grundzustandsenergie

Diese Vorbereitungen ermöglichen es, die erste Korrektur in der Störungsentwicklung der Grundzustandsenergie als Spezialfall von (5.6) zu bestimmen. Sie besteht laut (5.16) aus dem Matrixelement (8.20) mit $n_r = n'_r = l = 0$. Es lautet

$$V_{0,0,0} = \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar}} \frac{\Gamma(1)\Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{3}{2})} {}_3F_2(0, 1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; 1). \quad (8.35)$$

Die Anwendung der Funktionalgleichung (8.22) und vom Ergebnis (8.30) ergeben so

$$E_0^{(1)} = \langle 0, 0, 0 || |\mathbf{x}|^{-1} | 0, 0, 0 \rangle = V_{0,0,0} = 2\sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar}}. \quad (8.36)$$

8.4 Zweite Korrektur der Grundzustandsenergie

Hier werden Spezialfälle von (8.20) mit $n_r = l = 0$ und allgemeinem n'_r betrachtet. Es folgt

$$V_{0,n'_r,0} = \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar}} \frac{\Gamma(1)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \sqrt{\frac{\Gamma\left(n'_r + \frac{3}{2}\right)}{n'_r! \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}} {}_3F_2\left(-n'_r, 1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; 1\right). \quad (8.37)$$

Setzt man dagegen $n'_r = l = 0$ für allgemeines n_r , wird die in (8.18) erkennbare Symmetrie in n_r und n'_r bestätigt, also $V_{0,n'_r,0} = V_{n_r,0,0}$. Unter Verwendung der Formeln (8.21), (8.22) und (8.23) folgt

$$\frac{\Gamma\left(n'_r + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} = \frac{(2n'_r + 1)(2n'_r - 1)!}{2^{2n'_r-1}(n'_r - 1)!}. \quad (8.38)$$

Damit und mit (8.32) ergibt sich für das Matrixelement

$$\langle 0, 0, 0 || \mathbf{x} |^{-1} | n'_r, 0, 0 \rangle = V_{0,n'_r,0} = \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar}} \frac{(2n'_r - 1)!}{(n'_r - 1)! 2^{n'_r-2} \sqrt{(2n'_r + 1)!}}. \quad (8.39)$$

Der zweite Term in der Störungsentwicklung der Grundzustandsenergie ist laut (5.21) mit den Energieeigenwerten (8.11) und dem Matrixelement (8.39) die Summe

$$E_0^{(2)} = -\frac{4M}{\pi\hbar^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!}{[(2n)!!]^2} \frac{1}{2n+1}. \quad (8.40)$$

Die auftretende Summe wird im Anhang A ausgewertet, so daß sich (8.40) auf

$$E_0^{(2)} = -\frac{4M}{\pi\hbar^2} \left(1 - \frac{\pi}{2} + \ln 2\right) \quad (8.41)$$

reduziert.

8.5 Dritte Korrektur der Grundzustandsenergie

Die dritte Energiekorrektur hat die allgemeine Form (5.26). Sie wird für den Grundzustand mit den Matrixelementen (8.20), (8.36) und (8.39)

$$\begin{aligned}
 E_0^{(3)} = & \sqrt{\frac{M}{\hbar^7 \pi \omega}} \left\{ 2 \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=1}^{n-1} {}_3F_2\left(-m, 1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2} - n; 1\right) \right. \\
 & \times \frac{(2n-1)!(2m-1)!\Gamma(n+1/2)\sqrt{\Gamma(m+3/2)}}{\sqrt{n!m!}^3 2^{(n+m-2)}\Gamma(3/2)\sqrt{(2n+1)!(2m+1)!\Gamma(n+3/2)}} \\
 & + \sum_{n=1}^{\infty} {}_3F_2\left(-n, 1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2} - n; 1\right) \frac{[(2n-1)!]^2\Gamma(n+1/2)}{n!^3 2^{(2n-2)}(2n+1)!\Gamma(3/2)} \\
 & \left. - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[(2n-1)!]^2}{n!^2 2^{(2n-2)}(2n+1)!} \right\}. \quad (8.42)
 \end{aligned}$$

(5.26) enthält eine indefinite Doppelsumme, die durch die Symmetrie der Summanden in den Indizes n und m in eine gewöhnliche indefinite Summe und eine indefinite Summe über eine endliche Summe zerlegt werden kann, was die Berechnung erleichtert. Der Ausdruck wird numerisch ausgewertet und ergibt den Korrekturfaktor

$$E_0^{(3)} = 0.0317 \sqrt{\frac{M}{\hbar^7 \pi \omega}}. \quad (8.43)$$

8.6 Störungsreihe bis zur dritten Ordnung

Die Störungsentwicklung der Grundzustandsenergie des Hamiltonoperators (8.3) bis zur dritten Ordnung in Potenzen von α wird damit

$$E_3^h = \hbar\omega \frac{3}{2} + \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar\pi}} 2\alpha - \frac{4M}{\pi\hbar^2} \left(1 - \frac{\pi}{2} + \ln 2\right) \alpha^2 + 0.0317 \sqrt{\frac{M}{\hbar^7 \pi \omega}} \alpha^3. \quad (8.44)$$

