

**Modifizierung des Feynman-Kleinert'schen
Variationsansatzes zur angenäherten
Bestimmung von Ortsverteilungen**

Diplomarbeit der Physik
Mai 1995 bis Januar 1996

Christian Seitel
Institut für Physik
Universität Augsburg

Referent: U. Eckern
Korreferent: G. L. Ingold

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt P. Schmitteckert, der als nie ermüdender Ansprechpartner bei der Bewältigung verschiedenster computertechnischer Probleme stets eine Hilfestellung geben konnte. Darüber hinaus möchte ich mich bei P. Schwab für das Korrekturlesen dieser Diplomarbeit bedanken. Ferner möchte ich den Professoren U. Eckern und G. L. Ingold für die Übernahme des Referats bzw. Korreferats danken.

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben.

Augsburg, den

20.1.1996

Seidel Christian

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Die Herleitung der Näherungsverfahren	7
2.1	Einführung	7
2.1.1	Die Darstellung der Zustandssumme als Pfadintegral	7
2.1.2	Fourier Entwicklung des Pfades $x(\tau)$	9
2.2	Die Näherungsverfahren	10
2.2.1	Die allgemeine Formulierung des Variationsansatzes	10
2.2.2	Die Berechnung der Größe $Z_0(\nu)$	16
2.2.3	Die Berechnung der Größe $\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)}$	19
2.2.4	Die Berechnung der Größe $\langle V_0^{(\nu)}[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)}$	24
2.2.5	Zusammenfassung	27
2.2.6	Die Minimierung	28
2.2.7	Der harmonische Oszillator	31
2.3	Die Ortsverteilung $\rho(x_0)$	33
2.4	Das Problem periodischer Nebenbedingungen	35
2.4.1	Die Herleitung des “periodischen” Pfadintegrals	35
2.4.2	Die Abschätzung der “periodischen” Zustandssumme	38
3	Die Anwendung der Näherungsverfahren	40
3.1	Die Neuformulierung der Näherungsverfahren	40
3.1.1	Die neuen Variablen	41
3.1.2	Tabelle der Funktionen	42
3.1.3	Fall a	43
3.1.4	Fall b	44
3.1.5	Fall c	44
3.2	Numerische Ergebnisse	45

3.2.1	Vorbemerkung	45
3.2.2	Der klassische Grenzfall	47
3.2.3	Die angenäherten Freien Energieen	52
3.2.4	Die Ortsverteilungen	62
3.2.5	Die Untersuchung periodischer Potentiale	67
4	Zusammenfassung	76
A	Ergänzende Rechnungen zu Kapitel 2	79
A.1	Euklidische Wirkung des harmonischen Oszillators	79
A.2	Die Integrationen über \mathbf{R} und \mathbf{I}	80
A.3	Tabelle der Funktionen	81
A.4	Die Transformation von “schiefen” zu “geraden” Pfaden	82
B	Ergänzende Rechnungen zu Kapitel 3	83
B.1	Die Minimierung	83
B.1.1	Tabelle der Ableitungen	83
B.1.2	Fall a	84
B.1.3	Fall b	85
B.1.4	Fall c	85
B.2	Die klassische Zustandssumme im Fall periodischer Nebenbedingungen . .	86

Kapitel 1

Einleitung

Variationsmethoden stellen ein in der theoretischen Physik häufig benutztes Instrumentarium dar, um physikalischen Problemstellungen, die sich nicht mehr exakt lösen lassen, zumindest näherungsweise zu begegnen. In diesem Sinne stellt der von Feynman und Kleinert im Jahre 1986 vorgestellte Variationsansatz zur angenäherten Berechnung freier Energien ein natürliches Werkzeug dar, um das thermodynamische Verhalten eines physikalischen Systems approximativ zu bestimmen. Versucht man allerdings, mit Hilfe dieses Ansatzes das Verhalten eines einfachen Josephson-Kontaktes zu beschreiben, so stellt man fest, daß dies nicht ohne weiteres möglich ist. Denn für ein solches System zweier schwach gekoppelter Supraleiter, läßt sich mit Hilfe der Josephson Gleichungen [1], ein Hamiltonian konstruieren, bei dem die Phasendifferenz φ zwischen den Ordnungsparametern der beiden Supraleiter, sowie die Differenz N in der Anzahl der auf beiden Seiten befindlichen Cooper-Paare die Rolle von kanonisch konjugierten Variablen übernehmen. Im speziellen hat man es mit einem Hamiltonian der folgenden Form zu tun ¹:

$$H(p, \varphi) = \frac{p^2}{2m} - E_J \cos \varphi \quad \text{mit} \quad \begin{cases} m &= (\frac{\hbar}{2e})^2 C \\ p &= -\hbar N \\ E_J &= \frac{\hbar}{2e} I_J \end{cases} .$$

Dabei bezeichnet C die Kapazität und I_J die kritische Stromstärke des betrachteten Josephson-Kontaktes. Nun ergibt sich die eigentliche Problematik aus der Tatsache, daß der voranstehende Hamiltonian 2π -periodisch bezüglich der Phasendifferenz φ ist. Daraus folgt nämlich, daß das betreffende quantenmechanische Problem unter der Nebenbedingung der 2π -Periodizität zu lösen ist. Einer solchen Aufgabenstellung wird der Variationsansatz von Feynman und Kleinert allerdings nicht gerecht, da er letztlich auf

¹Eine ausführlichere Darstellung entnimmt man wahlweise den Referenzen [2], [3] oder [4].

einer Pfadintegralformulierung beruht, die eine direkte Einbindung der Periodizität nicht erlaubt.

In dieser Arbeit nun wird versucht, den Variationsansatz von Feynman und Kleinert von neuem aufzugreifen und so umzuformulieren, daß er den soeben erwähnten (nachträglichen) Einbau der 2π -periodischen Nebenbedingungen ermöglicht. Dabei wird Wert darauf gelegt, daß auch der neue Variationsansatz letztlich auf ein und derselben Abschätzung beruht, wie sie schon den ursprünglichen Ansatz von Feynman und Kleinert kennzeichnet. Um nun der sich daraus ergebenden Analogie zwischen dem neuen und dem alten Variationsansatz gerecht zu werden, wird in dieser Arbeit auch der ursprüngliche Ansatz von neuem diskutiert und so in das Gesamtwerk eingebunden, daß der Bezug zwischen dem neuen und dem alten Ansatz hergestellt wird. Wenngleich der neue Variationsansatz ursprünglich mit der Idee verbunden ist, Problemen mit periodischen Nebenbedingungen zu begegnen, so ist er in seiner Anwendung keineswegs darauf beschränkt. Daraus erwächst die Möglichkeit, bei Problemstellungen, die keinen periodischen Nebenbedingungen unterliegen, die Resultate des neuen und des alten Variationsansatzes unmittelbar zu vergleichen. Dies wird neben der Herleitung des neuen Ansatzes ein Schwerpunkt dieser Arbeit sein. Darüber hinaus fällt bei genauerer Betrachtung des neuen Variationsansatzes auf, daß es sich dabei nicht so sehr um den direkten Versuch handelt, die Freie Energie eines physikalischen Systems approximativ zu bestimmen. Man erkennt vielmehr, daß der neue Ansatz auf ebenso natürlichem Wege den Zugang zu einer (angenäherten) Berechnung der Ortsverteilung² des betrachteten Systems ermöglicht. Denn in gewisser Weise verkörpert der neue Ansatz letztlich nur den Versuch, den Grundgedanken, von dem Feynman und Kleinert ausgegangen sind, für die (angenäherte) Berechnung der Ortsverteilung nutzbar zu machen. Aus dieser Überlegung heraus erklärt sich zum einen der Titel dieser Diplomarbeit, zum anderen wird ein weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit motiviert.

Im Groben besitzt diese Arbeit den folgenden Aufbau:

Zunächst erfolgt im zweiten Kapitel die explizite Herleitung der im Zuge dieser Arbeit zu diskutierenden Näherungsverfahren. Anschließend wird der Einbau periodischer Nebenbedingungen besprochen. Daraufhin wird im dritten Kapitel die explizite Anwendung der hier vorgestellten Variationsverfahren, sowie ihre numerische Umsetzung diskutiert. Schließlich werden für einige Beispielprobleme die numerisch erzielten Resultate vorgestellt

²Wie in der Referenz [5], so soll auch in dieser Arbeit der Begriff "Ortsverteilung" als Bezeichnung für die Diagonalmatrixelemente des kanonischen Zustandsoperators $\hat{W} = e^{-\beta\hat{H}} / \text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}]$ herangezogen werden (mit $\text{Tr} = \text{Spur}$).

und diskutiert. Anschließend soll im letzten Kapitel ein Resumé dieser Arbeit gezogen werden.

Kapitel 2

Die Herleitung der Näherungsverfahren

2.1 Einführung

2.1.1 Die Darstellung der Zustandssumme als Pfadintegral

In diesem Abschnitt soll ein Teil des physikalischen Grundkonzepts, auf dem diese Arbeit beruht, vorgestellt werden. Da es sich dabei um einige wohlbekanntere Grundtatsachen der theoretischen Physik handelt, ist das Hauptaugenmerk darauf ausgerichtet, dem Leser die Möglichkeit zu geben, sich mit der in dieser Arbeit verwendeten Notation vertraut zu machen.

Aus der Thermodynamik ist bekannt, daß sich das gesamte thermodynamische Verhalten eines physikalischen Systems aus dem entsprechenden thermodynamischen Potential ableiten läßt. Rechnet man im kanonischen Formalismus, so ist dieses Potential durch die Helmholtz'sche Freie Energie \mathcal{F} gegeben. Diese wiederum läßt sich wie folgt aus der kanonischen Zustandssumme \mathcal{Z} ableiten ¹:

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \ln[\mathcal{Z}]. \quad (2.1)$$

Dabei geht über die Zustandssumme \mathcal{Z} der Hamiltonoperator \hat{H} des betrachteten physikalischen Systems ein:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}\left[e^{-\beta\hat{H}}\right]. \quad (2.2)$$

¹Auch in dieser Arbeit erweist sich die Einführung der standardmäßigen Abkürzung $\beta = \frac{1}{k_B T}$ als günstig, wobei T die Temperatur und k_B die Boltzmann-Konstante bezeichnen.

Will man in der voranstehenden Gleichung die Spurbildung (= Tr) ausführen, muß man eine explizite Darstellungsform auswählen. In der Ortsdarstellung erhält man:

$$\mathcal{Z} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle. \quad (2.3)$$

Handelt es sich beim betrachteten physikalischen System um ein Teilchen, das sich im Potential V bewegt, so besitzt der betreffende Hamiltonoperator \hat{H} die folgende Form:

$$\hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (2.4)$$

In diesem Fall lassen sich die Matrixelemente von $e^{-\beta \hat{H}}$ wie folgt mit Hilfe eines Pfadintegrals darstellen:

$$\langle x_b | e^{-\beta \hat{H}} | x_a \rangle = \int_{x_a}^{x_b} \mathcal{D}[x(\tau)] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x(\tau)]\right]. \quad (2.5)$$

Dabei bezeichnet in der voranstehenden Gleichung der Buchstabe \mathcal{A} die euklidische Wirkung des betrachteten Teilchens, die wie folgt von seinem Pfad $x(\tau)$ abhängt:

$$\mathcal{A}[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}(\tau)^2 + V[x(\tau)] \right\}. \quad (2.6)$$

Die obere bzw. untere Grenze des Pfadintegrals (2.5) soll daran erinnern, daß sich die Pfadintegration nur über all diejenigen Pfade $x(\tau)$ zu erstrecken hat, deren Anfangs- und Endpunkte durch x_a bzw. x_b fixiert sind:

$$\begin{aligned} x(\tau = 0) &= x_a \\ x(\tau = \hbar\beta) &= x_b. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Setzt man die Gleichung (2.5) in (2.3) ein, so erhält man für die Zustandssumme \mathcal{Z} den folgenden Ausdruck:

$$\mathcal{Z} = \oint \mathcal{D}[x(\tau)] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x(\tau)]\right]. \quad (2.8)$$

Dabei wurde in der voranstehenden Gleichung die folgende abkürzende Schreibweise verwendet:

$$\oint \mathcal{D}[x(\tau)] = \int_{-\infty}^{\infty} dx_s \int_{x_s}^{x_s} \mathcal{D}[x(\tau)]. \quad (2.9)$$

Demgemäß soll das Symbol \oint im Zusammenhang mit einer Pfadintegration andeuten, daß nur über all diejenigen Pfade $x(\tau)$ zu integrieren ist, die geschlossen sind, d.h. für die Anfangs- und Endpunkt zusammenfallen:

$$x(\tau = 0) = x(\tau = \hbar\beta) = x_s. \quad (2.10)$$

Es bleibt jedoch zu beachten, daß eine Integration über den Anfangs-(=End)Punkt x_s miteinbezogen ist!

2.1.2 Fourier Entwicklung des Pfades $x(\tau)$

Aus der Gleichung (2.6) folgt, daß die spezielle Form des Pfades $x(\tau)$ nur im Bereich $0 \leq \tau \leq \hbar\beta$ von Bedeutung ist. Da es sich zudem im vorliegenden Fall ausschließlich um geschlossene Pfade handelt (vergleiche die Gleichung (2.10)), ist man berechtigt, sich bei der Pfadintegration auf solche Pfade zu beschränken, die die Periode $\hbar\beta$ besitzen. Die Periodizität der Pfade wiederum macht es möglich, daß man dieselben einer diskreten Fourier Transformation unterzieht. Die entsprechenden Fourier Frequenzen, die in der Literatur auch unter dem Namen Matsubara Frequenzen geführt werden, besitzen die folgende Form:

$$\omega_m = \frac{2\pi}{\hbar\beta} m \quad \forall m \in \mathbf{Z}. \quad (2.11)$$

Bezeichnet man in diesem Zusammenhang die entsprechenden Fourier Koeffizienten mit \mathcal{X}_m , so besitzt die Fourier Entwicklung des Pfades $x(\tau)$ die folgende konkrete Darstellung:

$$x(\tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathcal{X}_m e^{i\omega_m \tau}. \quad (2.12)$$

In den folgenden Rechnungen wird es sich als günstig herausstellen, daß man die komplexen Fourier Koeffizienten \mathcal{X}_m in Real- und Imaginärteil zerlegt:

$$\mathcal{X}_m = R_m + i I_m. \quad (2.13)$$

Selbstverständlich ist der Pfad $x(\tau)$ eine reelle Größe. Demgemäß lassen sich für die Fourier Koeffizienten die folgenden Gesetzmäßigkeiten ² ableiten:

$$\mathcal{X}_{-m} = \mathcal{X}_m^* \iff \begin{cases} R_{-m} = R_m \\ I_{-m} = -I_m \end{cases}. \quad (2.14)$$

Setzt man die Beziehungen (2.13) und (2.14) in die Gleichung (2.12) ein, so ergibt sich:

$$x(\tau) = R_0 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ R_m \cos(\omega_m \tau) - I_m \sin(\omega_m \tau) \right\}. \quad (2.15)$$

Im nächsten Kapitel wird sich herausstellen, daß im Zuge dieser Arbeit zwei Größen, die unmittelbar mit der speziellen Form des Pfades $x(\tau)$ in Verbindung stehen, von besonderer Bedeutung sind. Dabei handelt es sich zum einen um den Mittelweg \bar{x} , der wie üblich durch das Integral

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

²Das Symbol * in der Gleichung (2.14) bezeichnet die komplexe Konjugation.

definiert ist, und zum anderen um den Anfangs-(=End)Punkt x_s , der bereits in der Gleichung (2.10) Erwähnung fand. Dabei gestaltet sich die funktionale Abhängigkeit dieser beiden Größen vom Pfad $x(\tau)$ (und damit von seinen Fourier Koeffizienten) wie folgt:

$$\bar{x} = R_0 = \mathcal{X}_0 = \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} x(\tau) \quad (2.16)$$

$$x_s = R_0 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} R_m = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathcal{X}_m = x(\tau=0) = x(\tau=\hbar\beta). \quad (2.17)$$

Mit Hilfe der Fourier Entwicklung des Pfades $x(\tau)$ läßt sich das Integral zur Berechnung der euklidischen Wirkung (siehe Gleichung (2.6)) ebenfalls in eine unendliche Fourier Summe umschreiben. Dies wird im Anhang (A.1) für das harmonische Potential

$$V_0(x) = \frac{m}{2} \Omega^2 (x - \Delta)^2 \quad (2.18)$$

vorgeführt ³. Bezeichnet \mathcal{A}_0 die mit dem Potential V_0 assoziierte euklidische Wirkung, so ergibt sich als Ergebnis:

$$\mathcal{A}_0[x(\tau)] = \hbar\beta m \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2) (R_m^2 + I_m^2) + \hbar\beta \frac{m}{2} \Omega^2 (\bar{x} - \Delta)^2. \quad (2.19)$$

In der Fourier Darstellung nimmt das in der Gleichung (2.9) eingeführte Pfadintegrationsmaß $\mathcal{D}[x(\tau)]$ die folgende konkrete Gestalt an:

$$\oint \mathcal{D}[x(\tau)] = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{I}. \quad (2.20)$$

Dabei repräsentiert die abkürzende Schreibweise $\int d\mathbf{R} \int d\mathbf{I}$, die in dieser Arbeit noch mehrfach Verwendung finden wird, das folgende unendliche Produkt von Integralen:

$$\int d\mathbf{R} \int d\mathbf{I} = \prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{m\beta\omega_m^2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dR_m \int_{-\infty}^{\infty} dI_m \right). \quad (2.21)$$

2.2 Die Näherungsverfahren

2.2.1 Die allgemeine Formulierung des Variationsansatzes

In diesem Abschnitt soll ein Variationsansatz zur angenäherten Berechnung der Zustandssumme \mathcal{Z} hergeleitet werden. Als Ausgangspunkt hierfür dient in Verbindung mit der

³Der betreffende harmonische Oszillator mit der Masse m und der Frequenz Ω sei um den beliebig ausgewählten Ort Δ zentriert.

