Abgabe: bis zum *3.Nov.2009, 10:00 Uhr* im Postfach von Prof. Rieger

1 Ableiten von Funktionalen

Diese Übung verallgemeinert das Konzept des Ableitens auf Funktionale. Ein Funktional F heißt differenzierbar, falls

$$F[x + \epsilon y] - F[x] = \epsilon DF_x[y] + \mathcal{O}(\epsilon^2), \tag{3.1}$$

wobei das **Differential** DF_x ein lineares Funktional ist, ϵ ein kleiner Parameter ist und $y \equiv y(t)$ eine beliebige Funktion bezeichnet.
1) Gegeben sei ein Vektor $\mathbf{x} \equiv (x_1, ..x_N)$ mit $x_i = x(t_i)$. Die Vektoren $\hat{\mathbf{e}}_\mathbf{1}, .., \hat{\mathbf{e}}_\mathbf{N}$ seien eine kartesische Orthonormalbasis. Das Funktional $F[x]$ wird dadurch zu einer Vektorfunktion, für die gilt:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x} + \epsilon \mathbf{y}) &= F(\mathbf{x}) + \epsilon \sum_i \partial_{x_i} F(\mathbf{x}) y_i + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\ \partial_{x_i} F(\mathbf{x}) &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon} \left(F(\mathbf{x} + \epsilon \hat{\mathbf{e}}_\mathbf{i}) - F(\mathbf{x}) \right). \end{aligned} \tag{3.2}$$

Wir wollen nun folgenden Hamiltonoperator gekoppelter harmonischer Oszillatoren auf einem $1d$ Gitter betrachten:

$$H[\mathbf{x}] = \sum_{i=1}^{N} \frac{m}{2a} (x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{m\omega^2}{2} x_i^2. \tag{3.3}$$

Berechnen Sie mit Hilfe von Gl. (3.2) $\partial_{x_i} H[\mathbf{x}]$ und $\partial_{x_i} \partial_{x_j} H[\mathbf{x}]$.

2) Bilden des kontinuierlichen Grenzwertes überführt Gl. (3.2) zu Gl. (3.1). Dabei wird die Summe zu einem Integral

$$\sum_i a_i b_i \to \int dt a(t) b(t) \tag{3.4}$$

und das Analogon des i-ten Einheitsvektors ist eine δ Distribution

$$\hat{\mathbf{e}}_\mathbf{i} \to \delta_t, \tag{3.5}$$

mit $\delta_t(t') = \delta(t' - t)$. Hiermit erhält man:

$$\begin{aligned} DF_x[y] &= \int dt' \frac{\delta F[x]}{\delta x(t')} y(t') \\ \frac{\delta F[x]}{\delta x(t')} &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon} (F[x + \epsilon \delta_t(t')] - F[x]). \end{aligned} \tag{3.6}$$

Gegeben sei das quadratische Funktional

$$S[x] = \int dt x(t) j(t) + \frac{1}{2} \int dt dt' x(t) G^{-1}(t, t') x(t'). \tag{3.7}$$

Berechnen Sie mit Hilfe von Gl.(3.6): $\delta S[x]/\delta x(t)$ und $\delta^2 S[x]/\delta x(t) \delta x(t')$.
3) Berechnen Sie $\delta^2 S[x]/\delta x(t) \delta x(t')$ für $S[x] = \int dt[(\dot{x})^2 + V(x(t))]$.

2 Berechnung von Pfadintegralen mittels Fourierreihen

Wir betrachten das Pfadintegral des harmonischen Oszillators. Dieses lässt sich schreiben als

$$K(q_b, t_b | q_a, t_a) = e^{i\frac{S_c}{\hbar}} F(T), \tag{3.8}$$

mit $T = t_b - t_a$ und

$$F(T) = \int_{q(t_a)=0}^{q(t_b)=0} Dq(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2}(\dot{q}^2 - \omega^2 q^2)\right) \tag{3.9}$$

Der Vorfaktor $e^{i\frac{S_c}{\hbar}}$ in (3.8) hängt nur von der klassischen Trajektorie des harmonischen Oszillators ab, daher ist er einfach zu berechnen.
An dieser Stelle wollen wir $F(T)$ mittels Fourierreihe berechnen. Ohne das Problem prinzipiell zu vereinfachen setzen wir $t_a = 0$. Dann gilt $q(0) = 0$ und $q(T) = 0$. Daher lässt sich für $q(t)$ folgender Fourieransatz machen:

$$q(t) = \sum_n a_n \sin(\omega_n t) \quad , \quad \omega_n = n\pi/T. \tag{3.10}$$

1) Zeigen Sie die Identitäten

$$\int_0^T \dot{q}^2(t)dt = \frac{T}{2}\sum_n \omega_n^2 a_n^2 \quad , \quad \int_0^T q^2(t)dt = \frac{T}{2}\sum_n a_n^2. \tag{3.11}$$

2) Jetzt zerlegen wir das Zeitintervall T in diskrete Schritte der Länge ϵ, d.h es gibt eine endliche Zahl N an Fourierkoeffizienten $a_n \neq 0$. Zeigen Sie, dass das Pfadintegral sich in diesem Fall schreiben lässt als

$$F(T) = J\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{da_1}{A} ... \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{da_N}{A} \exp\left(\sum_n \frac{im}{2\hbar}(\omega_n^2 - \omega^2)a_n^2\right), \tag{3.12}$$

wobei J unabhängig von ω ist und $A = (2\pi i\hbar\epsilon/m)^{1/2}$.

3) Benutzen Sie

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{da_n}{A} \exp\left(\frac{im}{2\hbar}(\omega_n^2 - \omega^2)a_n^2\right) = (\omega_n^2 - \omega^2)^{-1/2} \tag{3.13}$$

$$\prod_{n=1}^{\infty} [1 - (x/(n\pi))^2] = x/\sin x \tag{3.14}$$

um Folgendes zu zeigen

$$F(T) = C\left(\frac{\sin\omega T}{\omega T}\right)^{-1/2}. \tag{3.15}$$

4) Zeigen Sie abschließend unter Verwendung von $F(T)$ eines freien Teilchens, dass

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}\right)^{1/2}. \tag{3.16}$$