8.7 Umsummation der Störungsreihe: Variationsstörungsreihe des Coulomb- Systems bis zur dritten Ordnung

In der nullten Näherung stimmen die Störungsentwicklungen der Grundzustandsenergie von (8.2) und (8.3) überein. Um die Störungsentwicklung zur höheren Ordnung im Klammerausdruck vom Hamiltonoperator (8.2) zu berechnen, wird die Entwicklung von (8.3) nach der Ersetzung (8.4) erneut in eine Potenzreihe in α entwickelt. Es folgt nach dem Einsetzen von (8.5) die Störungsentwicklung erster Ordnung

$$E_1 = \frac{3}{4}\hbar\Omega + \sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar\pi}}2\alpha. \quad (8.45)$$

Dieser Ausdruck stimmt offensichtlich mit (7.25) überein, wie durch die Beziehung (7.23) vorausgesagt. Für die Störungsentwicklung bis zur zweiten Ordnung ergibt sich

$$E_2 = \frac{9}{16}\hbar\Omega + \frac{3}{2}\sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar\pi}}\alpha - \frac{4M}{\hbar^2\pi}(1 + \ln 2 - \frac{\pi}{2})\alpha^2, \quad (8.46)$$

in Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus Kapitel 7 in Formel (7.25) und (7.80). Die optimale Variationsfrequenz Ω wird nach der Gleichung (2.24) bestimmt und ist für E_1 und E_2 identisch:

$$\Omega = -\frac{16M\alpha}{9\hbar^3\pi}. \quad (8.47)$$

Die Störungsentwicklung dritter Ordnung wird

$$E_3 = \frac{15}{32}\hbar\Omega + \frac{21}{16}\sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar\pi}}\alpha - \frac{4M}{\hbar^2\pi}(1 + \ln 2 - \frac{\pi}{2})\alpha^2 + 0.0317\sqrt{\frac{M}{\hbar^7\pi\Omega}}\alpha^3 \quad (8.48)$$

und die Forderung (2.24) zur Bestimmung von Ω lautet

$$0 = 15\sqrt{\Omega}^3 - \frac{21}{\sqrt{\pi}}\Omega + 16 \times 0.0317\sqrt{\frac{M}{\hbar^7\pi}}. \quad (8.49)$$

Sie kann im Gegensatz zu den Bestimmungsgleichungen der Frequenzen bis zur zweiten Ordnung nicht mehr analytisch, sondern nur noch numerisch gelöst werden und liefert mit natürlichen Einheiten, $M = 1$ und

$\alpha = -1$ die optimale Variationsfrequenz $\Omega = 0.5264(s^*)^{-1}$ und damit die dritte Approximation der Grundzustandsenergie

$$E_3 = -0.490J^* . \tag{8.50}$$

Kapitel 9

Ausblick

In vorliegender Arbeit ist die Pfadintegral-Formulierung der quantenmechanischen Zustandssumme der Ausgangspunkt für die Entwicklung der Variationsstörungstheorie. Von noch größerer Allgemeinheit jedoch ist die Untersuchung der Dichtematrix, die wie in Kapitel 1 definiert, die Berechnung von Erwartungswerten beliebiger Observabler gestattet, und durch Spurbildung auf die Zustandssumme selbst führt. Wenn man die Variationsstörungstheorie auf die Dichtematrix übertragen möchte, führt dieses auf Erwartungswerte

$$\frac{1}{Z_{\Omega}^{x_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \int_{(x_a,0) \rightsquigarrow (x_b,\hbar\beta)} \mathcal{D}x(\tau) \delta(\bar{x} - x_0) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}[x(\tau)] \right\} \times F_1(x(\tau_1)) \dots F_N(x(\tau_N)). \quad (9.1)$$

Die nichtperiodischen Pfade führen von $x_a(0)$ nach $x_b(\hbar\beta)$, so daß eine Fourierzerlegung des Pfades zur Auswertung nicht mehr möglich ist. Es wurden hierzu schon Methoden konstruiert, die Pfadintegrale wie (9.1) auf solche über periodische Bahnen zurückführen. Dabei wird eine Zerlegung des Pfades in eine nicht geschlossene klassische Bahn und einen verbleibenden periodischen Pfadanteil vorgenommen [1], oder es werden durch eine Grenzwertvertauschung periodische Bahnen erzeugt [15]. Die im Kapitel 4 dieser Arbeit entwickelte Methode der Fouriertransformation im Pfadintegral zur Herleitung der Verschmierungsformel kann die bestehenden Techniken ergänzen, da sie ganz ohne die Voraussetzung periodischer Pfade auskommt. Der nächste Schritt besteht also darin, die Variationsstörungstheorie für die Zustandssumme so auf die Dichtematrix zu übertragen, daß sich erstere als Spezialfall der zweiten ergibt.

Eine weitere Entwicklungsmöglichkeit stellt die Abkehr vom Standard-Hamilton-Operator hin zu dissipativen quantenmechanischen Systemen dar, die eine besonders wichtige Anwendung der Näherungsverfahren darstellen, da sie in der Regel nicht explizit analytisch lösbar sind [15].