Gleichung (2.8) die Vorstellung, daß man das entsprechende Pfadintegral zunächst nur teilweise ausführt, indem man sich bei der Integration auf alle Pfade $x(\tau)$ beschränkt, die den Mittelweg \bar{x} und den Anfangs-(=End)Punkt x_s besitzen. Auf diese Weise gelangt man zu einer von \bar{x} und x_s abhängigen Größe, die man als reduzierte Zustandssumme Z bezeichnen könnte. Im Anschluß daran führt man dann die noch ausstehenden Integrationen über \bar{x} und x_s mit der reduzierten Zustandssumme $Z(\bar{x}, x_s)$ als Integrand aus. Die soeben beschriebene schrittweise Vorgehensweise läßt sich folgendermaßen durch das Einfügen von δ -Funktionen in das Pfadintegral (2.8) realisieren ⁴:

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{x} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 Z(\hat{x}, x_0) \quad (2.22)$$

$$Z(\hat{x}, x_0) = \sqrt{\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}} \oint \mathcal{D}[x(\tau)] \delta(\hat{x} - \bar{x}) \delta(x_0 - x_s) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x(\tau)]\right]. \quad (2.23)$$

Man beachte, daß in der voranstehenden Gleichung die Größen \bar{x} und x_s selbstverständlich als Funktionen des Pfades $x(\tau)$ zu verstehen sind:

$$\bar{x} = \bar{x}[x(\tau)] \quad \text{bzw.} \quad x_s = x_s[x(\tau)]. \quad (2.24)$$

Die Gleichung (2.23) macht deutlich, daß der Mittelweg \bar{x} und der Anfangs-(=End)-Punkt x_s prinzipiell gleichbehandelt werden. Allerdings bietet die Gleichung (2.20) die Möglichkeit einer gesonderten, zu Vereinfachungen führenden Behandlung des Mittelwegs \bar{x} . Die reduzierte Zustandssumme $Z(\bar{x}, x_0)$ gewinnt man nämlich einfach dadurch, daß man gemäß der Gleichung (2.20) die Integration über \bar{x} zunächst ausläßt. Diesen Sachverhalt bringen die beiden folgenden Gleichungen zum Ausdruck, die eine unmittelbare Umformulierung der Gleichungen (2.22) und (2.23) darstellen:

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 Z(\bar{x}, x_0) \quad (2.25)$$

$$Z(\bar{x}, x_0) = \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{I} \delta(x_0 - x_s) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x(\tau)]\right]. \quad (2.26)$$

Von der reduzierten Zustandssumme $Z(\bar{x}, x_0)$ gelangt man zur eigentlichen Zustandssumme \mathcal{Z} mit Hilfe der Integrationen über \bar{x} und x_0 . Je nachdem, ob bei dieser Doppelintegration zuerst über \bar{x} oder aber zuerst über x_0 integriert wird, tauchen dabei als

⁴Es erweist sich darüber hinaus im folgenden als bequem, die Gleichung (2.8) auch noch mit dem Faktor $1 = \sqrt{\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}}$ zu erweitern.

Zwischenergebnis zwei weitere noch unvollständig ausintegrierte (und damit “reduzierte”) Zustandssummen auf, nämlich:

$$\begin{aligned}
 Z(\bar{x}) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 Z(\bar{x}, x_0) \\
 \text{und } Z(x_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} Z(\bar{x}, x_0).
 \end{aligned}
 \tag{2.27}$$

Man beachte, daß sich aus Gründen, die in Kürze deutlich werden, die drei reduzierten Zustandssummen $Z(\bar{x}, x_0)$, $Z(\bar{x})$ und $Z(x_0)$ bezüglich ihrer Notation nur aufgrund der Andersartigkeit ihrer Argumente unterscheiden. Im folgenden wird für jede der drei reduzierten Zustandssummen eine Abschätzung nach unten gegeben. Dabei sei jedoch bereits an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß man die beiden Abschätzungen für $Z(\bar{x})$ und $Z(x_0)$ nicht einfach dadurch gewinnt, daß man die Abschätzung für $Z(\bar{x}, x_0)$ entsprechend über \bar{x} bzw. x_0 integriert ⁵. Mit anderen Worten bedeutet dies, daß die Gleichung (2.27) keine Gültigkeit mehr besitzt, wenn man die Größen Z durch ihre entsprechenden Abschätzungen ersetzt.

Um die drei Fälle gleichzeitig abhandeln zu können, erweist es sich als günstig, die allgemeinen Variablen μ und ν so einzuführen, daß sie je nach Fall eine unterschiedliche Belegung besitzen. Bezeichnet man die drei Fälle mit a, b und c, so zeigt die folgende Tabelle die explizite Belegung der Variablen μ und ν :

Fall	Abschätzung von	μ	$\int d\mu$	ν	$\int d\nu$
a	$Z(\bar{x}, x_0)$		1	\bar{x}, x_0	$\int d\bar{x} \int dx_0$
b	$Z(\bar{x})$	x_0	$\int dx_0$	\bar{x}	$\int d\bar{x}$
c	$Z(x_0)$	\bar{x}	$\int d\bar{x}$	x_0	$\int dx_0$

(2.28)

Mit Hilfe der soeben eingeführten Symbolik lassen sich die drei reduzierten Zustandssummen $Z(\bar{x}, x_0)$, $Z(\bar{x})$ und $Z(x_0)$ kompakt durch eine einzige Gleichung ausdrücken:

$$Z(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mu Z(\bar{x}, x_0).
 \tag{2.29}$$

⁵Diese Vorgehensweise wäre selbstverständlich sinnlos, da man am Ende nach wie vor nur eine, und nicht drei Abschätzungen für die eigentliche Zustandssumme Z erhielte.

Darüber hinaus erkennt man unmittelbar, daß sich in dieser Notation für die Zustands-
summe \mathcal{Z} der folgende Ausdruck ergibt:

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu Z(\nu). \quad (2.30)$$

Setzt man die Gleichung (2.26) in (2.29) ein, so erhält man unter Verwendung der trivialen
und für beliebige Versuchswirkungen $\mathcal{A}_0^{(\nu)}$ gültigen Identität

$$\mathcal{A} = \mathcal{A} - \mathcal{A}_0^{(\nu)} + \mathcal{A}_0^{(\nu)} \quad (2.31)$$

den folgenden Ausdruck:

$$Z(\nu) = \int d\mu \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{I} \delta(x_0 - x_s) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} (\mathcal{A} - \mathcal{A}_0^{(\nu)})[x(\tau)]\right] \cdots \cdots \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_0^{(\nu)}[x(\tau)]\right]. \quad (2.32)$$

Die Schreibweise $\mathcal{A}_0^{(\nu)}$ deutet bereits an, daß – wenngleich sich aus der Gleichung (2.31)
keinerlei Beschränkung für die Versuchswirkung ergibt – nur eine solche Versuchswirkung
günstig ist, die ausschließlich von der Variablen ν abhängt, und nicht etwa von den Va-
riablen μ , \mathbf{R} oder \mathbf{I} ⁶. Es erweist sich als vorteilhaft, ausgehend von der Versuchswirkung
 $\mathcal{A}_0^{(\nu)}$ zwei neue Größen zu definieren, die unmittelbar mit dieser assoziiert sind. Zum einen
kann man eine (reduzierte) Versuchszustandssumme $Z_0(\nu)$ wie folgt definieren:

$$Z_0(\nu) = \int d\mu \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{I} \delta(x_0 - x_s) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_0^{(\nu)}[x(\tau)]\right]. \quad (2.33)$$

Zum anderen kann man für eine beliebige, an der Stelle $x(\tau)$ auszuwertende Funktion f
einen Erwartungswert $\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)}$ bezüglich der Versuchswirkung folgendermaßen defi-
nieren:

$$\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)} = \frac{1}{Z_0(\nu)} \int d\mu \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{I} \delta(x_0 - x_s) f[x(\tau)] \cdots \cdots \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_0^{(\nu)}[x(\tau)]\right]. \quad (2.34)$$

Mit Hilfe der beiden soeben eingeführten Größen läßt sich die Gleichung (2.32) wie folgt
umschreiben:

$$Z(\nu) = Z_0(\nu) \left\langle \exp\left[-\frac{1}{\hbar} (\mathcal{A} - \mathcal{A}_0^{(\nu)})[x(\tau)]\right] \right\rangle_0^{(\nu)}. \quad (2.35)$$

⁶Selbstverständlich hängt die Versuchswirkung $\mathcal{A}_0^{(\nu)} = \mathcal{A}_0^{(\nu)}[x(\tau)]$ indirekt über den Pfad $x(\tau)$ von
den Variablen ν , μ , \mathbf{R} und \mathbf{I} ab. Eine solche implizite Variablenabhängigkeit ist in diesem Zusammenhang
aber nicht gemeint.

Bisher wurden noch keine Näherungen vorgenommen, so daß die voranstehende Beziehung eine exakt gültige Gleichung darstellt. Jetzt allerdings soll mit Hilfe einer in der statistischen Mechanik häufiger auftauchenden Ungleichung die rechte Seite der voranstehenden Gleichung nach unten abgeschätzt werden. Denn für alle Erwartungswerte $\langle \dots \rangle$ mit positiven Gewichten ⁷, läßt sich aufgrund der Konvexität der Exponentialfunktion die folgende nützliche Ungleichung ableiten ⁸:

$$\langle e^{-\dots} \rangle \geq e^{-\langle \dots \rangle}. \quad (2.36)$$

Wendet man die voranstehende Beziehung auf die rechte Seite der Gleichung (2.35) an, so erhält man:

$$Z(\nu) \geq Z_0(\nu) \exp \left[\left\langle -\frac{1}{\hbar} (\mathcal{A} - \mathcal{A}_0^{(\nu)}) [x(\tau)] \right\rangle_0^{(\nu)} \right]. \quad (2.37)$$

Sind nun V und $V_0^{(\nu)}$ die gemäß der Gleichung (2.6) mit den Wirkungen \mathcal{A} bzw. $\mathcal{A}_0^{(\nu)}$ assoziierten Potentiale, so läßt sich mit Hilfe der Definition

$$\Phi(\nu) = -\frac{\ln[Z_0(\nu)]}{\beta} + \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \langle V[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)} - \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \langle V_0^{(\nu)}[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)} \quad (2.38)$$

die Ungleichung (2.37) wie folgt umschreiben:

$$Z(\nu) \geq \exp[-\beta \Phi(\nu)]. \quad (2.39)$$

Aus der voranstehenden Ungleichung läßt sich aufgrund der Gleichung (2.30) mit Hilfe der folgenden wohlbekannten Beziehung ⁹

$$f(x) \geq g(x) \quad \forall x \quad \implies \quad \int dx f(x) \geq \int dx g(x) \quad (2.40)$$

unmittelbar die gewünschte untere Schranke für die Zustandssumme \mathcal{Z} ableiten:

$$\mathcal{Z} \geq \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \exp[-\beta \Phi(\nu)]. \quad (2.41)$$

Bevor man jetzt explizit versucht, die Größe $\Phi(\nu)$ zu berechnen, muß man selbstverständlich erst einen entsprechenden Ansatz für das Versuchspotential $V_0^{(\nu)}$ wählen. Dabei dürfte

⁷Diese Voraussetzung wird vom hier diskutierten Versuchserwartungswert $\langle \dots \rangle_0^{(\nu)}$ stets erfüllt, da dessen Gewichte durch die Exponentialfunktion $\exp\left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_0^{(\nu)}\right]$ beschrieben werden, die bekanntlich für alle Argumente $\mathcal{A}_0^{(\nu)}$ positiv ist.

⁸Siehe z.B. die Referenzen [6] und [7].

⁹In der Gleichung (2.40) bezeichnen f und g zwei beliebige (stetige) Funktionen.

es keine Überraschung sein, daß diese Wahl durch den folgenden harmonischen Ansatz beschrieben wird:

$$V_0^{(\nu)}[x(\tau)] = \frac{m}{2}\Omega^2 (x(\tau) - \Delta_x)^2 \quad \text{mit} \quad \begin{cases} \Omega & = \Omega(\nu) \\ \Delta_x & = \Delta_x(\nu) \end{cases} . \quad (2.42)$$

Dabei wurde in der voranstehenden Gleichung bereits angedeutet, daß die explizite Abhängigkeit des Versuchspotentials $V_0^{(\nu)}$ von der Variablen ν dadurch gegeben ist, daß die Parameter Ω und Δ_x als Funktionen von ν zu verstehen sind. Noch immer ist mit der Gleichung (2.42) das Versuchspotential $V_0^{(\nu)}$ nicht vollständig festgelegt, da selbstverständlich die spezielle funktionale Form der Parameter Ω und Δ_x noch nicht definiert ist. Aufgrund der Tatsache, daß die Ungleichung (2.39) für alle ν uneingeschränkt davon Gültigkeit besitzt, welche Wahl für das Versuchspotential $V_0^{(\nu)}$ und damit für die tatsächlichen Werte der Funktionen $\Omega(\nu)$ und $\Delta_x(\nu)$ getroffen wird, kann man versuchen, für gegebenes ν durch Variation der Parameter Ω und Δ_x die rechte Seite der Ungleichung (2.39) zu maximieren, um so für alle ν jeweils eine optimale untere Schranke für die reduzierte Zustandssumme $Z(\nu)$ zu bekommen. Eine solche Maximierung legt dann die explizite Form der Funktionen $\Omega(\nu)$ und $\Delta_x(\nu)$ fest.

Bevor nun in den nächsten drei Abschnitten jeweils ein Summand der rechten Seite der Gleichung (2.38) explizit berechnet wird, sollen an dieser Stelle noch zwei Hinweise gegeben werden:

- Die Methode b führt direkt zum herkömmlichen Variationsansatz von Feynman und Kleinert, wie er in den Referenzen [5] und [7] ausführlich beschrieben wird. Dabei ist die im Zuge dieser Arbeit gewählte Herleitung wesentlich komplizierter als die ursprüngliche von Feynman und Kleinert, da in dieser Arbeit versucht wurde, die Methode b so in das Gesamtkonzept einzubetten, daß der Bezug zu den beiden anderen Näherungsverfahren a und c hergestellt wird. Anders ausgedrückt bedeutet dies, daß man im Fall b selbstverständlich auf den Einschub der δ -Funktion $\delta(x_0 - x_s)$ und damit auf die entsprechende Integration über x_0 hätte verzichten können¹⁰, um am Ende dieselben Resultate zu erzielen.

¹⁰Aufgrund der beiden Gleichungen (2.26) und (2.27) ließe sich im Fall b unmittelbar die folgende vereinfachte Beziehung aufstellen:

$$Z(\bar{x}) = \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{I} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x(\tau)]\right].$$

- Unter dem Ansatz (2.42) ist eigentlich der parabolische Ansatz ¹¹

$$V_0^{(\nu)}[x(\tau)] = a(\nu) \left(x(\tau) - b(\nu) \right)^2 + c(\nu) \quad \text{mit} \quad \begin{cases} a(\nu) = \frac{m}{2} \Omega(\nu)^2 \\ b(\nu) = \Delta_x(\nu) \end{cases} \quad (2.43)$$

zu verstehen, wobei aus Gründen der Einfachheit auf die Mitführung der Größe $c(\nu)$ verzichtet wurde, da sich am Ende der Rechnung herausgestellt hätte, daß $\Phi(\nu)$ unabhängig von $c(\nu)$ ist. Davon kann sich der Leser leicht selbst überzeugen, wenn er beim Lesen dieser Arbeit verfolgt, wie im Fall a und b die Größe $\Delta_x(\nu)$ bei der Rechnung herausfällt. Die Gleichung (2.43) soll hauptsächlich andeuten, daß wegen $a(\nu) \propto \Omega(\nu)^2$ auch negative Werte für $\Omega(\nu)^2$ erlaubt sind, so daß die Größe $\Omega(\nu)$ gegebenenfalls rein imaginär ist.

2.2.2 Die Berechnung der Größe $Z_0(\nu)$

In diesem Abschnitt soll die Berechnung der (reduzierten) Versuchszustandssumme $Z_0(\nu)$, die in der Gleichung (2.33) definiert wurde, erfolgen. Dazu formt man die dabei auftretende δ -Funktion unter Heranziehung der Gleichung (2.17) folgendermaßen um:

$$\delta(x_0 - x_s) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \exp \left[i y (x_0 - \bar{x}) - i y 2 \sum_{m=1}^{\infty} R_m \right]. \quad (2.44)$$

Mit Hilfe der voranstehenden Gleichung, sowie unter Verwendung des Ergebnisses (2.19) für die euklidische Wirkung des harmonischen Oszillators läßt sich der Integrand auf der rechten Seite der Gleichung (2.33) wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned} & \delta(x_0 - x_s) \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_0^{(\nu)}[x(\tau)] \right] \\ &= \exp \left[-\beta \frac{m}{2} \Omega^2 (\bar{x} - \Delta_x)^2 \right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \exp [i y (x_0 - \bar{x})] \cdots \\ & \cdots \exp \left[-\beta m \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2) (R_m^2 + I_m^2) - i y 2 \sum_{m=1}^{\infty} R_m \right] \\ &= \exp \left[-\beta \frac{m}{2} \Omega^2 (\bar{x} - \Delta_x)^2 \right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \exp \left[i y (x_0 - \bar{x}) - \frac{y^2}{\beta m} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2} \right] \cdots \\ & \cdots \exp \left[-\beta m \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2) \left([R_m + \Delta R_m]^2 + I_m^2 \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.45)$$

¹¹Eine Parabel $a(x - b)^2 + c$ wird als Polynom 2. Grades eindeutig durch die drei Parameter a , b und c bestimmt.

Dabei wurde in der voranstehenden Gleichung die folgende Abkürzung benutzt:

$$\Delta R_m = \frac{i y}{\beta m (\omega_m^2 + \Omega^2)}. \quad (2.46)$$

Mit Hilfe der Umformung des Integranden (Gleichung (2.45)) ist man jetzt in die Lage versetzt, die in der Gleichung (2.33) auftretenden Integrationen über \mathbf{R} und \mathbf{I} explizit lösen zu können. Die betreffende Rechnung ist im Anhang (A.2) zu finden. Das Ergebnis ist die Funktion $F = F(\Omega)$, deren spezielle Definition dem Anhang (A.3), Gleichung (A.8) zu entnehmen ist. Nach Ausführung der Integrationen über \mathbf{R} und \mathbf{I} nimmt damit die Gleichung (2.33) die folgende Form an:

$$Z_0(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \exp\left[-\beta \frac{m}{2} \Omega^2 (\bar{x} - \Delta_x)^2\right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \exp\left[i y (x_0 - \bar{x}) - \frac{a}{2} y^2\right] F. \quad (2.47)$$

Dabei wurde in der voranstehenden Gleichung die folgende Abkürzung benutzt ¹²:

$$a(\Omega) = \frac{2}{\beta m} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2}. \quad (2.48)$$

Die voranstehende unendliche Summe, die die Funktion $a = a(\Omega)$ definiert, läßt sich explizit berechnen (siehe Referenz [8], S.40, 1.445). Das Ergebnis ist dem Anhang (A.3), Gleichung (A.11) zu entnehmen.

Nach einer quadratischen Ergänzung des Exponenten (bezüglich der Variablen y) läßt sich die in der Gleichung (2.47) auftretende Integration über y sofort ausführen. Es ergibt sich das folgende leicht zu lösende Gauß'sche Integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \exp\left[-\frac{a}{2} \left(y - i \frac{(x_0 - \bar{x})}{a}\right)^2 - \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a}\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \exp\left[-\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a}\right]. \quad (2.49)$$

Setzt man die sich aus dem Anhang (A.3) ergebende Identität

$$\beta m \Omega^2 = \frac{G(\Omega)}{a(\Omega)}, \quad (2.50)$$

¹²Darüber hinaus wurde in der Gleichung (2.47) anstelle von $a(\Omega)$ und $F(\Omega)$ für die betreffenden Funktionen einfach die Notation a und F verwendet, also auf eine explizite Angabe der Abhängigkeit dieser Funktionen vom Argument Ω verzichtet. Im folgenden, d.h. insbesondere nach der Einführung weiterer Funktionen des Anhangs (A.3), wird sich herausstellen, daß diese Vorgehensweise unabdingbar ist, will man den Formelapparat in einem leserlichen Rahmen halten. Dies sollte allerdings zu keiner Verwirrung führen, da die Argumentabhängigkeit dieser Funktionen stets dieselbe ist. Man sollte lediglich im Hinterkopf behalten, daß es sich dabei um Funktionen, und nicht etwa um Konstanten handelt. In diesem Zusammenhang sei jedoch darauf hingewiesen, daß – sollte im folgenden einmal ein Term in runden Klammern auf einen Funktionsnamen, d.h. genauer “Funktionsbuchstaben”, folgen – es sich nicht um eine Argumentabhängigkeit, sondern um eine Multiplikation handelt. Beispielsweise wäre $F(x_0 - \bar{x})$ als $F(\Omega) \cdot (x_0 - \bar{x})$ zu verstehen!

sowie das Ergebnis (2.49) für die Integration über y in die Gleichung (2.47) ein, so ergibt sich der folgende Ausdruck:

$$Z_0(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \exp\left[-\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a} - \frac{G(\bar{x} - \Delta_x)^2}{2a}\right] F. \quad (2.51)$$

An dieser Stelle läßt sich die allgemeine Rechnung nicht mehr fortführen, da die Integration über μ selbstverständlich davon abhängt, in welcher Weise die Variable μ belegt ist. Daher spaltet sich hier die Rechnung in die drei verschiedenen Fälle a, b und c auf:

Fall a

Aus der Tabelle (2.28) geht hervor, daß im Fall a keine weitere Rechnung mehr notwendig ist. Deshalb entnimmt man in diesem Fall der Gleichung (2.51) unmittelbar das folgende Endergebnis:

$$Z_0(\bar{x}, x_0) = \frac{F}{\sqrt{2\pi a}} \exp\left[-\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a} - \frac{G(\bar{x} - \Delta_x)^2}{2a}\right]. \quad (2.52)$$

Fall b

Aus der Tabelle (2.28) geht hervor, daß man im Fall b noch über die Variable x_0 integrieren muß. Dabei ergibt sich aus der Gleichung (2.51) unmittelbar das folgende leicht zu lösende Gauß'sche Integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \exp\left[-\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a}\right] = 1. \quad (2.53)$$

Damit ergibt sich sofort das Endergebnis für den Fall b:

$$Z_0(\bar{x}) = F \exp\left[-\frac{G(\bar{x} - \Delta_x)^2}{2a}\right]. \quad (2.54)$$

Fall c

Aus der Tabelle (2.28) geht hervor, daß man im Fall c noch über die Variable \bar{x} integrieren muß. Dazu ist es notwendig, daß man den betreffenden Integranden, d.h. genauer gesagt den in der Gleichung (2.51) auftauchenden Exponenten, umformt. Wenn man den Faktor $-\frac{1}{2a}$ des Arguments der betreffenden Exponentialfunktion zunächst unberücksichtigt läßt, ergibt sich:

$$(x_0 - \bar{x})^2 + G(\bar{x} - \Delta_x)^2$$

$$\begin{aligned}
&= (1+G) \left(x_0 - \bar{x} - \frac{G}{1+G} (x_0 - \Delta_x) \right)^2 - \frac{G^2 (x_0 - \Delta_x)^2}{1+G} + G (x_0 - \Delta_x)^2 \\
&= (1+G) \left(x_0 - \bar{x} - \frac{G}{1+G} (x_0 - \Delta_x) \right)^2 + \frac{G (x_0 - \Delta_x)^2}{1+G}.
\end{aligned} \tag{2.55}$$

Nach dieser Umformung stößt man auf das folgende leicht zu lösende Gauß'sche Integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \exp \left[-\frac{1+G}{2a} \left(x_0 - \bar{x} - \frac{G}{1+G} (x_0 - \Delta_x) \right)^2 \right] = \frac{1}{\sqrt{1+G}}. \tag{2.56}$$

Setzt man das voranstehende Ergebnis in die Ausgangsgleichung (2.51) ein, so erhält man das Endergebnis für den Fall c:

$$Z_0(x_0) = \frac{F}{\sqrt{1+G}} \exp \left[-\frac{G (x_0 - \Delta_x)^2}{2a(1+G)} \right]. \tag{2.57}$$

2.2.3 Die Berechnung der Größe $\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)}$

In diesem Abschnitt soll die Berechnung des Versuchserwartungswertes $\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)}$, der in der Gleichung (2.34) definiert wurde, erfolgen. Dazu ist es zunächst notwendig, den Ausdruck $f[x(\tau)]$ so umzuformen, daß die direkte Abhängigkeit der Funktion f vom Pfad $x(\tau)$ verschwindet:

$$f[x(\tau)] = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \delta(\xi - x(\tau)). \tag{2.58}$$

Formt man jetzt die oben auftretende δ -Funktion mit Hilfe der Fourier Entwicklung des Pfades $x(\tau)$ (siehe Gleichung (2.15)) um, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}
f[x(\tau)] &= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \exp[iz(\xi - \bar{x})] \cdots \\
&\cdots \exp \left[-iz 2 \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ R_m \cos(\omega_m \tau) - I_m \sin(\omega_m \tau) \right\} \right].
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Kombiniert man nun die voranstehende Gleichung mit den Gleichungen (2.19) und (2.44), so bekommt der Integrand auf der rechten Seite von Gleichung (2.34) das folgende Aussehen:

$$\begin{aligned}
&\delta(x_0 - x_s) f[x(\tau)] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_0^{(\nu)}[x(\tau)] \right] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \exp[iz(\xi - \bar{x}) + iy(x_0 - \bar{x})] \cdots \\
&\cdots \exp \left[-iz 2 \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ R_m \cos(\omega_m \tau) - I_m \sin(\omega_m \tau) \right\} - iy 2 \sum_{m=1}^{\infty} R_m \right] \cdots \\
&\cdots \exp \left[-\beta \frac{m}{2} \Omega^2 (\bar{x} - \Delta_x)^2 - \beta m \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2) (R_m^2 + I_m^2) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \exp[iz(\xi - \bar{x}) + iy(x_0 - \bar{x})] \cdots \\
&\cdots \exp\left[-\beta \frac{m}{2} \Omega^2 (\bar{x} - \Delta_x)^2 - \frac{z^2}{\beta m} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{[\cos(\omega_m \tau) + y/z]^2 + \sin^2(\omega_m \tau)}{\omega_m^2 + \Omega^2}\right] \cdots \quad (2.60) \\
&\cdots \exp\left[-\beta m \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2) ([R_m + \Delta R_m]^2 + [I_m - \Delta I_m]^2)\right].
\end{aligned}$$

Dabei wurde in der voranstehenden Gleichung die folgende Abkürzung benutzt:

$$\Delta R_m = \frac{iz}{\beta m} \frac{\cos(\omega_m \tau) + y/z}{\omega_m^2 + \Omega^2} \quad \Delta I_m = \frac{iz}{\beta m} \frac{\sin(\omega_m \tau)}{\omega_m^2 + \Omega^2}. \quad (2.61)$$

Analog zur Vorgehensweise des vorherigen Abschnitts ist man auch nun in die Lage versetzt, die in der Gleichung (2.34) auftretenden Integrationen über \mathbf{R} und \mathbf{I} explizit lösen zu können. Wiederum erhält man die Funktion $F = F(\Omega)$ als Ergebnis (siehe Anhang (A.2)). Damit reduziert sich die Gleichung (2.34) auf die folgende Form:

$$\begin{aligned}
\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)} &= \frac{F}{Z_0(\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \exp[-\beta \frac{m}{2} \Omega^2 (\bar{x} - \Delta_x)^2] \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \cdots \\
&\cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \exp\left[iz(\xi - \bar{x}) + iy(x_0 - \bar{x}) - \frac{a}{2}(y^2 + z^2) - byz\right]. \quad (2.62)
\end{aligned}$$

Dabei wurde in der voranstehenden Gleichung die folgende Abkürzung benutzt:

$$b(\Omega, \tau) = \frac{2}{\beta m} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\cos(\omega_m \tau)}{\omega_m^2 + \Omega^2}. \quad (2.63)$$

Analog zur unendlichen Summe, die die Funktion $a(\Omega)$ definierte (siehe die Gleichung (2.48)), läßt sich auch die oben auftretende unendliche Summe explizit berechnen. Das Ergebnis folgt wiederum aus [8], S.40, 1.445 und ist im Anhang (A.3), Gleichung (A.12) angegeben. Als nächster Rechenschritt ergibt sich die Ausführung der im zweiten Teil der Gleichung (2.62) auftretenden Integrationen über z und y . In beiden Fällen stößt man auf einfach zu lösende Gauß'sche Integrale:

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \exp[iz(\xi - \bar{x})] \exp\left[-\frac{a}{2}z^2 + \frac{[bz - i(x_0 - \bar{x})]^2}{2a}\right] \cdots \\
&\cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \exp\left[-\frac{a}{2}\left(y + \frac{bz - i(x_0 - \bar{x})}{a}\right)^2\right] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \exp\left[-\frac{(az)^2 - [bz - i(x_0 - \bar{x})]^2 - 2aiz(\xi - \bar{x})}{2a}\right] \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \exp\left[-\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a} - \frac{[a(\xi - \bar{x}) - b(x_0 - \bar{x})]^2}{2a(a^2 - b^2)}\right] \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \dots \\
&\dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \exp\left[-\frac{(a^2 - b^2)}{2a} \left(z + \frac{a(\xi - \bar{x}) - b(x_0 - \bar{x})}{i(a^2 - b^2)}\right)^2\right] \\
&= \exp\left[-\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a} - \frac{[a(\xi - \bar{x}) - b(x_0 - \bar{x})]^2}{2a(a^2 - b^2)}\right] \frac{1}{2\pi \sqrt{a^2 - b^2}}. \tag{2.64}
\end{aligned}$$

Setzt man nun das voranstehende Ergebnis in die Gleichung (2.62) ein, so ergibt sich, wenn man wiederum von der Beziehung (2.50) Gebrauch macht, das folgende Zwischenergebnis:

$$\begin{aligned}
\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)} &= \frac{F}{Z_0(\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \frac{1}{2\pi a} \frac{1}{\sqrt{1 - c^2}} \dots \\
&\dots \exp\left[-\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a} - \frac{G(\bar{x} - \Delta_x)^2}{2a} - \frac{[\xi - \bar{x} - c(x_0 - \bar{x})]^2}{2a(1 - c^2)}\right]. \tag{2.65}
\end{aligned}$$

Dabei wurde, um im folgenden Schreibarbeit zu sparen, der Quotient von a und b durch die Funktion c ersetzt:

$$c(\Omega, \tau) = \frac{b(\Omega, \tau)}{a(\Omega)}. \tag{2.66}$$

An dieser Stelle ist es, wie schon im vorherigen Abschnitt bei der Berechnung des Integrals über μ , notwendig, daß man die Fälle a , b und c getrennt voneinander betrachtet. Dies soll im folgenden geschehen:

Fall a

Da in diesem Fall keine weitere Integration mehr ausgeführt werden muß, erhält man aus der Gleichung (2.65) unmittelbar das Endergebnis, indem man für $Z_0(\nu)$ den entsprechenden Ausdruck (2.52) einsetzt und alle doppelt auftretenden Terme wegekürzt:

$$\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\bar{x}, x_0)} = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{\sqrt{1 - c^2}} \exp\left[-\frac{[\xi - \bar{x} - c(x_0 - \bar{x})]^2}{2a(1 - c^2)}\right]. \tag{2.67}$$

Fall b

Bevor man das in diesem Fall auftretende Integral über x_0 ausführt, erweist es sich als günstig, zunächst in die Gleichung (2.65) den betreffenden Ausdruck für $Z_0(\nu)$, d.h. die Gleichung (2.54), einzusetzen und alle doppelt auftretenden Terme wegzukürzen. Man erhält:

$$\begin{aligned}
\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\bar{x})} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \frac{1}{2\pi a} \frac{1}{\sqrt{1 - c^2}} \dots \\
&\dots \exp\left[-\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a} - \frac{[\xi - \bar{x} - c(x_0 - \bar{x})]^2}{2a(1 - c^2)}\right]. \tag{2.68}
\end{aligned}$$

Man überzeugt sich leicht davon, daß das Argument der voranstehenden Exponentialfunktion unter Vernachlässigung des Faktors $\frac{-1}{2a(1-c^2)}$ wie folgt umgeschrieben werden kann:

$$\begin{aligned} & (1-c^2)(x_0-\bar{x})^2 + [\xi-\bar{x}-c(x_0-\bar{x})]^2 \\ & = [x_0-\bar{x}-c(\xi-\bar{x})]^2 + (1-c^2)(\xi-\bar{x})^2. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Mit Hilfe dieser Umformung reduziert sich das in der Gleichung (2.68) auftauchende Integral über x_0 auf das folgende leicht zu lösende Gauß'sche Integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \exp\left[-\frac{[x_0-\bar{x}-c(\xi-\bar{x})]^2}{2a(1-c^2)}\right] = \sqrt{2\pi a} \sqrt{1-c^2}. \quad (2.70)$$

Unter Verwendung der beiden voranstehenden Beziehungen gewinnt man aus der Gleichung (2.68) sofort das Endergebnis für den Fall b:

$$\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\bar{x})} = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \exp\left[-\frac{(\xi-\bar{x})^2}{2a}\right]. \quad (2.71)$$

Fall c

Bevor man das in diesem Fall auftretende Integral über \bar{x} ausführen kann, muß man das Argument der Exponentialfunktion in Gleichung (2.65) umformen. Mit Hilfe der trivialen Identität $\bar{x}-\Delta_x = (\bar{x}-x_0) + (x_0-\Delta_x)$ ergibt sich dabei unter Vernachlässigung des Faktors $\frac{-1}{2a(1-c^2)}$ der folgende Ausdruck:

$$\begin{aligned} & (1-c^2)(x_0-\bar{x})^2 + (1-c^2)G(\bar{x}-\Delta_x)^2 + [\xi-x_0+(1-c)(x_0-\bar{x})]^2 \\ & = (1-c)(2+G(1+c)) \left(x_0-\bar{x} - \frac{(1+c)G(x_0-\Delta_x) - (\xi-x_0)}{2+G(1+c)} \right)^2 - \end{aligned} \quad (2.72)$$

$$- (1-c) \frac{[(1+c)G(x_0-\Delta_x) - (\xi-x_0)]^2}{2+G(1+c)} + (1-c^2)G(x_0-\Delta_x)^2 + (\xi-x_0)^2. \quad (2.73)$$