Anhang A

Berechnung von Reihen

Reihen lassen sich oft unter Zuhilfenahme des Residuensatzes aus der Funktionentheorie berechnen. Er lautet [19, 3.4.8.2]

$$\oint_C dz f(z) = 2\pi i \sum_j \operatorname{Res} f(z) \Big|_{z=z_j} \quad (\text{A.1})$$

mit einer im Gebiet G mit stetiger Randkurve C , bis auf isolierte Singularitäten $z_1, z_2 \dots$ analytischen Funktion $f(z)$. Hat eine Funktion $f(z)$ einen Pol k -ter Ordnung an der Stelle z_0 , so läßt sich das Residuum durch [19, 3.4.8.1]

$$\operatorname{Res} f(z) \Big|_{z=z_0} = \frac{1}{(k-1)!} \lim_{z \rightarrow z_0} \left\{ \frac{d^{k-1}}{dz^{k-1}} \left((z-z_0)^k f(z) \right) \right\} \quad (\text{A.2})$$

berechnen. Das Verfahren soll hier auf zwei Reihen angewandt werden.

A.1 Summation der Zweipunktkorrelationen

In diesem Abschnitt wird die Reihe

$$\frac{2}{M\beta} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\cos(\omega_m(\tau_1 - \tau_2))}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)} \quad (\text{A.3})$$

mit den Matsubara-Frequenzen

$$\omega_m = \frac{2\pi}{\hbar\beta} m \quad (\text{A.4})$$

berechnet. Da die Summation für jedes feste x_0 ausgeführt wird, soll dieses Argument nicht mehr erwähnt werden. Es muß nun eine Funktion $f(z)$ gewählt werden, so daß zum einen die Residuen in einem gewissen Gebiet G die Reihe (A.3) ergeben, und gleichzeitig die Anforderungen an die Analytizität erfüllt sind. Zusätzlich soll die Funktion für große Werte von z auch noch stärker als $1/|z|$ verschwinden, denn dann, so zeigt sich, fällt das Kurvenintegral in (A.1) im Unendlichen weg, und es verbleibt die einfache Berechnung einiger Residuen. Dazu betrachten wir die Funktion

$$f(z) := \frac{\pi}{\left(\frac{2\pi}{\hbar\beta}z - i\Omega\right)\left(\frac{2\pi}{\hbar\beta}z + i\Omega\right)} \frac{\cos\left(\frac{2\pi}{\hbar\beta}|\tau_1 - \tau_2|z - \pi z\right)}{\sin \pi z}, \quad (\text{A.5})$$

die über Singularitäten bei allen ganzen Zahlen und bei $z = \pm i\Omega\hbar\beta/2\pi$ verfügt.

Bei den Singularitäten von $f(z)$ handelt es sich ausschließlich um einfache Pole, deren Residuen wie folgt ausgewertet werden. An den Stellen, an denen z eine ganze Zahl m ist, lautet der Grenzprozeß:

$$\begin{aligned} \text{Res}f(z)|_{z=m} &= \lim_{z \rightarrow m} \{(z - m)f(z)\} \\ &= \frac{\cos\left(\frac{2\pi}{\hbar\beta}|\tau_1 - \tau_2|m\right)}{\left(\frac{2\pi}{\hbar\beta}m - i\Omega\right)\left(\frac{2\pi}{\hbar\beta}m + i\Omega\right)} \\ &= \frac{\cos(\omega_m(\tau_1 - \tau_2))}{\omega_m^2 + \Omega^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Die anderen beiden Residuen haben den Wert

$$\begin{aligned} \text{Res}f(z)|_{z=\pm\frac{i\Omega\hbar\beta}{2\pi}} &= \lim_{z \rightarrow \mp\frac{i\Omega\hbar\beta}{2\pi}} \left[\left(z \pm \frac{i\Omega\hbar\beta}{2\pi}\right) f(z) \right] \\ &= -\frac{\hbar\beta}{4\Omega} \left(\frac{\cosh(\Omega|\tau_1 - \tau_2| - \hbar\Omega\beta/2)}{\sinh \hbar\Omega\beta/2} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Die Funktion $f(z)$ hat darüber hinaus die Eigenschaft, für große z stärker als $1/|z|$ zu verschwinden, sofern man die Singularitäten der Sinus-Funktion auf der reellen Achse umgeht:

$$f(z) \sim \frac{1}{|z|^{1+\epsilon}}, \quad \epsilon > 0. \quad (\text{A.8})$$

Wählt man als Kurve C einen Kreis um den Ursprung, der die reelle Achse jeweils zwischen zwei ganzen Zahlen schneidet, d.h. dessen Radius $r = n + \frac{1}{2}$ ist, so läßt sich für genügend große n abschätzen

$$\oint_{C_{\text{Kreis}(n+\frac{1}{2})}} dz f(z) < \frac{K}{(n + \frac{1}{2})^\epsilon}, \quad (\text{A.9})$$

mit einer Konstanten K . Deshalb verschwindet die rechte Seite von (A.1) für Kreise C_{Kreis} im Limes $n \rightarrow \infty$. Im selben Grenzwert jedoch werden alle Singularitäten von $f(z)$ durch C_{Kreis} eingeschlossen, so daß die Summe auf der rechten Seite über alle Residuen zu führen ist. Die Gleichung (A.1) reduziert sich dann auf