Zum Integral über \bar{x} trägt nur die obere Zeile (2.72) der rechten Seite der voranstehenden Gleichung bei. Dabei ergibt sich erneut ein leicht zu lösendes Gauß'sches Integral:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp\left[-\frac{2+G(1+c)}{2a(1+c)} \left(x_0-\bar{x} - \frac{(1+c)G(x_0-\Delta_x) - (\xi-x_0)}{2+G(1+c)} \right)^2\right] \\ & = \sqrt{\frac{2\pi a(1+c)}{2+G(1+c)}}. \end{aligned} \quad (2.74)$$

Jetzt muß man noch die untere Zeile (2.73) der rechten Seite der obigen Gleichung vereinfachen. Dazu führt man eine quadratische Ergänzung bezüglich des Terms $(\xi - x_0)$ durch. Aufgrund der beiden Beziehungen

$$\left[2 + G(1 + c) \right] - (1 - c) = (1 + G)(1 + c) \quad (2.75)$$

$$\text{und} \quad 2(1 + G) - (1 - c)G = 2 + G(1 + c)$$

ergibt sich dabei aus dem Term (2.73) der folgende Ausdruck:

$$\begin{aligned} & \frac{(1 + G)(1 + c)}{2 + G(1 + c)} \left(\xi - x_0 + \frac{(1 - c)G(x_0 - \Delta_x)}{1 + G} \right)^2 - \frac{(1 - c)(1 - c^2)G^2(x_0 - \Delta_x)^2}{(2 + G(1 + c))(1 + G)} + \\ & \quad + \frac{(1 - c^2)G(2 + G(1 + c) - G(1 + c))(x_0 - \Delta_x)^2}{2 + G(1 + c)} \\ & = \frac{(1 + G)(1 + c)}{2 + G(1 + c)} \left(\xi - x_0 + \frac{(1 - c)G(x_0 - \Delta_x)}{1 + G} \right)^2 + \frac{(1 - c^2)G(x_0 - \Delta_x)^2}{1 + G}. \end{aligned} \quad (2.76)$$

Mit Hilfe der voranstehenden Gleichung, bei der noch immer der Faktor $\frac{-1}{2a(1-c^2)}$ unterdrückt ist, erhält man aus der Gleichung (2.65) unter Verwendung des Resultats (2.74) für das Integral über \bar{x} , sowie des Ausdrucks (2.57) für $Z_0(\nu)$ das Endergebnis für den Fall c:

$$\begin{aligned} \langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(x_0)} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \sqrt{\frac{1 + G}{2\pi a(1 - c)(2 + G(1 + c))}} \dots \\ &\dots \exp \left[-\frac{1 + G}{2a(1 - c)(2 + G(1 + c))} \left(\xi - x_0 + \frac{(1 - c)G(x_0 - \Delta_x)}{1 + G} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.77)$$

Zusammenfassung

Wenngleich die drei Fälle a, b und c bei der Berechnung des Versuchserwartungswerts $\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)}$ am Ende keine gemeinsame Behandlung mehr erlaubten, so ist es dennoch möglich, die betreffenden Endergebnisse kompakt in einem einzigen Ausdruck zusammenzufassen. Dazu definiert man das folgende von der Funktion f und den Variablen ζ und σ abhängige Funktional $\Xi[f(\cdot) | \zeta | \sigma]$:

$$\Xi[f(\cdot) | \zeta | \sigma] = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp \left[-\frac{(\xi - \zeta)^2}{2\sigma} \right]. \quad (2.78)$$

Mit Hilfe der voranstehenden Definition ergeben die drei Gleichungen (2.67), (2.71) und (2.77) unmittelbar die folgende einfache Identität:

$$\langle f[x(\tau)] \rangle_0^{(\nu)} = \Xi[f(\cdot) | \zeta | \sigma]. \quad (2.79)$$

Dabei besitzen die Variablen ζ und σ nun jedoch eine relativ komplizierte funktionale Form, die vom jeweils betrachteten Fall abhängt. Es erweist sich wiederum als günstig, diese vom Fall abhängige Belegung der Variablen ζ und σ mit Hilfe einer kleinen Tabelle aufzuschlüsseln:

Fall	ζ	σ
a	$\bar{x} + c(x_0 - \bar{x})$	$a(1 - c^2)$
b	\bar{x}	a
c	$x_0 - \frac{G(1-c)}{1+G}(x_0 - \Delta_x)$	$a(1 - c) \frac{2+G(1+c)}{1+G}$

(2.80)

Für eine Reihe von Funktionen f stellt sich die Berechnung des Funktionals $\Xi[f(\cdot) | \zeta | \sigma]$ als nicht sehr schwierig heraus. In der folgenden Tabelle werden für drei im Zuge dieser Arbeit relevanten Funktionen f die gemäß Definition (2.78) berechneten Resultate aufgelistet:

$f(\cdot)$	$\Xi[f(\cdot) \zeta \sigma]$
$(\cdot - \Delta)^2$	$\sigma + (\zeta - \Delta)^2$
$(\cdot - \Delta)^4$	$3\sigma^2 + 6\sigma(\zeta - \Delta)^2 + (\zeta - \Delta)^4$
$\cos(\cdot - \Delta)$	$\cos(\zeta - \Delta) \exp(-\frac{\sigma}{2})$

(2.81)

2.2.4 Die Berechnung der Größe $\left\langle V_0^{(\nu)}[x(\tau)] \right\rangle_0^{(\nu)}$

In diesem Abschnitt soll der Versuchserwartungswert des Versuchspotentials

$$V_0^{(\nu)}[x(\tau)] = \frac{m}{2}\Omega^2 (x(\tau) - \Delta_x)^2 \quad (2.82)$$

berechnet werden. Dies geschieht am einfachsten dadurch, daß man in den Formeln des vorherigen Abschnitts die Funktion f durch das Versuchspotential $V_0^{(\nu)}$ ersetzt. Man überzeugt sich leicht davon, daß die explizite Abhängigkeit des Versuchspotentials $V_0^{(\nu)}$ von der Variablen ν bei dieser Ersetzung keinen Einfluß auf die Gültigkeit der dortigen

Formeln besitzt. Mit Hilfe der Identität (2.79) und der Tabelle (2.81) ergibt sich daher unmittelbar das folgende Resultat:

$$\left\langle V_0^{(\nu)}[x(\tau)] \right\rangle_0^{(\nu)} = \frac{m}{2} \Omega^2 \left(\sigma + (\zeta - \Delta_x)^2 \right). \quad (2.83)$$

Setzt man den soeben erhaltenen Ausdruck in die rechte Seite der Gleichung (2.38) ein, so stellt man fest, daß auch noch eine Integration über τ ausgeführt werden muß. Dies soll im folgenden geschehen. Da die Belegung der Variablen ζ und σ fallabhängig ist, erweist es sich wiederum als notwendig, daß man die Fälle a, b und c getrennt voneinander behandelt. Da der im Versuchspotential $V_0^{(\nu)}$ auftretende Vorfaktor $\frac{m}{2} \Omega^2$ nicht von τ abhängt, ist er für die Berechnung des Integrals über τ irrelevant, und wird daher im folgenden nicht mehr berücksichtigt.

Fall a

Setzt man gemäß Tabelle (2.80) die betreffenden Ausdrücke für ζ und σ in die Gleichung (2.83) ein, so ergibt sich unmittelbar der folgende Ausdruck:

$$\begin{aligned} & \left\langle (x(\tau) - \Delta_x)^2 \right\rangle_0^{(\bar{x}, x_0)} \\ &= a(1 - c^2) + \left(\bar{x} + c(x_0 - \bar{x}) - \Delta_x \right)^2 \\ &= a + (\bar{x} - \Delta_x)^2 + 2c(x_0 - \bar{x})(\bar{x} - \Delta_x) + c^2 \left((x_0 - \bar{x})^2 - a \right). \end{aligned} \quad (2.84)$$

In der voranstehenden Gleichung steckt die Abhängigkeit von der Integrationsvariablen τ allein in den beiden Größen c und c^2 . Diese lassen sich leicht über τ integrieren. Als Ergebnis erhält man dabei die folgenden beiden Identitäten:

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} c = 0 \quad (2.85)$$

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} c^2 = \frac{F^2 + G - 1}{2G^2}. \quad (2.86)$$

Mit Hilfe der beiden voranstehenden Integrale läßt sich die Gleichung (2.84) sofort über τ integrieren. Das betreffende Endergebnis lautet:

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \left\langle (x(\tau) - \Delta_x)^2 \right\rangle_0^{(\bar{x}, x_0)} = a + \Delta a + (\bar{x} - \Delta_x)^2. \quad (2.87)$$

Dabei wurde in der voranstehenden Gleichung die folgende Abkürzung benutzt:

$$\Delta a = \left((x_0 - \bar{x})^2 - a \right) \frac{F^2 + G - 1}{2G^2} = \left[\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{a} - 1 \right] \frac{F^2 + G - 1}{2\beta m \Omega^2 G}. \quad (2.88)$$

Fall b

In diesem Fall entnimmt man der Tabelle (2.80), daß weder ζ noch σ von der Integrationsvariablen τ abhängen. Daher genügt es, die betreffenden Ausdrücke für ζ und σ in die Gleichung (2.83) einzusetzen, um das Endergebnis für den Fall b zu erhalten:

$$\left\langle (x(\tau) - \Delta_x)^2 \right\rangle_0^{(\bar{x})} = a + (\bar{x} - \Delta_x)^2 = \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \left\langle (x(\tau) - \Delta_x)^2 \right\rangle_0^{(\bar{x})}. \quad (2.89)$$

Fall c

Wie man der Tabelle (2.80) entnimmt, ist in diesem Fall σ durch den folgenden Ausdruck gegeben:

$$\sigma = \frac{a}{1+G} \left(2(1-c) + G(1-c^2) \right). \quad (2.90)$$

Wie schon im Fall a, so steckt auch hier die Abhängigkeit von der Integrationsvariablen τ allein in den beiden Größen c und c^2 . Daher ergeben die beiden Integrale (2.85) und (2.86) sofort das folgende Zwischenergebnis:

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \sigma = \frac{a}{1+G} \left[2 + G - \frac{F^2 + G - 1}{2G} \right] = a - \frac{H}{\beta m \Omega^2}. \quad (2.91)$$

Dabei wurde die Funktion $H = H(\Omega)$ eingeführt, die wie folgt definiert ist:

$$H(\Omega) = \frac{1}{2} \left[\frac{F(\Omega)^2}{1+G(\Omega)} - 1 \right]. \quad (2.92)$$

Jetzt muß man noch den Term $(\zeta - \Delta_x)^2$ über τ integrieren. Dieser besitzt gemäß Tabelle (2.80) das folgende Aussehen:

$$(\zeta - \Delta_x)^2 = (x_0 - \Delta_x)^2 \left(1 - \frac{G(1-c)}{1+G} \right)^2 = (x_0 - \Delta_x)^2 \left(\frac{1+Gc}{1+G} \right)^2. \quad (2.93)$$

Auch in diesem Fall reduziert sich die Integration über τ auf die beiden Integrale (2.85) und (2.86). Man erhält daher unmittelbar das folgende Zwischenergebnis:

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} (\zeta - \Delta_x)^2 = \frac{(x_0 - \Delta_x)^2}{(1+G)^2} \left[1 + \frac{F^2 + G - 1}{2} \right] = (x_0 - \Delta_x)^2 \frac{1+H}{1+G}. \quad (2.94)$$

Kombiniert man die beiden Gleichungen (2.91) und (2.94), so erhält man das Endergebnis für den Fall c:

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \left\langle (x(\tau) - \Delta_x)^2 \right\rangle_0^{(x_0)} = a - \frac{H}{\beta m \Omega^2} + (x_0 - \Delta_x)^2 \frac{1+H}{1+G}. \quad (2.95)$$

2.2.5 Zusammenfassung

In diesem Abschnitt sollen alle in den drei vorherigen Abschnitten erzielten Resultate zusammengetragen und übersichtlich einander gegenübergestellt werden. Genauer gesagt bedeutet dies, daß nun die Gleichungen (2.38) und (2.41), die oben nur allgemein, d.h. fallunabhängig formuliert wurden, so dargestellt werden sollen, wie es sich im speziellen Fall a, b bzw. c aus den jeweiligen Rechnungen ergibt:

Fall a

In diesem Fall läßt sich für die Zustandssumme \mathcal{Z} eine untere Schranke \mathcal{Z}_a wie folgt konstruieren:

$$\mathcal{Z} \geq \mathcal{Z}_a = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \exp[-\beta \Phi(\bar{x}, x_0)]. \quad (2.96)$$

Dabei erhält man die Größe $\Phi(\bar{x}, x_0)$ durch Einsetzen der Beziehungen (2.52), (2.79), (2.87), und (2.50) in die Gleichung (2.38):

$$\begin{aligned} \Phi(\bar{x}, x_0) = & -\frac{\ln[F]}{\beta} + \frac{\ln[2\pi a]}{2\beta} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a\beta} + \\ & + \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \Xi[V(\cdot) \mid \zeta \mid \sigma] - \frac{m}{2}\Omega^2(a + \Delta a). \end{aligned} \quad (2.97)$$

Dabei gelten die folgenden Beziehungen:

$$\begin{aligned} \Delta a &= \frac{1}{\beta m \Omega^2} \left[\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{a} - 1 \right] \frac{F^2 + G - 1}{2G} \\ \zeta &= \bar{x} + c(x_0 - \bar{x}) \\ \sigma &= a(1 - c^2). \end{aligned} \quad (2.98)$$

Fall b

In diesem Fall läßt sich für die Zustandssumme \mathcal{Z} eine untere Schranke \mathcal{Z}_b wie folgt konstruieren:

$$\mathcal{Z} \geq \mathcal{Z}_b = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp[-\beta \Phi(\bar{x})]. \quad (2.99)$$

Dabei erhält man die Größe $\Phi(\bar{x})$ durch Einsetzen der Beziehungen (2.54), (2.79), (2.89), und (2.50) in die Gleichung (2.38):

$$\Phi(\bar{x}) = -\frac{\ln[F]}{\beta} + \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \Xi[V(\cdot) \mid \bar{x} \mid a] - \frac{m}{2}\Omega^2 a. \quad (2.100)$$

Da das Funktional $\Xi[V(\cdot) | \bar{x} | a]$ unabhängig von der Integrationsvariablen τ ist, kann man die voranstehende Gleichung wie folgt vereinfachen:

$$\Phi(\bar{x}) = -\frac{\ln[F]}{\beta} + \Xi[V(\cdot) | \bar{x} | a] - \frac{m}{2}\Omega^2 a. \quad (2.101)$$

Fall c

In diesem Fall läßt sich für die Zustandssumme \mathcal{Z} eine untere Schranke \mathcal{Z}_c wie folgt konstruieren:

$$\mathcal{Z} \geq \mathcal{Z}_c = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \exp[-\beta \Phi(x_0)]. \quad (2.102)$$

Dabei erhält man die Größe $\Phi(x_0)$ durch Einsetzen der Beziehungen (2.57), (2.79), (2.95), und (2.50) in die Gleichung (2.38):

$$\begin{aligned} \Phi(x_0) = & -\frac{\ln[F]}{\beta} + \frac{\ln[1+G]}{2\beta} + \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma] - \\ & - \frac{m}{2}\Omega^2 \left(a - \frac{H}{\beta m \Omega^2} + (x_0 - \Delta_x)^2 \frac{H}{1+G} \right). \end{aligned} \quad (2.103)$$

Dabei gelten die folgenden Beziehungen:

$$\begin{aligned} \zeta &= x_0 - \frac{G(1-c)}{1+G} (x_0 - \Delta_x) \\ \sigma &= a(1-c) \frac{2+G(1+c)}{1+G}. \end{aligned} \quad (2.104)$$

2.2.6 Die Minimierung

Wie bereits im Kapitel (2.2.1) erwähnt, ist die Gültigkeit der Ungleichung (2.39) keineswegs dadurch eingeschränkt, welche spezielle Wahl für das Versuchspotential $V_0^{(\nu)}$ getroffen wird. Insbesondere bedeutet dies, daß man bei der in dieser Arbeit vorgenommenen Festlegung des Versuchspotentials $V_0^{(\nu)}$ (siehe die Gleichung (2.42)) die Funktionen $\Omega = \Omega(\nu)$ und $\Delta_x = \Delta_x(\nu)$ als frei wählbare Parameter zur Verfügung stehen hat. Um eine möglichst große untere Schranke für die reduzierte Zustandssumme $Z(\nu)$ zu erhalten, kann man daher (für alle ν) versuchen, die rechte Seite der Ungleichung (2.39) durch Variation von $\Omega(\nu)$ und $\Delta_x(\nu)$ zu maximieren (bei festgehaltenem ν). Aufgrund der Monotonie der Exponentialfunktion ist das Problem der Maximierung von $e^{-\beta\Phi(\nu)}$ äquivalent zum Problem, die Funktion $\Phi(\nu)$ bezüglich der Variationsparameter $\Omega(\nu)$ und $\Delta_x(\nu)$ zu minimieren (bei festgehaltenem ν). Betrachtet man die Gleichungen (2.97) und (2.101), so stellt man fest, daß in den beiden Fällen a und b die Wahl von Δ_x irrelevant ist, da diese Größe bei der Berechnung von $\Phi(\bar{x}, x_0)$ bzw. $\Phi(\bar{x})$ herausgefallen ist. Daher genügt

es in diesen beiden Fällen, die Nullstellen der Ableitung $\frac{d\Phi}{d\Omega}$ zu bestimmen, um das entsprechende Minimum aufzuspüren. Im Fall c hingegen sind bei der Minimussuche die Nullstellen des Gradienten $(\frac{\partial\Phi}{\partial\Omega}, \frac{\partial\Phi}{\partial\Delta_x})$ maßgebend. Setzt man also in den beiden Fällen a und b die Ableitung von Φ gleich Null, so erhält man eine Gleichung zur Bestimmung desjenigen Ω , für das Φ minimal wird. Entsprechend liefert im Fall c das Verschwinden des Gradienten von Φ zwei Gleichungen zur Bestimmung desjenigen Paares (Ω, Δ_x) , für das Φ minimal wird. Im speziellen ergeben sich dabei die folgenden Bestimmungsgleichungen:

Fall a

$$\text{Wegen } \frac{dF}{d\Omega} = -\frac{FG}{\Omega} \quad (2.105)$$

ergibt die Ableitung des ersten Summanden der rechten Seite der Gleichung (2.97) den folgenden Ausdruck:

$$\frac{d}{d\Omega} \left(-\frac{\ln[F]}{\beta} \right) = \frac{G}{\beta\Omega} = m\Omega a. \quad (2.106)$$

$$\text{Wegen } \frac{da}{d\Omega} = -\frac{a}{\Omega} \frac{F^2 + G - 1}{G} \quad (2.107)$$

$$\text{und } \frac{d}{da} \left(\frac{\ln[2\pi a]}{2\beta} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a\beta} \right) = \frac{1}{2a\beta} \left(1 - \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{a} \right) \quad (2.108)$$

besitzt die Ableitung des zweiten und dritten Summanden der rechten Seite der Gleichung (2.97) das folgende Aussehen:

$$\frac{d}{d\Omega} \left(\frac{\ln[2\pi a]}{2\beta} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a\beta} \right) = m\Omega \Delta a. \quad (2.109)$$

Mit Hilfe der beiden Identitäten (2.106) und (2.109) prüft man leicht nach, daß die sich nach dem Ableiten der Gleichung (2.97) ergebende Bestimmungsgleichung für $\Omega(\bar{x}, x_0)$ die folgende Form hat:

$$\frac{d}{d\Omega} \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \Xi [V(\cdot) \mid \zeta \mid \sigma] - \frac{m}{2}\Omega^2 \frac{d}{d\Omega} (a + \Delta a) = 0. \quad (2.110)$$

Fall b

In diesem Fall ergibt sich die Bestimmungsgleichung für $\Omega(\bar{x})$ unmittelbar durch das Ableiten der Gleichung (2.101). Unter Verwendung der Beziehung (2.106) erhält man dabei die folgende Gleichung:

$$\frac{d}{d\Omega} \Xi [V(\cdot) \mid \bar{x} \mid a] - \frac{m}{2}\Omega^2 \frac{da}{d\Omega} = 0. \quad (2.111)$$

Man macht sich leicht klar, daß sich die voranstehende Gleichung wie folgt vereinfachen läßt:

$$\frac{d}{da} \Xi \left[V(\cdot) \mid \bar{x} \mid a \right] - \frac{m}{2} \Omega^2 = 0. \quad (2.112)$$

Fall c

Leitet man die rechte Seite der Gleichung (2.103) partiell nach Δ_x ab, so erhält man die eine der beiden Gleichungen, die im Fall c zur Bestimmung des Paares (Ω, Δ_x) notwendig sind:

$$\frac{\partial}{\partial \Delta_x} \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \Xi \left[V(\cdot) \mid \zeta \mid \sigma \right] + m\Omega^2(x_0 - \Delta_x) \frac{H}{1+G} = 0. \quad (2.113)$$

Leitet man den zweiten Summanden der rechten Seite der Gleichung (2.103) partiell nach Ω ab, so ergibt sich wegen

$$\frac{dG}{d\Omega} = \frac{G+1-F^2}{\Omega} \quad (2.114)$$

unmittelbar der folgende Ausdruck:

$$\frac{d}{d\Omega} \left(\frac{\ln[1+G]}{2\beta} \right) = -\frac{H}{\beta\Omega}. \quad (2.115)$$

Jetzt erhält man die zweite der beiden Bestimmungsgleichungen des Falles c, indem man mit Hilfe der beiden Identitäten (2.106) und (2.115) die Gleichung (2.103) partiell nach Ω ableitet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Omega} \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \Xi \left[V(\cdot) \mid \zeta \mid \sigma \right] - \frac{m}{2} \Omega^2 \frac{\partial}{\partial \Omega} \left(a - \frac{H}{\beta m \Omega^2} \right) - \\ - \frac{\partial}{\partial \Omega} \left(\frac{m}{2} \Omega^2 (x_0 - \Delta_x)^2 \frac{H}{1+G} \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.116)$$

$$\text{Wegen} \quad \frac{m}{2} \Omega^2 \frac{d}{d\Omega} \left(\frac{1}{1+G} \right) = m\Omega \frac{H}{1+G} \quad (2.117)$$

läßt sich der letzte Summand auf der linken Seite der voranstehenden Gleichung in eine Form bringen, die im nächsten Abschnitt von Nutzen sein wird. Die zweite Bestimmungsgleichung bekommt damit das folgende Aussehen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Omega} \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \Xi \left[V(\cdot) \mid \zeta \mid \sigma \right] - \frac{m}{2} \Omega^2 \frac{\partial}{\partial \Omega} \left(a - \frac{H}{\beta m \Omega^2} \right) - \\ - \frac{m}{2} \Omega^2 \frac{\partial}{\partial \Omega} \left((x_0 - \Delta_x)^2 \frac{1+H}{1+G} \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.118)$$

2.2.7 Der harmonische Oszillator

In diesem Abschnitt soll untersucht werden, welche Resultate die drei Näherungsverfahren a, b und c liefern, wenn das Potential V , das angenähert werden soll, dem Potential eines harmonischen Oszillators entspricht. Genauer gesagt, bedeutet dies, daß das folgende Potential besprochen werden soll:

$$V(x) = \frac{m}{2}\omega^2(x - \Delta)^2. \quad (2.119)$$

Dabei bezeichnet ω die Frequenz des Oszillators und Δ eine beliebige Verschiebung im Ort. Selbstverständlich erwartet man, da auch das Versuchspotential $V_0^{(\nu)}$ harmonischen Ursprungs ist, daß man in allen drei Fällen das exakte quantenmechanische Ergebnis für die Zustandssumme \mathcal{Z}_{osc} des harmonischen Oszillators bekommt. Dieses lautet (siehe z.B. die Referenz [6]):

$$\mathcal{Z}_{osc} = \frac{1}{2 \sinh[\frac{\hbar\beta}{2}\omega]} = \frac{F(\omega)}{\hbar\beta\omega}. \quad (2.120)$$

Um die Näherungsverfahren anwenden zu können, muß man den Ausdruck

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \left\langle (x(\tau) - \Delta)^2 \right\rangle_0^{(\nu)} \quad (2.121)$$

berechnen. In den beiden Fällen a und b kann dies einfach dadurch geschehen, daß man die Ergebnisse des Abschnitts (2.2.4) auf die hier auftretende Problemstellung überträgt, indem man Δ_x durch Δ ersetzt. Im Fall c jedoch ist diese einfache Variablensubstitution nicht mehr möglich, da die Größe Δ_x nicht nur im Versuchspotential $V_0^{(\nu)}$ vorkommt, sondern auch in ζ (vergleiche dazu die Tabelle (2.80)). Wiederum müssen die einzelnen Fälle getrennt voneinander betrachtet werden:

Fall a

Setzt man den sich unmittelbar aus der Gleichung (2.87) ergebenden Ausdruck

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \Xi [V_{osc}(\cdot) | \zeta | \sigma] = \frac{m}{2}\omega^2 [a + \Delta a + (\bar{x} - \Delta)^2] \quad (2.122)$$

in die Bestimmungsgleichung (2.110) für $\Omega(\bar{x}, x_0)$ ein, so erhält man:

$$\frac{m}{2} (\omega^2 - \Omega^2) \frac{d}{d\Omega} (a + \Delta a) = 0. \quad (2.123)$$

Daraus folgt sofort die Bedingung: $\Omega^2 = \omega^2$. (2.124)

Setzt man die soeben erzielten Resultate (2.122) und (2.124) in die Gleichungen (2.97) und (2.96) ein, so erhält man für \mathcal{Z}_{osc} die folgende optimale untere Schranke \mathcal{Z}_a :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_a = & F(\omega) \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp\left[-\beta \frac{m}{2}\omega^2 (\bar{x} - \Delta)^2\right] \cdots \\ & \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \exp\left[-\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a}\right]. \end{aligned} \quad (2.125)$$

Wie man leicht sieht, ergibt in der voranstehenden Gleichung das Integral über x_0 den Faktor 1. Berechnet man im Anschluß daran das Integral über \bar{x} , so erhält man sofort die gesuchte Identität: $\mathcal{Z}_{osc} = \mathcal{Z}_a$.

Fall b

Der Fall b gestaltet sich völlig analog zum Fall a. Zunächst ergibt sich direkt aus der Gleichung (2.89) der folgende Ausdruck:

$$\Xi \left[V_{osc}(\cdot) \mid \bar{x} \mid a \right] = \frac{m}{2}\omega^2 \left[a + (\bar{x} - \Delta)^2 \right]. \quad (2.126)$$

Setzt man nun die voranstehende Identität in die Bestimmungsgleichung (2.112) für $\Omega(\bar{x})$ ein, so erhält man:

$$\frac{m}{2}\omega^2 - \frac{m}{2}\Omega^2 = 0. \quad (2.127)$$

Wie im Fall a folgt daraus sofort die Bedingung: $\Omega^2 = \omega^2$. (2.128)

Mit Hilfe der beiden Beziehungen (2.126) und (2.128), sowie unter Verwendung der Gleichungen (2.101) und (2.99) erhält im Fall b die optimale untere Schranke \mathcal{Z}_b das folgende Aussehen:

$$\mathcal{Z}_b = F(\omega) \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp\left[-\beta \frac{m}{2}\omega^2 (\bar{x} - \Delta)^2\right]. \quad (2.129)$$

Nun läßt sich leicht nachvollziehen, daß man auch im Fall b nach der Ausführung der Integration über \bar{x} auf das exakte Ergebnis (2.120) stößt.

Fall c

Wie schon am Anfang dieses Abschnitts erwähnt, ist die Rechnung im Fall c etwas komplizierter als in den beiden Fällen a und b. Zunächst erhält man analog zur Gleichung (2.83) das folgende Zwischenergebnis:

$$\begin{aligned} \left\langle (x(\tau) - \Delta)^2 \right\rangle_0^{(x_0)} &= \sigma + (\zeta - \Delta)^2 \\ &= \sigma + (\zeta - \Delta_x)^2 + 2(\Delta_x - \Delta)(\zeta - \Delta_x) + (\Delta_x - \Delta)^2. \end{aligned} \quad (2.130)$$

Will man in der voranstehenden Gleichung den dritten Summanden über τ integrieren, so stößt man auf das folgende Integral, das unter Heranziehung der Tabelle (2.80), sowie der Gleichung (2.85) leicht gelöst werden kann:

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} (\zeta - \Delta_x) = \int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} (x_0 - \Delta_x) \frac{1+Gc}{1+G} = \frac{x_0 - \Delta_x}{1+G}. \quad (2.131)$$

Mit Hilfe der drei Integrale (2.131), (2.91) und (2.94) kann man nun die zweite Zeile der Gleichung (2.130) über τ integrieren. Man erhält:

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \Xi [V_{osc}(\cdot) | \zeta | \sigma] = \frac{m}{2}\omega^2 \left(a - \frac{H}{\beta m \Omega^2} + (x_0 - \Delta_x)^2 \frac{1+H}{1+G} \right) + \quad (2.132)$$

$$+ \frac{m}{2}\omega^2 \left(2(\Delta_x - \Delta) \frac{x_0 - \Delta_x}{1+G} + (\Delta_x - \Delta)^2 \right).$$

Nun kann man den voranstehenden Ausdruck in die erste Bestimmungsgleichung (2.113) für das Paar (Ω, Δ_x) einsetzen:

$$m\omega^2 \left(-(x_0 - \Delta_x) \frac{1+H}{1+G} + \frac{(x_0 - \Delta_x) - (\Delta_x - \Delta)}{1+G} + (\Delta_x - \Delta) \right) + \quad (2.133)$$

$$+ m\Omega^2 (x_0 - \Delta_x) \frac{H}{1+G} = 0.$$

Wie man leicht sieht, ist die obige Gleichung erfüllt, wenn gilt:

$$\begin{aligned} \Omega^2 &= \omega^2 \\ \Delta_x &= \Delta \end{aligned} \quad (2.134)$$

Aufgrund der Identität $\Delta_x = \Delta$ verschwindet der zweite Summand auf der rechten Seite der Gleichung (2.132). Damit prüft man leicht nach, daß auch die zweite Bestimmungsgleichung (2.118) des Falles c erfüllt ist. Setzt man außerdem die Wahl (2.134), sowie die Beziehung (2.132) in die Gleichungen (2.103) und (2.102) ein, so erhält man für \mathcal{Z}_{osc} die folgende optimale untere Schranke \mathcal{Z}_c :

$$\mathcal{Z}_c = F(\omega) \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \frac{1}{\sqrt{1+G}} \exp \left[-\beta \frac{m}{2} \omega^2 \frac{(x_0 - \Delta)^2}{1+G} \right]. \quad (2.135)$$

Nach der Ausführung des Integrals über x_0 erhält man auch in diesem Fall das exakte Ergebnis (2.120).

2.3 Die Ortsverteilung $\rho(x_0)$

Wie bereits am Anfang des Abschnitts (2.2.1) erwähnt, läßt sich die reduzierte Zustandssumme $Z(\bar{x}, x_0)$ als ein unvollständig ausgeführtes Pfadintegral auffassen, bei dem lediglich über all diejenigen Pfade $x(\tau)$ integriert wird, die den Mittelweg \bar{x} und den Anfangs- (=End)Punkt x_0 besitzen. Integriert man daher die reduzierte Zustandssumme $Z(\bar{x}, x_0)$

über den Mittelweg \bar{x} , so erhält man einen Ausdruck, der mit einem Pfadintegral gleichzusetzen ist, bei dem hinsichtlich der Auswahl der Integrationspfade $x(\tau)$ nur noch die Einschränkung besteht, daß diese den Anfangs-(=End)Punkt x_0 besitzen. In diesem Sinne läßt sich die folgende Beziehung aufstellen, die leicht mit Hilfe der Gleichungen (2.9) und (2.23) bewiesen werden kann:

$$\int_{x_0}^{x_0} \mathcal{D}[x(\tau)] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x(\tau)]\right] = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} Z(\bar{x}, x_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} Z(x_0). \quad (2.136)$$

Mit Hilfe der Beziehung (2.5), sowie der Ungleichung (2.39) ergeben sich aus der voranstehenden Gleichung unmittelbar die folgenden zwei unteren Schranken für die Diagonalmatrixelemente des Operators $e^{-\beta\hat{H}}$:

$$\langle x_0 | e^{-\beta\hat{H}} | x_0 \rangle \geq \begin{cases} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp[-\beta \Phi(\bar{x}, x_0)] \\ \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \exp[-\beta \Phi(x_0)] \end{cases}. \quad (2.137)$$

Entsprechend lassen sich für die Diagonalmatrixelemente des kanonischen Zustandsoperators $\hat{W} = e^{-\beta\hat{H}}/\mathcal{Z}$, die man als die statistischen Gewichte $\rho(x_0)$ der Ortsverteilung auffassen kann¹³, die folgenden zwei Abschätzungen aufstellen:

$$\rho(x_0) \approx \begin{cases} \rho_a(x_0) = \frac{1}{\mathcal{Z}_a} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp[-\beta \Phi(\bar{x}, x_0)] \\ \rho_c(x_0) = \frac{1}{\mathcal{Z}_c} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \exp[-\beta \Phi(x_0)] \end{cases}. \quad (2.139)$$

Im Falle des Näherungsverfahrens b läßt sich aus der Größe $\Phi(\bar{x})$ nicht direkt eine Abschätzung für die Ortsverteilung $\rho(x_0)$ gewinnen. Allerdings schlägt Kleinert in seinem Buch [7] (Kapitel 5.8) die folgende Approximation vor, die er mit Hilfe einer weiteren, auf der Wick'schen Entwicklung beruhenden Näherung herleitet:

$$\rho(x_0) \approx \frac{1}{\mathcal{Z}_b} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \exp\left[-\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a}\right] \exp[-\beta \Phi(\bar{x})]. \quad (2.140)$$

¹³Man definiert die Ortsverteilung $\rho(x_0)$, deren physikalische Bedeutung anhand der Gleichung (2.141) deutlich wird, mit Hilfe der folgenden Identität:

$$\rho(x_0) = \langle x_0 | \hat{W} | x_0 \rangle. \quad (2.138)$$

An dieser Stelle sei noch erwähnt, daß man für Operatoren \hat{O} , die in der Ortsdarstellung diagonal sind, d.h. für die gilt: $\hat{O}|x\rangle = O(x)|x\rangle$ mit Hilfe der Ortsverteilung $\rho(x)$ leicht die entsprechenden thermodynamischen Erwartungswerte berechnen kann:

$$\langle O \rangle = \text{Tr}[\hat{O}\hat{W}] = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 O(x_0) \rho(x_0). \quad (2.141)$$