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{\cos(\omega_m(\tau_1 - \tau_2))}{\omega_m^2 + \Omega^2} - \frac{\hbar\beta}{2\Omega} \left(\frac{\cosh(\Omega|\tau_1 - \tau_2| - \hbar\Omega\beta/2)}{\sinh \hbar\Omega\beta/2} \right) \quad (\text{A.10}) \\ &= 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\cos(\omega_m(\tau_1 - \tau_2))}{\omega_m^2 + \Omega^2} + \frac{1}{\Omega^2} - \frac{\hbar\beta}{2\Omega} \left(\frac{\cosh(\Omega|\tau_1 - \tau_2| - \hbar\Omega\beta/2)}{\sinh \hbar\Omega\beta/2} \right). \end{aligned}$$

Die gewünschte Summe (A.3) ist nun abzulesen. Sie hat die geschlossene Form

$$\begin{aligned} &\frac{2}{M\beta} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\cos(\omega_m(\tau_1 - \tau_2))}{\omega_m^2 + \Omega^2} \\ &= \frac{\hbar}{2M\Omega} \left(\frac{\cosh(\Omega|\tau_1 - \tau_2| - \hbar\Omega\beta/2)}{\sinh \hbar\Omega\beta/2} - \frac{2}{\hbar\Omega\beta} \right). \quad (\text{A.11}) \end{aligned}$$

Um die Eigenschaft (A.8) nachzuweisen, genügt es, die Beschränktheit von

$$(\omega_m^2 + \Omega^2) f(z) \quad (\text{A.12})$$

zu zeigen. Dazu schreibt man (A.12) als

$$\frac{\cos\left(\frac{2\pi}{\hbar\beta}|\tau_1 - \tau_2|z - \pi z\right)}{\sin \pi z} = \frac{\cos \alpha z}{\sin \pi z}. \quad (\text{A.13})$$

mit der Größe $\alpha := \frac{2\pi}{\hbar\beta}|\tau_1 - \tau_2| - \pi$. Hier erkennt man deutlich die Singularitäten auf der reellen Achse, die angemessen umlaufen werden

müssen. Für Differenzen $|\tau_1 - \tau_2| \leq \hbar\beta$ kann man den Betrag von (A.13) abschätzen:

$$\left| \frac{e^{(-i\alpha x + \alpha y)} + e^{(+i\alpha x - \alpha y)}}{e^{(-i\pi x + \pi y)} - e^{(+i\pi x - \pi y)}} \right| \leq \frac{e^{+\alpha y} + e^{-\alpha y}}{|e^{+\pi y} - e^{-\pi y}|} \quad (\text{A.14})$$

mit $z = x + iy$ und $\alpha \leq \pi$. Dieser Ausdruck bleibt für alle $x \neq n$ und alle y beschränkt.

Insgesamt folgt, daß (A.11) nur für $|\tau_1 - \tau_2| \leq \hbar\beta$ gilt, was jedoch keine wesentliche Einschränkung darstellt, da die relevanten Integrationen nur für $0 \leq \tau_j \leq \hbar\beta$ mit $j = 1, 2$ geführt werden. Im Fall $\tau_1 \rightarrow \tau_2$ geht (A.3) in (3.15) über, und entsprechendes gilt auch für die geschlossene Form (A.11).

A.2 Summation der zweiten Energiekorrektur

Eine weitere Summe, die in Gleichung (8.40) auftrat, wird auf schlichtere Weise gebildet: Der direkte Vergleich mit der Taylorentwicklung einer transzendenten Funktion führt hier schon zum Erfolg. Mit der Definition

$$f(x) := \frac{1}{2 \cdot 3}x + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4 \cdot 5}x^3 + \dots + \frac{1 \cdot 3 \dots (2n-1)}{2 \cdot 4 \dots (2n)(2n+1)}x^{(2n-1)} + \dots \quad (\text{A.15})$$

folgt einerseits

$$f(1) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!}{[(2n)!!]^2} \frac{1}{2n+1} \quad (\text{A.16})$$

und andererseits nach [19, S. 33]

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{\arcsin x}{x^2} - \frac{1}{x}. \quad (\text{A.17})$$

Mathematisch gesehen ist (A.17) eine inhomogene Differentialgleichung erster Ordnung in $f(x)$, deren Lösung im Intervall $(0, 1]$ durch die Randbedingung $f(0) = 0$ eindeutig gemacht wird:

$$f(x) = 1 + \ln 2 - \frac{1}{x} \arcsin x - \ln(1 + \sqrt{1-x^2}). \quad (\text{A.18})$$

Mit (A.16) und (A.18) erhält man also als Ergebnis für die in (8.40) auftretende Reihe:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!}{[(2n)!!]^2} \frac{1}{2n+1} = 1 - \frac{\pi}{2} + \ln 2. \quad (\text{A.19})$$

Anhang B

Gaußintegration in mehreren Dimensionen durch Variablensubstitution

Das Integral (3.39) soll durch Variablensubstitution gelöst werden. Sind allgemein Integrationsvariablen durch einen Satz neuer Koordinaten gegeben $k_j = k_j(h_1 \dots h_N)$, kurz $\mathbf{k} = \mathbf{k}(\mathbf{h})$, so gilt für das Integral über eine Funktion $\phi(\mathbf{k}) := \phi(k_1 \dots k_N)$

$$\int_G d^N \mathbf{k} \phi(\mathbf{k}) = \int_{G'} d^N \mathbf{h} \left| \frac{\partial(k_1 \dots k_N)}{\partial(h_1 \dots h_N)} \right| \phi(\mathbf{k}(\mathbf{h})) \quad (\text{B.1})$$

mit der Funktionaldeterminante $\left| \frac{\partial(k_1 \dots k_N)}{\partial(h_1 \dots h_N)} \right|$ und dem Urbild G' . Ausgangspunkt der Umformungen sei hier der Exponent aus (3.39):

$$i\mathbf{k}^T \mathbf{y} - \frac{1}{2} \mathbf{k}^T A \mathbf{k}. \quad (\text{B.2})$$

Über die Komponenten des Vektors \mathbf{k} wird integriert. Diese Variablen werden durch den Übergang zu

$$\mathbf{h} := A^{\frac{1}{2}} \mathbf{k} + iA^{-\frac{1}{2}} \mathbf{y} \quad (\text{B.3})$$

ersetzt. Die Matrix $A^{\frac{1}{2}}$ ist dabei so zu wählen, daß $A^{\frac{1}{2}} A^{\frac{1}{2}} = A$ gilt. Aus dem Exponenten (B.2) wird so

$$-\frac{1}{2} \mathbf{h}^T \mathbf{h} - \frac{1}{2} \mathbf{y}^T A^{-1} \mathbf{y}. \quad (\text{B.4})$$

In den neuen Variablen ist damit der Exponent auf quadratische Form gebracht. Die Funktionaldeterminante hat aufgrund von

$$\left| \frac{\partial(k_1 \dots k_N)}{\partial(h_1 \dots h_N)} \right| = \left| \frac{\partial(h_1 \dots h_N)}{\partial(k_1 \dots k_N)} \right|^{-1} \quad (\text{B.5})$$

und der Definition (B.3) die Form

$$\left| \frac{\partial(k_1 \dots k_N)}{\partial(h_1 \dots h_N)} \right| = \det(A^{\frac{1}{2}}) = \frac{1}{\sqrt{(\det A)}}. \quad (\text{B.6})$$

Mit der Substitution (B.3)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \exp \left\{ -i\mathbf{k}^T \mathbf{y} + \frac{1}{2} \mathbf{k}^T A \mathbf{k} \right\} \quad (\text{B.7})$$

wird aus (3.39) unter Verwendung von (B.1), (B.4) und (B.6)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^N \mathbf{h}}{\sqrt{(\det A)(2\pi)^N}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{h}^T \mathbf{h} - \frac{1}{2} \mathbf{y}^T A^{-1} \mathbf{y} \right\}. \quad (\text{B.8})$$

Die \mathbf{h} -Integrationen lassen sich ausführen und liefern den Faktor $\sqrt{2\pi}^N$. Das Ergebnis ist demnach

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \exp \left\{ -i\mathbf{k}^T \mathbf{y} + \frac{1}{2} \mathbf{k}^T A \mathbf{k} \right\} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N (\det A)}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{y}^T A^{-1} \mathbf{y} \right\}. \quad (\text{B.9})$$

Anhang C

Der Stromterm in der Wirkung eines Pfadintegrals

In der vorliegenden Arbeit tauchten Pfadintegrale auf, deren Wirkung neben dem kinetischen Anteil und einem quadratische Term im Pfad aus einem linearen Stromterm besteht. Wenden wir uns zunächst der Berechnung der Zustandssumme zu.

C.1 Berechnung der Zustandssumme eines harmonischen Oszillators mit Strom-ankopplung

Die Berechnung soll auf das als bekannt vorausgesetzte Pfadintegral des gewöhnlichen harmonischen Oszillators ([1], Kap 2) zurückgeführt werden. Gegeben sei also

$$Z[j(\tau)] = \oint \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_j[x(\tau)] \right\} \quad (\text{C.1})$$

mit der euklidischen Wirkung

$$\mathcal{A}_j[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{x}(\tau)^2 + \frac{M\omega^2}{2} x(\tau)^2 - j(\tau)x(\tau) \right\}. \quad (\text{C.2})$$