2.4 Das Problem periodischer Nebenbedingungen

In diesem Abschnitt soll erläutert werden, welche Modifikationen an den oben vorgestellten Näherungsverfahren vorgenommen werden müssen, wenn man mit Hilfe dieser Verfahren physikalische Systeme untersuchen will, die 2π -periodischen Nebenbedingungen unterworfen sind. Zuvor jedoch soll an dieser Stelle kurz dargestellt werden, welche prinzipiellen Veränderungen sich im Hinblick auf einige quantenmechanische Grundgleichungen ergeben, wenn man zu 2π -periodischen Nebenbedingungen übergeht:

Aufgrund der 2π -Periodizität ist man dazu geneigt, nicht mehr von der Ortsvariablen x zu sprechen, sondern vom (Phasen-)Winkel ϕ . Darüber hinaus erzwingt die 2π -Periodizität den Übergang vom kontinuierlichen zum diskreten Impulsspektrum. Deshalb soll im folgenden der (kanonische) Impuls nicht mehr mit p , sondern mit k bzw. $\hbar k$ bezeichnet werden. Mit Hilfe dieser Umbenennungen läßt sich der Übergang zu 2π -periodischen Nebenbedingungen in der Sprache der Quantenmechanik durch die folgenden drei Beziehungen formulieren:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x| \quad \longrightarrow \quad 1 = \int_0^{2\pi} d\phi |\phi\rangle\langle\phi| \quad (2.142)$$

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} |p\rangle\langle p| \quad \longrightarrow \quad 1 = \frac{1}{2\pi} \sum_k |k\rangle\langle k| \quad (2.143)$$

$$\langle x|p\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}px} \quad \longrightarrow \quad \langle\phi|k\rangle = e^{ik\phi}. \quad (2.144)$$

Im nächsten Abschnitt soll ein Ausdruck hergeleitet werden, der sich von seinem direkten Analogon (2.5) nur soweit unterscheidet, wie es aufgrund der 2π -periodischen Nebenbedingungen erforderlich ist:

2.4.1 Die Herleitung des “periodischen” Pfadintegrals

In diesem Abschnitt wird davon ausgegangen, daß der Leser mit der Herleitung der Identität (2.5) vertraut ist, so daß im folgenden nur diejenigen Rechenschritte ausführlicher

kommentiert werden, die eine hinsichtlich der Herleitung der Gleichung (2.5) modifizierte Vorgehensweise erfordern:

Unterteilt man das Intervall $[0, \hbar\beta]$ mit Hilfe der $(N + 1)$ äquidistanten Stützstellen τ_n in N Teilintervalle der Länge ϵ , d.h. definiert man

$$\tau_n = \frac{\hbar\beta}{N} n \quad (n = 0 \dots N) \quad (2.145)$$

und
$$\epsilon = \tau_n - \tau_{n-1} = \frac{\hbar\beta}{N} \quad (n = 1 \dots N), \quad (2.146)$$

so erhält man durch $(N - 1)$ -fache Anwendung der Gleichung (2.142) den folgenden Ausdruck:

$$\langle \phi_N | e^{-\beta\hat{H}} | \phi_0 \rangle = \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int_0^{2\pi} d\phi_n \right) \prod_{n=1}^N \langle \phi_n | e^{-\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{H}} | \phi_{n-1} \rangle. \quad (2.147)$$

Aufgrund der voranstehenden Gleichung ist es notwendig, daß man die Matrixelemente des Operators $e^{-\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{H}}$ berechnet. Dies läßt sich mit Hilfe der Gleichungen (2.143) und (2.144) (im Grenzfall $N \rightarrow \infty$) wie folgt realisieren:

$$\begin{aligned} \langle \phi_b | e^{-\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{H}} | \phi_a \rangle &= \frac{1}{2\pi} \sum_k \langle \phi_b | e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} \frac{p^2}{2m}} | k \rangle \langle k | e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} V(\hat{\phi})} | \phi_a \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_k \exp \left[i k (\phi_b - \phi_a) - \frac{\epsilon}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\phi_a) \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.148)$$

An dieser Stelle erfolgt der eigentliche Kunstgriff der Rechnung, mit dem es möglich wird, die Summe über den diskreten Impuls k wieder in ein Integral über den kontinuierlichen Impuls p umzuwandeln. Denn unter Verwendung der für eine beliebige Funktion f gültigen Beziehung

$$\frac{1}{2\pi} \sum_k f(k) = \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \delta(p/\hbar - k) f(p/\hbar), \quad (2.149)$$

sowie mit Hilfe der Poisson'schen Summenformel:

$$\sum_k \delta(p/\hbar - k) = \sum_l \exp \left[i 2\pi \frac{p}{\hbar} l \right] \quad (2.150)$$

läßt sich die Gleichung (2.148) noch weiter vereinfachen:

$$\begin{aligned} \langle \phi_b | e^{-\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{H}} | \phi_a \rangle &= \\ &= \sum_l \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left[i 2\pi \frac{p}{\hbar} l + \frac{i}{\hbar} p (\phi_b - \phi_a) - \frac{\epsilon}{\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} + V(\phi_a) \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_l \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left[-\frac{\epsilon}{2m\hbar} \left(p - i\frac{m}{\epsilon} (\phi_b - \phi_a + 2\pi l)\right)^2\right] \cdots \\
&\quad \cdots \exp\left[-\frac{\epsilon}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \frac{[\phi_b - \phi_a + 2\pi l]^2}{\epsilon^2} + V(\phi_a)\right)\right] \\
&= \sum_l \sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon\hbar}} \exp\left[-\frac{\epsilon}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \frac{[\phi_b - \phi_a + 2\pi l]^2}{\epsilon^2} + V(\phi_a)\right)\right]. \tag{2.151}
\end{aligned}$$

Setzt man nun das voranstehende Ergebnis in die Gleichung (2.147) ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}
\langle \phi_N | e^{-\beta\hat{H}} | \phi_0 \rangle &= \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int_0^{2\pi} d\phi_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \sum_{l_n} \sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon\hbar}} \right) \cdots \\
&\quad \cdots \exp\left[-\frac{\epsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left(\frac{m}{2} \frac{[\phi_n - \phi_{n-1} + 2\pi l_n]^2}{\epsilon^2} + V(\phi_{n-1}) \right)\right]. \tag{2.152}
\end{aligned}$$

Jetzt ist es günstig, in der voranstehenden Gleichung die Summenvariablen folgendermaßen von (l_n) nach (λ_n) zu transformieren:

$$\lambda_n = \sum_{i=1}^n l_i \quad \Longleftrightarrow \quad l_n = \lambda_n - \lambda_{n-1} \quad (\lambda_0 = 0). \tag{2.153}$$

Die voranstehende Transformation ergibt eingesetzt in die Gleichung (2.152) unmittelbar das folgende Zwischenergebnis:

$$\begin{aligned}
\langle \phi_N | e^{-\beta\hat{H}} | \phi_0 \rangle &= \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int_0^{2\pi} d\phi_n \right) \left(\prod_{n=1}^N \sum_{\lambda_n} \sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon\hbar}} \right) \cdots \\
&\quad \cdots \exp\left[-\frac{\epsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left(\frac{m}{2} \frac{[(\phi_n + 2\pi\lambda_n) - (\phi_{n-1} + 2\pi\lambda_{n-1})]^2}{\epsilon^2} + V(\phi_{n-1}) \right)\right]. \tag{2.154}
\end{aligned}$$

Jetzt ist man in der Lage, die sich von 0 nach 2π erstreckenden Integrale über die Variablen ϕ_n allesamt in Integrale umwandeln zu können, die von $-\infty$ nach $+\infty$ laufen. Denn durch die Kombination dieser Integrale mit den ersten $(N-1)$ Summen über λ_n lassen sich die entsprechenden Integrationsintervalle in geeigneter Weise auf die gesamte reelle Achse ausdehnen:

$$\begin{aligned}
\langle \phi_N | e^{-\beta\hat{H}} | \phi_0 \rangle &= \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon\hbar}} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_n \sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon\hbar}} \right) \cdots \\
&\quad \cdots \exp\left[-\frac{\epsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left(\frac{m}{2} \frac{[\phi_n - \phi_{n-1} + 2\pi\lambda\delta_{n,N}]^2}{\epsilon^2} + V(\phi_{n-1}) \right)\right]. \tag{2.155}
\end{aligned}$$

Man macht sich leicht klar, daß die rechte Seite der voranstehenden Gleichung (im Grenzfall $N \rightarrow \infty$) gleichbedeutend mit einer unendlichen Summe ist, deren einzelne Summanden aus gewöhnlichen Pfadintegralen bestehen. Dabei hängen die zu addierenden Pfadintegrale vom Summenindex λ nur dadurch ab, daß die Endpunkte der betreffenden

Integrationspfade $x(\tau)$ durch die Beziehung $\phi_N + 2\pi\lambda$ festgelegt sind. Diesen Sachverhalt bringt die folgende Gleichung zum Ausdruck:

$$\langle \phi_N | e^{-\beta\hat{H}} | \phi_0 \rangle = \sum_{\lambda} \int_{\phi_0}^{\phi_N + 2\pi\lambda} \mathcal{D}[x(\tau)] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}[x(\tau)]\right]. \quad (2.156)$$

2.4.2 Die Abschätzung der “periodischen” Zustandssumme

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, wie sich auch im Fall periodischer Nebenbedingungen mit Hilfe der Ungleichung (2.39) eine untere Schranke für die Zustandssumme \mathcal{Z} konstruieren läßt. Für dieses Vorhaben ist es notwendig, daß man die Zustandssumme \mathcal{Z} in geeigneter Weise durch Pfadintegrale, wie sie auf der linken Seite der Gleichung (2.136) vorkommen, darstellt. Zunächst ergibt die Spurbildung der Gleichung (2.2), die im Fall periodischer Nebenbedingungen mit Hilfe der Beziehung (2.142) ausgeführt werden muß, den folgenden Ausdruck:

$$\mathcal{Z} = \int_0^{2\pi} d\phi \langle \phi | e^{-\beta\hat{H}} | \phi \rangle. \quad (2.157)$$

Setzt man nun das Resultat (2.156) des vorherigen Abschnitts in die voranstehende Gleichung ein, so erhält man mit Hilfe des Anhangs (A.4)¹⁴ sofort das gewünschte Ergebnis:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\lambda} \exp\left[-\beta\frac{m}{2}\omega_{\lambda}^2\right] \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\phi}^{\phi} \mathcal{D}[y(\tau)] \cdots \\ &\cdots \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{y}(\tau)^2 + V[y(\tau) + \omega_{\lambda} \tau] \right\}\right]. \end{aligned} \quad (2.159)$$

Daraus ergibt sich aufgrund der Gleichung (2.136) sofort die folgende Identität:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\lambda} \exp\left[-\beta\frac{m}{2}\omega_{\lambda}^2\right] \int_0^{2\pi} d\phi \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} Z_{\lambda}(\bar{x}, \phi) \\ Z_{\lambda}(\phi) \end{cases}. \quad (2.160)$$

Dabei ist in der voranstehenden Gleichung an den reduzierten Zustandssummen Z der Index λ angebracht worden, um daran zu erinnern, daß an relevanter Stelle das eigentlich

¹⁴Im vorliegenden Fall ist die in der Gleichung (A.14) eingeführte Geschwindigkeit v jeweils gerade durch eine der Fourier Frequenzen (2.11) gegeben:

$$v = \frac{\phi + 2\pi\lambda - \phi}{\hbar\beta} = \frac{2\pi}{\hbar\beta} \lambda = \omega_{\lambda}. \quad (2.158)$$

zu diskutierende (periodische) Potential V folgendermaßen durch ein um $\omega_\lambda \tau$ verschobenes Potential V_λ substituiert werden muß:

$$V(\cdot) \quad \longrightarrow \quad V_\lambda(\cdot) = V(\cdot + \omega_\lambda \tau). \quad (2.161)$$

Nun gewinnt man unter Verwendung der Beziehungen (2.39) und (2.40) aus der Gleichung (2.160) sofort die folgenden zwei unteren Schranken für die Zustandssumme \mathcal{Z} :

$$\mathcal{Z} \geq \sum_\lambda \exp\left[-\beta \frac{m}{2} \omega_\lambda^2\right] \int_0^{2\pi} d\phi \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \left\{ \begin{array}{l} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp[-\beta \Phi_\lambda(\bar{x}, \phi)] \\ \exp[-\beta \Phi_\lambda(\phi)] \end{array} \right\}. \quad (2.162)$$

Dabei soll der zusätzlich auftauchende Index λ wiederum andeuten, daß man die Größe Φ_λ aus der nichtindizierten Größe Φ gewinnt, indem man im Ausdruck für Φ an gegebener Stelle die Ersetzung (2.161) vornimmt.

Kapitel 3

Die Anwendung der Näherungsverfahren

In diesem Kapitel soll die konkrete Anwendung der drei im vorherigen Kapitel bereitgestellten Näherungsverfahren diskutiert werden. Dazu erfolgt zunächst im Abschnitt (3.1) die auf Variablentransformationen beruhende Neuformulierung der im Abschnitt (2.2.5) aufgelisteten Beziehungen, um einen vereinfachten Formelapparat bereitzustellen, der für eine explizite Implementierung der Näherungsverfahren auf dem Computer wesentlich zugänglicher ist. Anschließend sollen dann im Abschnitt (3.2) die erzielten numerischen Ergebnisse präsentiert und diskutiert werden.

3.1 Die Neuformulierung der Näherungsverfahren

Während im vorherigen Kapitel die drei Näherungsverfahren in einer Weise präsentiert wurden, wie sie sich direkt aus der physikalischen Problemstellung ergab, so soll in diesem Abschnitt eine Darstellungsart aufgegriffen werden, die eine explizite Umsetzung in Programmcode erleichtert. Mit anderen Worten bedeutet dies, daß im folgenden ein Überblick darüber gegeben werden soll, welche Formeln im Zuge dieser Arbeit explizit programmiert wurden ¹. Dazu wird im nächsten Abschnitt ein neuer Satz von Variablen eingeführt, sowie im übernächsten Abschnitt eine Liste aller benötigter Funktionen aufgestellt. Anschließend erfolgt mit Hilfe dieser Definitionen in den drei darauffolgenden Abschnitten die Neuformulierung der drei Variationsverfahren a, b und c.

¹Sämtliche Computerprogramme wurden in der Programmiersprache C verfaßt.

3.1.1 Die neuen Variablen

Für eine vereinfachte Formulierung ist es günstig, die neuen Variablen ρ , x und t wie folgt zu definieren:

$$\rho = \frac{\hbar^2}{4m}\beta \quad (3.1)$$

$$x = \left(\frac{\hbar\beta}{2}\right)^2 \Omega^2 \quad \Longleftrightarrow \quad \Omega = \frac{2}{\hbar\beta} \sqrt{x} \quad (3.2)$$

$$t = 1 - \frac{2}{\hbar\beta} \tau \quad \Longleftrightarrow \quad \tau = \frac{\hbar\beta}{2} (1 - t). \quad (3.3)$$

Aus der letzten der drei voranstehenden Beziehungen ergibt sich unmittelbar, daß sich eine Integration über τ folgendermaßen in eine Integration über t transformiert ²:

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} I(\tau) = \int_{-1}^1 \frac{dt}{2} I[\tau(t)] = \int_0^1 dt \frac{I[\tau(t)] + I[\tau(-t)]}{2}. \quad (3.4)$$

Aus der im nächsten Abschnitt eingeführten Definition (3.15), sowie den Beziehungen (3.19) und (3.27) folgt, daß in jedem der beiden Fälle a und c sowohl ζ als auch σ eine gerade Funktion von t ist ³. Mit anderen Worten bedeutet dies, daß gilt:

$$\begin{aligned} \zeta[\tau(t)] &= \zeta[\tau(-t)] \\ \sigma[\tau(t)] &= \sigma[\tau(-t)]. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Nun läßt sich mit Hilfe der beiden Gleichungen (3.4) und (3.5) unmittelbar die folgende in den Fällen a und c nützliche Identität nachprüfen:

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{d\tau}{\hbar\beta} \Xi[V(\cdot) \mid \zeta(\tau) \mid \sigma(\tau)] = \int_0^1 dt \Xi[V(\cdot) \mid \zeta[\tau(t)] \mid \sigma[\tau(t)]]. \quad (3.6)$$

Im folgenden wird aus Gründen der Platzersparnis die rechte Seite der voranstehenden Gleichung durch den folgenden Ausdruck abgekürzt:

$$\hat{\int} \Xi[V(\cdot) \mid \zeta \mid \sigma]. \quad (3.7)$$

Die Gleichung (3.6) ist nur dann gültig, wenn das Potential V nicht explizit von τ abhängt. Diese Voraussetzung ist allerdings nicht mehr gegeben, wenn man das periodische Potential $V(\cdot) \propto \cos(\cdot)$ untersucht. Denn dann hat man es aufgrund des Übergangs (2.161) mit dem folgenden Integranden zu tun:

$$I(\tau) = \Xi\left[\cos(\cdot + \omega_\lambda \tau) \mid \zeta(\tau) \mid \sigma(\tau)\right] = \cos[\zeta(\tau) + \omega_\lambda \tau] \exp\left[-\frac{\sigma(\tau)}{2}\right]. \quad (3.8)$$

²In der Gleichung (3.4) bezeichnet $I(\tau)$ einen beliebigen Integranden.