Der kinetische Anteil in der Wirkung (C.2) wird partiell integriert

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_j[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ -\frac{M}{2} x(\tau)\ddot{x}(\tau) + \frac{M\omega^2}{2} x(\tau)^2 - j(\tau)x(\tau) \right\} \\ + \frac{M}{2} x(\tau)\dot{x}(\tau) \Big|_0^{\hbar\beta}. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Die Periodizität der Pfade $x(0) = x(\hbar\beta)$ und der Zeitableitungen der Pfade $\dot{x}(0) = \dot{x}(\hbar\beta)$ lassen den letzten Term in (C.3) verschwinden. Weiterhin wird die Identität

$$\ddot{x}(\tau) = \frac{\partial^2}{\partial\tau^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \delta(\tau - \tau') x(\tau') \quad (\text{C.4})$$

eingesetzt, so daß (C.2) mit dem Differentialoperator

$$D(\tau, \tau') := \left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} + \omega^2 \right) \delta(\tau - \tau') \quad (\text{C.5})$$

die Form

$$\mathcal{A}[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \frac{M}{2} x(\tau) D(\tau, \tau') x(\tau') - \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau) x(\tau) \quad (\text{C.6})$$

gewinnt. Die Inverse des Differentialoperator $D(\tau, \tau')$ ist definiert durch

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau' D(\tau, \tau') D^{-1}(\tau', \tau'') = \delta(\tau - \tau''). \quad (\text{C.7})$$

Diese Matrix $D^{-1}(\tau, \tau')$ geht aus (C.7) jedoch nicht eindeutig hervor, vielmehr folgt, daß gelten muß:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} + \omega^2 \right) D^{-1}(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau'). \quad (\text{C.8})$$

Diese Differentialgleichung erfüllt jedoch eine ganze Funktionenklasse, deren Elemente Greens-Funktionen heißen. Je zwei Greens-Funktionen können sich durch eine beliebige Lösung der Differentialgleichung des harmonischen Oszillators unterscheiden. Diese Unbestimmtheit wird durch

die Forderung von Randbedingungen beseitigt. Die Greens-Funktion $D^{-1}(\tau, \tau')$ ist Lösung von (C.8) sowohl in τ als auch in τ' . Aus der Theorie der Differentialgleichungen ist bekannt, daß jede der Lösungen durch zwei Randbedingungen festgelegt wird, da es sich um Differentialgleichungen zweiter Ordnung handelt. Es soll hier gefordert werden

$$\begin{aligned} D^{-1}(0, \tau) &= D^{-1}(\hbar\beta, \tau) = 0, \\ D^{-1}(\tau, 0) &= D^{-1}(\tau, \hbar\beta) = 0 \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

für alle τ aus dem Intervall $(0, \hbar\beta)$. Die Funktion, die diese Bedingungen erfüllt, wird mit $G(\tau, \tau')$ bezeichnet. Sie heißt periodische Greens-Funktion. Die Pfade in (C.6) werden substituiert

$$y(\tau) := x(\tau) + \frac{1}{M} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' G(\tau, \tau') j(\tau'), \quad (\text{C.10})$$

wobei das Pfadmaß $\mathcal{D}x(\tau) = \mathcal{D}y(\tau)$ invariant bleibt. Unter Verwendung der Definitionen (C.5), (C.7) und (C.10) in die Wirkung (C.6) ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[x(\tau)] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \frac{M\omega^2}{2} x(\tau) D(\tau, \tau') x(\tau') \\ &- \frac{1}{2M} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) D^{-1}(\tau, \tau') j(\tau') - \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau) x(\tau) \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int_0^{\hbar\beta} d\tau'' D^{-1}(\tau, \tau') j(\tau') D(\tau, \tau'') x(\tau''). \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

Wählt man $G(\tau, \tau') = D^{-1}(\tau, \tau')$ so folgt nach zweimaliger partieller Integration in der letzten Zeile von (C.11), da die Randterme wegen (C.9) verschwinden

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int_0^{\hbar\beta} d\tau'' G(\tau, \tau') j(\tau') \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \omega^2 \right) \delta(\tau - \tau'') x(\tau'') \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau) x(\tau) \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

und damit

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[x(\tau)] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \frac{M\omega^2}{2} x(\tau) D(\tau, \tau') x(\tau') \\ &\quad - \frac{1}{2M} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) G(\tau, \tau') j(\tau'). \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Jetzt hängt nur noch die erste Zeile in (C.13) vom Pfad ab. Dieser Teil der Wirkung ist aber schlicht der eines harmonischen Oszillators, so daß dessen Zustandssumme [1, 2.278]

$$Z_\omega = \frac{1}{2 \sinh \frac{\omega \hbar \beta}{2}} \quad (\text{C.14})$$

hier nur als Vorfaktor eingeht. Es folgt insgesamt

$$\begin{aligned} Z &= \oint \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{x}(\tau)^2 + \frac{M\omega^2}{2} x(\tau)^2 - j(\tau)x(\tau) \right\} \right\} \\ &= \frac{1}{2 \sinh \frac{\omega \hbar \beta}{2}} \exp \left\{ \frac{1}{2M\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) G(\tau, \tau') j(\tau') \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Verschiebt man den Pfad durch $y(\tau) := x(\tau) - x_0$, bleiben Pfadmaß $\mathcal{D}x(\tau) = \mathcal{D}y(\tau)$ und kinetischer Term $\dot{y}(\tau)^2 = \dot{x}(\tau)^2$ invariant, und es gilt

$$\begin{aligned} Z[j(\tau)] &= \oint \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_\omega^{x_0}[x(\tau)] - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau j(\tau)(x(\tau) - x_0) \right\} \\ &= \frac{1}{2 \sinh \frac{\omega \hbar \beta}{2}} \exp \left\{ \frac{1}{2M\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) G(\tau, \tau') j(\tau') \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

mit der Wirkung $\mathcal{A}_\omega^{x_0}[x(\tau)]$ wie in (2.11) und $\omega = \Omega(x_0)$. Es bleibt die Bestimmung der Funktion $G(\tau, \tau')$, was nach der Vorarbeit in Anhang A leicht zu erledigen ist. Es ist die Differentialgleichung (C.8) mit den Randbedingungen (C.9) zu lösen. Da die Lösung symmetrisch in τ und

τ' ist, liegt ein Ansatz von $G(\tau, \tau') = G(|\tau - \tau'|)$ nahe. Weiterhin soll die Lösung nach ebenen Wellen entwickelt werden. Die periodischen Randbedingungen werden durch den Lösungsansatz in Form einer Fourierreihe mit den Matsubara Frequenzen wie in Gleichung (3.2) automatisch eingehalten

$$G(\tau, \tau') = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} c_m \exp(i\omega_m |\tau - \tau'|), \quad (\text{C.17})$$

mit Koeffizienten c_m , die durch Einsetzen in (C.8) bestimmt werden. Es folgt

$$\frac{1}{\hbar\beta} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \omega^2} \exp(i\omega_m |\tau - \tau'|). \quad (\text{C.18})$$

Die Summe trat schon in Gleichung (A.10) auf, so daß folgt

$$G(\tau, \tau') = \frac{\cosh(\omega |\tau_1 - \tau_2| - \hbar\Omega\beta/2)}{2\omega \sinh \hbar\Omega\beta/2}. \quad (\text{C.19})$$

C.2 Berechnung der lokalen Zustandssumme eines harmonischen Oszillators mit Stromankopplung

Es soll nun $Z_\Omega^{x_0}[j(\tau)]$ wie in (3.91) definiert, bestimmt werden. Diese Rechnung kann im wesentlichen auf die Ergebnisse des vorangegangenen Abschnitts zurückgeführt werden. Schreibt man die Delta-Funktion als Fouriertransformierte wie in (3.55), so folgt

$$Z_\Omega^{x_0}[j(\tau)] = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M}} \oint \mathcal{D}x(\tau) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_\Omega^{x_0}[x(\tau)] + \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[j(\tau) + \frac{i u}{\beta} \right] [x(\tau) - x_0] \right\}. \quad (\text{C.20})$$

Die Formel (C.16) auf (C.20) mit dem effektiven Strom

$$j_{\text{eff}}(\tau) := j(\tau) + \frac{i u}{\beta} \quad (\text{C.21})$$

angewandt, liefert

$$Z_{\Omega}^{x_0}[j(\tau)] = \frac{1}{2 \sinh \frac{\omega \hbar \beta}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \exp \left\{ \frac{1}{2M\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) G(\tau, \tau') j(\tau') \right. \\ \left. + \frac{i u}{M\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) G(\tau, \tau') - \frac{u^2}{2M\hbar\beta^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' G(\tau, \tau') \right\}. \quad (\text{C.22})$$

Die Fouriertransformierte der Greens-Funktion (C.18) zeigt unmittelbar, daß für alle $\tau \in (0, \hbar\beta)$ gilt:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau' G(\tau, \tau') = \frac{1}{\Omega^2}. \quad (\text{C.23})$$

Wir setzen nun (3.48) und (3.61) gleich und erhalten

$$\frac{\hbar}{M} G(\tau, \tau') - \frac{1}{\beta M \Omega^2} = \langle (x(\tau) - x_0)(x(\tau') - x_0) \rangle_{\Omega}^{x_0}. \quad (\text{C.24})$$

Mit diesem Zusammenhang folgt schließlich, nachdem in der Variablen u quadratisch ergänzt und integriert wurde

$$Z_{\Omega}^{x_0}[j(\tau)] = Z_{\Omega}^{x_0} \exp \left\{ \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' j(\tau) \langle (x(\tau) - x_0)(x(\tau') - x_0) \rangle_{\Omega}^{x_0} j(\tau') \right\}. \quad (\text{C.25})$$

Anhang D

Zeitintegrale der Zweipunktkorrelationen

Die Berechnung der Integrale (6.10) ist sehr technisch, deshalb sollen nur die Ergebnisse angegeben werden:

$$a_2^4 = \left(\frac{\hbar}{M\Omega(x_0)} \right)^2 \frac{1}{8\hbar\beta\Omega(x_0)} \frac{1}{\sinh^2 \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)}{2}} \quad (\text{D.1})$$
$$\left\{ 4 + (\hbar\beta\Omega(x_0))^2 - 4 \cosh \hbar\beta\Omega(x_0) + \hbar\beta\Omega(x_0) \sinh \hbar\beta\Omega(x_0) \right\} ,$$

$$a_2^6 = \left(\frac{\hbar}{M\Omega(x_0)} \right)^3 \frac{1}{24 (\hbar\beta\Omega(x_0))^2} \frac{1}{\sinh^2 \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)}{2}} \quad (\text{D.2})$$
$$\left\{ -24 - 4(\hbar\beta\Omega(x_0))^2 + 24 \cosh \hbar\beta\Omega(x_0) \right.$$
$$\left. + (\hbar\beta\Omega(x_0))^2 \cosh \hbar\beta\Omega(x_0) - 9\hbar\beta\Omega(x_0) \sinh \hbar\beta\Omega(x_0) \right\} ,$$