³Im Fall b ist sowohl ζ als auch σ von τ und damit von t unabhängig.

Dabei wurde im letzten Schritt die Tabelle (2.81) verwendet. Nun prüft man mit der sich aus den Gleichungen (3.3) und (2.11) ergebenden Identität

$$\omega_\lambda \tau = (1-t)\pi\lambda \quad (3.9)$$

unter Verwendung des Additionstheorems für die Cosinus-Funktion sofort die folgende Beziehung nach:

$$\frac{I[\tau(t)] + I[\tau(-t)]}{2} = (-1)^\lambda \cos[\zeta[\tau(t)]] \cos[t\pi\lambda] \exp\left[-\frac{\sigma[\tau(t)]}{2}\right]. \quad (3.10)$$

Damit läßt sich mit Hilfe der Gleichung (3.4) also auch in diesem Fall die Integration über τ in eine entsprechende sich von 0 nach 1 erstreckende Integration über t umwandeln.

3.1.2 Tabelle der Funktionen

Für die Neuformulierung der drei Näherungsverfahren reicht es aus, daß man die folgenden fünf Funktionen definiert:

$$F(x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{x}}{\sinh[\sqrt{x}]} & x \geq 0 \\ \frac{\sqrt{-x}}{\sin[\sqrt{-x}]} & x < 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

$$G(x) = \begin{cases} F(x) \cosh[\sqrt{x}] - 1 = \sqrt{x} \coth[\sqrt{x}] - 1 & x \geq 0 \\ F(x) \cos[\sqrt{-x}] - 1 = \sqrt{-x} \cot[\sqrt{-x}] - 1 & x < 0 \end{cases} \quad (3.12)$$

$$2H(x) = \frac{F(x)^2}{1+G(x)} - 1 = \begin{cases} \frac{F(x)}{\cosh[\sqrt{x}]} - 1 & x \geq 0 \\ \frac{F(x)}{\cos[\sqrt{-x}]} - 1 & x < 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

$$a(x) = \rho \frac{G(x)}{x} \quad (3.14)$$

$$T(x,t) = \begin{cases} F(x) \cosh[\sqrt{x}t] - 1 & x \geq 0 \\ F(x) \cos[\sqrt{-x}t] - 1 & x < 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

3.1.3 Fall a

Unter Verwendung der in den beiden vorherigen Abschnitten eingeführten Größen, sowie den beiden zusätzlichen Abkürzungen

$$\Lambda_1 = \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{a} \quad (3.16)$$

$$\Lambda_2 = \frac{F^2 + G - 1}{G} \quad (3.17)$$

nimmt die Gleichung (2.97) unmittelbar die folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned} \beta \Phi(\bar{x}, x_0) &= \beta \int \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma] - \ln[F] + \\ &+ \frac{\ln[2\pi a] + \Lambda_1 - G}{2} + \frac{(1 - \Lambda_1) \Lambda_2}{4}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Dabei gilt:
$$\begin{cases} \sigma = a \left[1 - \left(\frac{T}{G} \right)^2 \right] \\ \zeta = \bar{x} + (x_0 - \bar{x}) \frac{T}{G} \end{cases} \quad (3.19)$$

Wie man anhand der Gleichung (3.11) leicht erkennt, werden die obigen Ausdrücke für $x = -\pi^2$ singulär. Dies führt bei der bezüglich x auszuführenden Minimierung von $\Phi(\bar{x}, x_0)$ ⁴ zur Nebenbedingung $x > -\pi^2$. Wegen $\lim_{x \rightarrow -\pi^2} \Phi(\bar{x}, x_0) = \infty$ stellt dies allerdings kein Problem dar.

Setzt man nun die soeben präsentierten Formeln direkt in Programmcode um, und trägt die Größe $\Phi(\bar{x}, x_0)$ in Abhängigkeit von x auf, so stellt man fest, daß für $|x| < 10^{-4}$ keine glatte Kurve mehr herauskommt. Denn für kleines x treten (mehrfach) Ausdrücke der Form $\frac{0}{0}$ auf (siehe z.B. die Funktion (3.11)), so daß die obigen Formeln numerisch instabil werden. Da jedoch der Grenzwert $x \rightarrow 0$ selbstverständlich existiert, kann man dieses Problem dadurch umgehen, daß man für kleine x die folgende Entwicklung (bis zu zweiter Ordnung) benutzt:

Die Entwicklung

$$\begin{aligned} \beta \Phi(\bar{x}, x_0) &= \beta \int \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma] \\ &= \frac{\ln\left[\pi \frac{2}{3}\rho\right]}{2} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{\frac{2}{3}\rho} + \left(\frac{11}{3150} + \frac{1}{525} \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{\frac{2}{3}\rho} \right) x^2 + \mathcal{O}(x^3) \end{aligned} \quad (3.20)$$

⁴Wegen der Gleichung (3.2) wird die Rolle des Variationsparameters Ω nun von der Variablen x übernommen.

Dabei kann für den Ausdruck $\hat{f}\Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma]$ keine allgemein gültige Entwicklung angegeben werden, da eine solche selbstverständlich von der speziellen Form des Potentials V abhängt. Um zu demonstrieren, welches Aussehen eine derartige Entwicklung für ein gegebenes Potential haben kann, sei an dieser Stelle der einfache Fall des harmonischen Potentials $V(\cdot) \propto (\cdot - \Delta)^2$ vorgestellt:

$$\begin{aligned} \hat{f}\Xi[(\cdot - \Delta)^2 | \zeta | \sigma] &= \left(\begin{array}{l} \frac{4}{15}\rho + \frac{1}{5}(x_0 - \bar{x})^2 + (\bar{x} - \Delta)^2 \\ \frac{22}{1575}\rho + \frac{2}{175}(x_0 - \bar{x})^2 \\ \frac{4}{3375}\rho + \frac{2}{2625}(x_0 - \bar{x})^2 \end{array} \right) \begin{array}{l} \\ x \\ x^2 \end{array} \\ &+ \mathcal{O}(x^3). \end{aligned} \quad (3.21)$$

3.1.4 Fall b

Unter Verwendung der in den beiden Abschnitten (3.1.1) und (3.1.2) eingeführten Größen erhält die Gleichung (2.101) die folgende Form:

$$\beta \Phi(\bar{x}) = \beta \Xi[V(\cdot) | \bar{x} | a] - \ln[F] - \frac{G}{2}. \quad (3.22)$$

Wie schon im Fall a, so gilt auch hier die Nebenbedingung $x > -\pi^2$. Außerdem muß man auch in diesem Fall eine Entwicklung um $x = 0$ vornehmen:

Die Entwicklung

$$\beta \Phi(\bar{x}) - \beta \Xi[V(\cdot) | \bar{x} | a] = \frac{1}{180} x^2 + \mathcal{O}(x^3) \quad (3.23)$$

Auch in diesem Fall soll ein repräsentatives Beispiel für die vom Potential V abhängige Entwicklung des Ausdrucks $\Xi[V(\cdot) | \bar{x} | a]$ gegeben werden:

$$\Xi[(\cdot - \Delta)^2 | \bar{x} | a] = \frac{1}{3}\rho + (\bar{x} - \Delta)^2 - \frac{1}{45}\rho x + \frac{2}{945}\rho x^2 + \mathcal{O}(x^3). \quad (3.24)$$

3.1.5 Fall c

Mit Hilfe der zusätzlichen Abkürzung

$$\Lambda = \frac{(x_0 - \Delta_x)^2}{\rho(1 + G)} \quad (3.25)$$

gewinnt man aus der Gleichung (2.103) leicht den folgenden Ausdruck:

$$\beta \Phi(x_0) = \beta \hat{f}\Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma] - \ln[F] + \frac{\ln[1 + G] + H - G - \Lambda x H}{2}. \quad (3.26)$$

$$\text{Dabei gilt: } \begin{cases} \sigma = \frac{\rho(1+G)}{x} \left[1 - \left(\frac{1+T}{1+G} \right)^2 \right] \\ \zeta = x_0 + (x_0 - \Delta_x) \left(\frac{1+T}{1+G} - 1 \right) \end{cases} \quad (3.27)$$

In diesem Fall gilt wegen der Gleichung (3.13) die Nebenbedingung $x > -\frac{\pi^2}{4}$. Nach wie vor besteht auch in diesem Fall die Notwendigkeit einer Entwicklung um $x = 0$:

Die Entwicklung

$$\beta \Phi(x_0) - \beta \hat{\int} \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma] = \left(\frac{2}{45} + \frac{1}{6} \frac{(x_0 - \Delta_x)^2}{\rho} \right) x^2 + \mathcal{O}(x^3) \quad (3.28)$$

Auch in diesem Fall soll im Bestreben, die drei Fälle a, b und c gleichberechtigt nebeneinander darzustellen, nicht darauf verzichtet werden, ein repräsentatives Beispiel für die vom Potential V abhängige Entwicklung des Ausdrucks $\hat{\int} \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma]$ zu geben:

$$\begin{aligned} \hat{\int} \Xi[(\cdot - \Delta)^2 | \zeta | \sigma] &= \left(\frac{2}{3}\rho + (x_0 - \Delta)^2 \right) \\ &- \left(\frac{8}{45}\rho + \frac{2}{3}(x_0 - \Delta)(x_0 - \Delta_x) \right) x \\ &+ \left(\frac{64}{945}\rho + \frac{4}{15}(x_0 - \Delta)(x_0 - \Delta_x) + \frac{2}{15}(x_0 - \Delta_x)^2 \right) x^2 \\ &+ \mathcal{O}(x^3). \end{aligned} \quad (3.29)$$

An dieser Stelle sei noch auf den Anhang (B.1) verwiesen, wo alle Ableitungen nach x und Δ_x (Fall c) aufgelistet sind, die für die Minimierung der Größe $\Phi(\nu)$ benötigt werden.

3.2 Numerische Ergebnisse

3.2.1 Vorbemerkung

Bevor nun in den folgenden Abschnitten die numerisch erzielten Ergebnisse abgebildet und (teilweise) diskutiert werden, sollen an dieser Stelle einige Vorbemerkungen gemacht werden. Zunächst soll dabei kurz auf einige numerisch-technische Details eingegangen werden:

Die Numerik

Alle im Zuge dieser Arbeit anfallenden numerischen Integrationen wurden mit Hilfe selbstgeschriebener Integrationsroutinen ausgeführt. Dabei wurde als Integrationsalgorithmus

stets eine auf der Euler–MacLaurin’schen Fehlerentwicklung basierende Schrittweitenextrapolation angewandt. Nähere Details zu diesem numerischen Integrationsverfahren findet man in den Referenzen [9] und [10]. Die numerische Minimierung wurde sämtlich mit Hilfe der NAG–Library bewerkstelligt. Dazu wurden namentlich die NAG–Routinen E04jaf, E04kaf, E04kcf, E04bbf und E04kdf in die betreffenden Programme eingebunden.

Die Wahl von ρ/β

Wenngleich die im Abschnitt (3.1) erfolgte Neuformulierung der drei Näherungsverfahren eine direkte Umsetzung in Programmcode erlaubt, so ist es dennoch vor einem expliziten Programmlauf notwendig, daß man der Variablen ρ , d.h. genauer gesagt dem Quotienten $\rho/\beta = \hbar^2/4m$ (siehe die Gleichung (3.1)) einen konkreten Zahlenwert zuweist. Im Zuge dieser Arbeit wurden alle Rechnungen ausschließlich für $\rho/\beta = 0.25$ durchgeführt. Dies entspricht der natürlichen Wahl $\hbar = m = 1$ und steht damit in Übereinstimmung mit der Vorgehensweise, die in den Referenzen [5] bzw. [7] eingeschlagen wurde.

Die untersuchten Potentiale

Die drei Näherungsverfahren wurden anhand verschiedener Potentiale V auf ihre Funkti-onstüchtigkeit hin überprüft. Dabei wurde das anharmonische Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + gx^4, \quad (3.30)$$

sowie das Doppelmuldenpotential

$$V(x) = -\frac{1}{2}x^2 + gx^4 \quad (3.31)$$

untersucht. Neben der in beiden Fällen getroffenen natürlichen Wahl $g = 1$ wurde im Fall des anharmonischen Oszillators auch noch der Wert $g = 10$ untersucht, was dem physikalischen Problem eines Oszillators entspricht, der durch eine relativ starke Anharmonizität beeinflußt ist. Außerdem wurden im Fall des Doppelmuldenpotentials die Rechnungen auch noch für den Wert $g = 0.1$ ausgeführt, der gemäß der Referenz [5] (Kapitel 5.8) im Hinblick auf eine Untersuchung der Näherungsverfahren von besonderer Interesse ist. Darüber hinaus wurden die drei Näherungsverfahren zur Diskussion des Potentials

$$V(x) = \frac{1}{2}(x - q)^2 - g \cos x \quad (3.32)$$

herangezogen. Eine mit diesem Potential assoziierte physikalische Problemstellung liegt vor, wenn man die beiden Enden eines Josephson Kontaktes mit Hilfe eines supraleiten-

den Drahtes miteinander verbindet. Die auf diese Weise entstehende Leiterschleife ⁵ kann darüber hinaus von einem äußeren magnetischen Fluß ⁶ durchsetzt sein. Eine ausführlichere Diskussion dieses physikalischen Problems entnimmt man wahlweise den Referenzen [2], [3] oder [4]. Für das oben angeführte Potential (3.32) drängt sich als zahlenmäßige Belegung der Variablen q neben dem Wert 0 auch noch der Wert π auf. Dies geht aus der Referenz [3] hervor. Für den Parameter g bietet sich neben der natürlichen Wahl $g = 1$ auch noch die Wahl $g = 10$ an, die zu einer Dominanz des periodischen Teils des Potentials (3.32) führt. Diese (teilweise) Periodizität wiederum ist im Hinblick auf den Übergang zum rein periodischen Potential

$$V(x) = -g \cos x \quad (3.33)$$

von besonderer Interesse. Aus den eben angeführten Gründen, wurde das Potential (3.32) für die vier Parameterpaare $(q=0, g=1)$, $(q=0, g=10)$, $(q=\pi, g=1)$ und $(q=\pi, g=10)$ untersucht. Schließlich wurden im Zuge dieser Arbeit die gegebenen Näherungsverfahren auch auf das periodische Potential (3.33), dessen physikalischer Hintergrund bereits im Kapitel (1) ausführlicher besprochen wurde, angewandt. Dabei wurden für die zahlenmäßige Belegung der Variablen g die drei Werte 1, 10 und $\frac{1}{10}$ herangezogen.

3.2.2 Der klassische Grenzfall

Im Grenzfall hoher Temperaturen, d.h. für $\beta = \frac{1}{k_B T} \rightarrow 0$, geht die Quantenmechanik in die klassische Mechanik über. Demgemäß wird für $\beta \ll 1$ die quantenmechanische Zustandssumme (2.2) exakt durch die klassische Zustandssumme

$$\mathcal{Z}_{class} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta V(x)} \quad (3.34)$$

beschrieben. In diesem Abschnitt nun soll sowohl anhand analytischer Rechnungen als auch mit Hilfe konkreter numerischer Resultate gezeigt werden, daß die drei approximativen Zustandssummen \mathcal{Z}_a , \mathcal{Z}_b und \mathcal{Z}_c im Grenzfall $\beta \rightarrow 0$ in die klassische und damit exakte Lösung (3.34) übergehen:

⁵Der Vorfaktor $\frac{1}{2}$ ist dabei ein Maß für die Größe der Induktivität der Leiterschleife.

⁶Die Verschiebung q ist dabei ein Maß für die Größe des magnetischen Flußes.

Die analytische Rechnung

Entwickelt man in jedem der drei Fälle a, b und c die beiden Größen ζ und σ bis zur führenden Ordnung um $\beta = 0$, so erhält man die folgenden Resultate:

Fall	$\zeta(\beta \ll 1)$	$\sigma(\beta \ll 1)$
a	$\bar{x} + (x_0 - \bar{x}) \frac{1}{2}(3t^2 - 1) + \mathcal{O}(\beta^2)$	$(1 + 2t^2 - 3t^4) \frac{1}{4}\rho + \mathcal{O}(\beta^3)$
b	\bar{x}	$\frac{1}{3}\rho + \mathcal{O}(\beta^3)$
c	$x_0 + \mathcal{O}(\beta^2)$	$(1 - t^2)\rho + \mathcal{O}(\beta^3)$

(3.35)

Wegen $\rho \propto \beta$ (siehe Gleichung (3.1))⁷ ergibt sich aus der obigen Tabelle unmittelbar die Beziehung $\sigma \xrightarrow{\beta \rightarrow 0} 0$. Da sich außerdem mit Hilfe der obigen Tabelle allgemein die Beziehung $\zeta \xrightarrow{\beta \rightarrow 0} \text{const.}$ aufstellen läßt, erhält man im Grenzfall $\beta \rightarrow 0$ auf der rechten Seite der Gleichung (2.78) die folgende Darstellung der δ -Funktion:

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{\exp\left[-\frac{(\xi - \zeta)^2}{2\sigma}\right]}{\sqrt{2\pi\sigma}} = \delta(\xi - \zeta). \quad (3.36)$$

Daraus ergibt sich sofort das folgende Zwischenresultat:

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma] = \begin{cases} V\left(\bar{x} + (x_0 - \bar{x}) \frac{1}{2}(3t^2 - 1)\right) & \text{Fall a} \\ V(\bar{x}) & \text{Fall b} \\ V(x_0) & \text{Fall c} \end{cases} \quad (3.37)$$

Mit Hilfe der voranstehenden Gleichung, sowie den beiden Entwicklungen

$$-\ln[F] - \frac{G}{2} \stackrel{\beta \ll 1}{\cong} \frac{1}{180} \left(\frac{\hbar\beta}{2}\Omega\right)^4 + \mathcal{O}(\beta^6) \quad (3.38)$$

$$-\ln[F] + \frac{\ln[1 + G] + H - G - \Lambda x H}{2} \stackrel{\beta \ll 1}{\cong} \frac{(x_0 - \Delta_x)^2}{6\rho} \left(\frac{\hbar\beta}{2}\Omega\right)^2 + \mathcal{O}(\beta^4) \quad (3.39)$$

macht man sich in den beiden Fällen b und c anhand der Gleichungen (3.22) und (3.26) sofort klar, daß gilt:

$$e^{-\beta\Phi(\bar{x})} \stackrel{\beta \ll 1}{\cong} e^{-\beta V(\bar{x})} \quad \text{bzw.} \quad e^{-\beta\Phi(x_0)} \stackrel{\beta \ll 1}{\cong} e^{-\beta V(x_0)}. \quad (3.40)$$

⁷Diese zusätzliche Abhängigkeit von β wurde bei der Entwicklung der betreffenden Ausdrücke selbstverständlich mitberücksichtigt.