$$a_2^8 = \left(\frac{\hbar}{M\Omega(x_0)} \right)^4 \frac{1}{768 (\hbar\beta\Omega(x_0))^3} \frac{1}{\sinh^4 \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)}{2}} \quad (\text{D.3})$$
$$\left\{ -864 + 18 (\hbar\beta\Omega(x_0))^4 + 1152 \cosh \hbar\beta\Omega(x_0) \right.$$
$$+ 32 (\hbar\beta\Omega(x_0))^2 \cosh \hbar\beta\Omega(x_0) - 288 \cosh 2\hbar\beta\Omega(x_0)$$
$$- 32 (\hbar\beta\Omega(x_0))^2 \cosh 2\hbar\beta\Omega(x_0)$$
$$- 288\hbar\beta\Omega(x_0) \sinh \hbar\beta\Omega(x_0) + 24 (\hbar\beta\Omega(x_0))^3 \sinh \hbar\beta\Omega(x_0)$$
$$\left. + 144\hbar\beta\Omega(x_0) \sinh 2\hbar\beta\Omega(x_0) + 3 (\hbar\beta\Omega(x_0))^3 \sinh 2\hbar\beta\Omega(x_0) \right\} .$$

Anhang E

Natürliche Einheiten

Die Abbildungen der vorliegenden Arbeit sind alle in natürlichen Einheiten vorgenommen. In diesen werden alle Naturkonstanten zu eins gesetzt:

Elementarladung e ,
Wirkungsquantum \hbar ,
Elektronenmasse m_e ,
Influenz $4\pi\epsilon$,
Boltzman-Konstante k_B .

Die resultierenden Einheiten der in den Abbildungen verwandten Größen sind:

[Energie] = $J^* = 27,21eV$,
[Temperatur] = $K^* = 315605.22K$,
[Länge] = $m^* = 0.53 \times 10^{-10}m$.

Literaturverzeichnis

- [1] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics*, Second Edition, World Scientific, Singapore, 1995.
- [2] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, Second Edition, Springer, New York, 1988.
- [3] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*, Fourth Edition, Academic Press, New York, 1965.
- [4] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin, Reading, 1972.
- [5] R. Giachetti and V. Tognetti, Phys. Rev. Lett. **55**, 912 (1985).
- [6] R.P. Feynman and H. Kleinert, Phys. Rev. **A 34**, 5080 (1986).
- [7] H. Kleinert, Phys. Lett. **B 280**, 251 (1992).
- [8] H. Kleinert, Phys. Lett. **A 173**, 332 (1993).
- [9] J. Jaenicke and H. Kleinert, Phys. Lett. **A 176**, 409 (1993).
- [10] H. Kleinert and H. Meyer, Phys. Lett. **A 184**, 319 (1994).
- [11] A. Cuccoli, R. Giachetti, V. Tognetti, R. Vaia, and P. Verrucchi, J. Phys. Condens. Matter **7**, 7891 (1995).
- [12] W. Janke and H. Kleinert, Phys. Lett. **118**, 371 (1986).
- [13] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, World Scientific, Singapore, 1993.
- [14] J.-D. Bao, Y.-Z. Zhuo, and X.-Z. Wu, Phys. Rev. **E 52**, 5656 (1995).

- [15] A. Cuccoli, A. Rossi, V. Tognetti, and R. Vaia, cond-math/9701198.
- [16] W. Greiner, L. Neise und H. Stöcker, *Thermodynamik und Statistische Mechanik*, Verlag Harry Deutsch, Frankfurt am Main, 1987.
- [17] W. Greiner, *Quantenmechanik*, Verlag Harry Deutsch, Frankfurt am Main, 1989.
- [18] L.D. Landau and E.M. Lifschitz, *Quantenmechanik*, Akademie-Verlag, Berlin, 1985.
- [19] I.N. Bronstein und K.A. Semendjajew *Taschenbuch der Mathematik*, 21. Auflage, Verlag Harry Deutsch, Frankfurt am Main, 1982.
- [20] A.P. Prudnikov, Yu.A. Brychkov and O.I. Marichev *Integrals and Series*, Volume 2, Gordon and Breach Science Publishers S.A., Glasgow, 1986.
- [21] M. Bachmann, Diplomarbeit: Dynamik von Quantensystemen mit effektiven Pfaddarstellungen, Humboldt-Universität zu Berlin, 1997.
- [22] M. Bachmann: Private Mitteilung.
- [23] W. Janke und H. Kleinert, *Resummation of divergent Perturbation Series*, World Scientific, Singapore (noch nicht veröffentlicht).
- [24] G.A. Baker, *Essentials of Padé Approximants*, Academic, New York, 1975.
- [25] E. Borel, *Leçon sur les divergentes*, Gauthier Villars, Paris, 1928.
- [26] H. Meyer, Diplomarbeit: Variationsprinipien an Pfadintegralen, Freie Universität Berlin, 1993.