Daraus folgt für den Grenzfall $\beta \rightarrow 0$ unmittelbar die Übereinstimmung der beiden Fälle b und c mit dem klassischen Ergebnis (3.34). Im Fall a stößt man wegen $a(\beta \ll 1) = \frac{1}{3}\rho + \mathcal{O}(\beta^3)$ in der Gleichung (3.18) wiederum auf eine Darstellung der δ -Funktion:

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{\exp\left[\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{2a}\right]}{\sqrt{2\pi a}} = \delta(x_0 - \bar{x}). \quad (3.41)$$

Daraus ergibt sich zusammen mit der Gleichung (3.37) und der Entwicklung

$$-\ln[F] = \frac{G}{2} + \frac{(1 - \Lambda_1)\Lambda_2}{4} \stackrel{\beta \ll 1}{\cong} \left(-\frac{(x_0 - \bar{x})^2}{10\rho} + \frac{1}{30}\right) \left(\frac{\hbar\beta}{2}\Omega\right)^2 + \mathcal{O}(\beta^3) \quad (3.42)$$

im Grenzfall $\beta \rightarrow 0$ für die Gleichung (3.18) das folgende Resultat:

$$e^{-\beta\Phi(\bar{x}, x_0)} \stackrel{\beta \ll 1}{\cong} \delta(x_0 - \bar{x}) \exp\left[-\beta \int_0^1 dt V\left(\bar{x} + (x_0 - \bar{x})\frac{1}{2}(3t^2 - 1)\right)\right]. \quad (3.43)$$

Nach Ausführung der Integration über x_0 stößt man auch in diesem Fall auf das klassische Ergebnis (3.34).

Die numerischen Ergebnisse

In diesem Abschnitt sollen die analytischen Überlegungen des vorherigen Abschnitts mit Hilfe von numerischen Ergebnissen belegt werden. Dazu werden die drei Approximationen für die Freie Energie \mathcal{F} , d.h. genauer gesagt die Größen

$$\mathcal{F}_o = -\frac{\ln[\mathcal{Z}_o]}{\beta} \quad \text{mit } o = a, b, c, \quad (3.44)$$

sowie die klassische Freie Energie \mathcal{F}_{class} im Bereich sehr kleiner inverser Temperaturen $\beta = \frac{1}{k_B T}$ aufgetragen. Bevor nun im Anschluß die entsprechenden Abbildungen präsentiert werden, bleibt noch darauf hinzuweisen, daß die drei Approximationen \mathcal{F}_a , \mathcal{F}_b und \mathcal{F}_c auch im Bereich, wo der klassische Grenzfall nicht mehr gültig ist, zumeist zu einer einzigen Kurve verschmelzen, was seine Ursache darin hat, daß der Abstand zur klassischen Kurve dominiert:

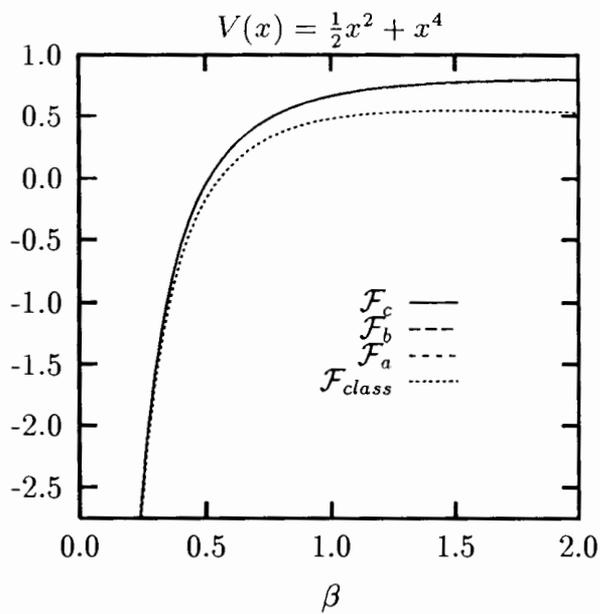


Abbildung 3.1

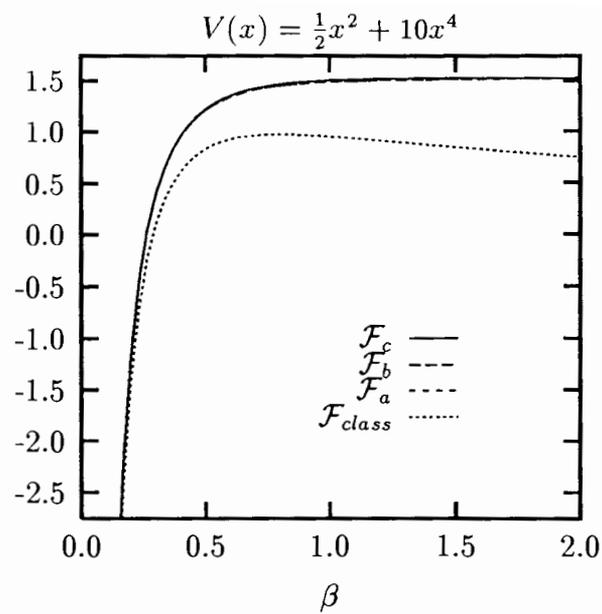


Abbildung 3.2

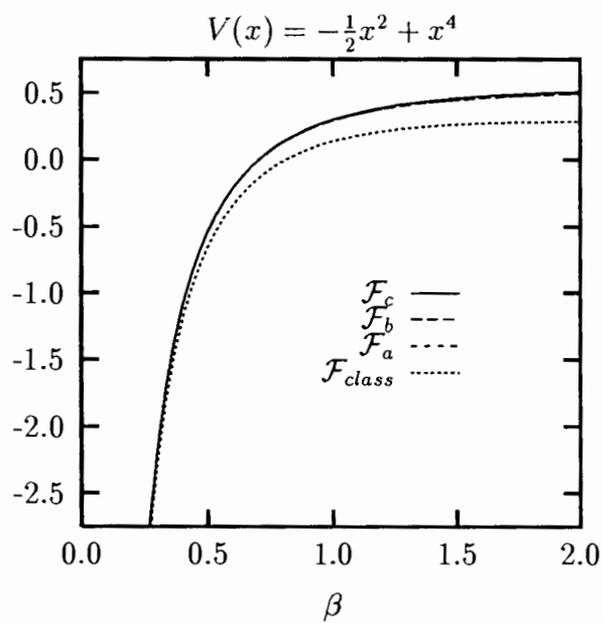


Abbildung 3.3

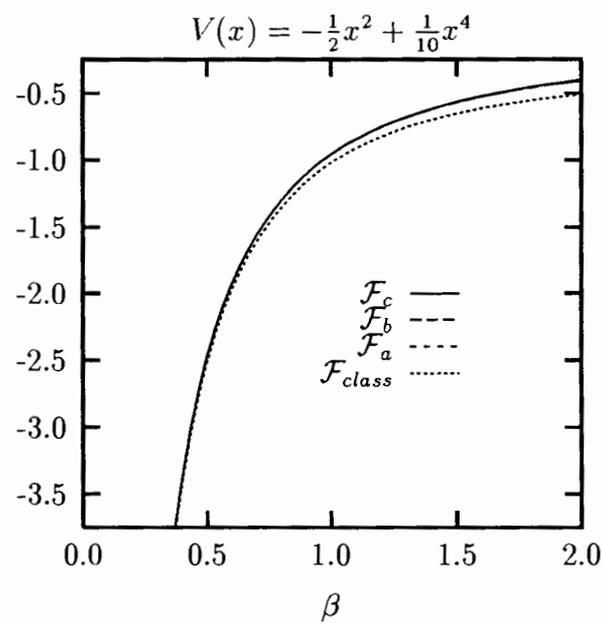


Abbildung 3.4

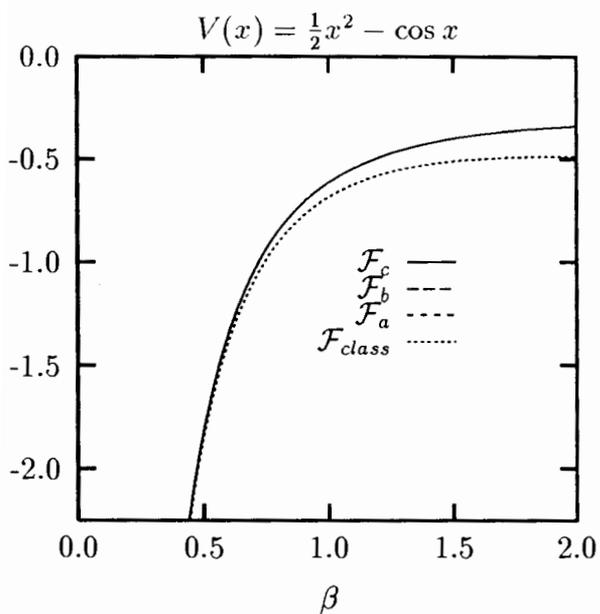


Abbildung 3.5

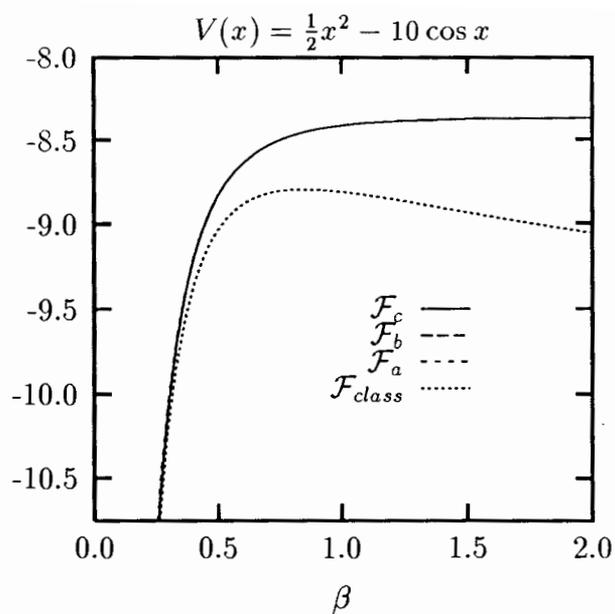


Abbildung 3.6

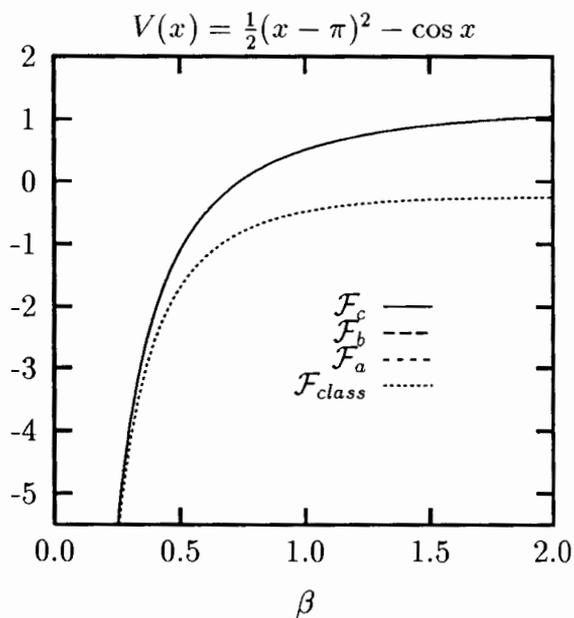


Abbildung 3.7

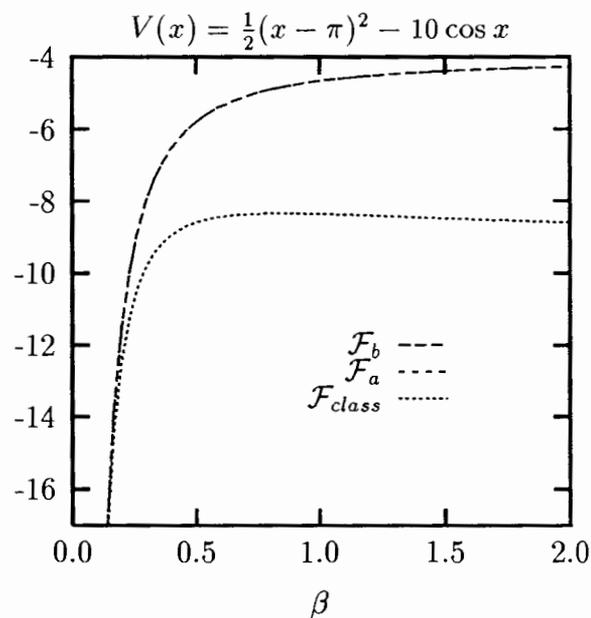


Abbildung 3.8

3.2.3 Die angenäherten Freien Energien

In diesem Abschnitt sollen die auf numerischem Wege gewonnenen Werte für die angenäherten Freien Energien \mathcal{F}_a , \mathcal{F}_b und \mathcal{F}_c in Abhängigkeit von der inversen Temperatur $\beta = \frac{1}{k_B T}$ aufgetragen werden. Um dabei die relativ geringen Unterschiede zwischen den Kurven \mathcal{F}_a , \mathcal{F}_b und \mathcal{F}_c bestmöglich aufzulösen, wurde die Abszisse in geeigneter Weise in zwei Bereiche aufgeteilt. So wurde einerseits der Fall relativ hoher Temperaturen ($\beta \lesssim 5$) behandelt, wo die größten Unterschiede zu beobachten sind. Andererseits wurde darüber hinaus der Fall sehr tiefer Temperaturen ($\beta \gtrsim 50$) untersucht, wo nur noch vernachlässigbar kleine Unterschiede auftauchen.

Der Fall hoher Temperaturen

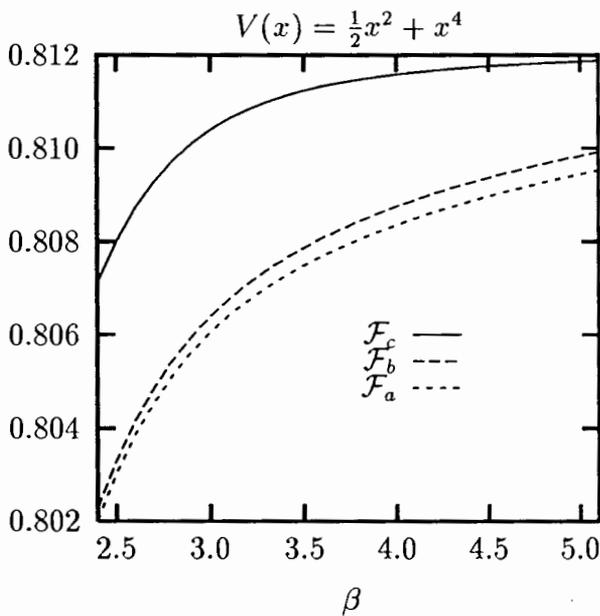


Abbildung 3.9

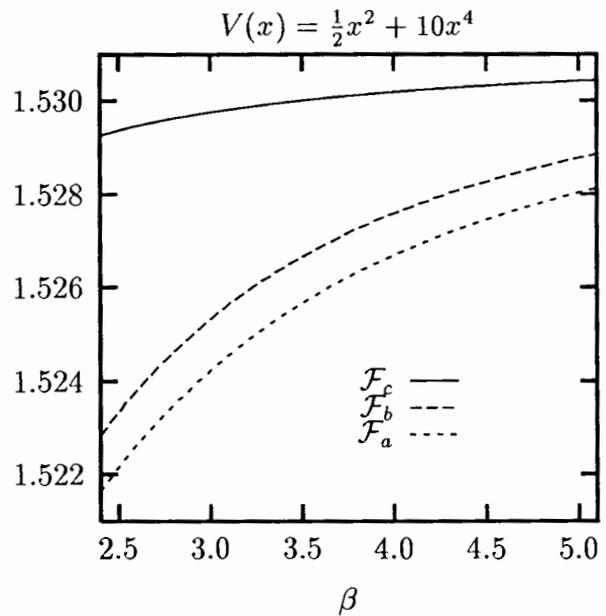


Abbildung 3.10

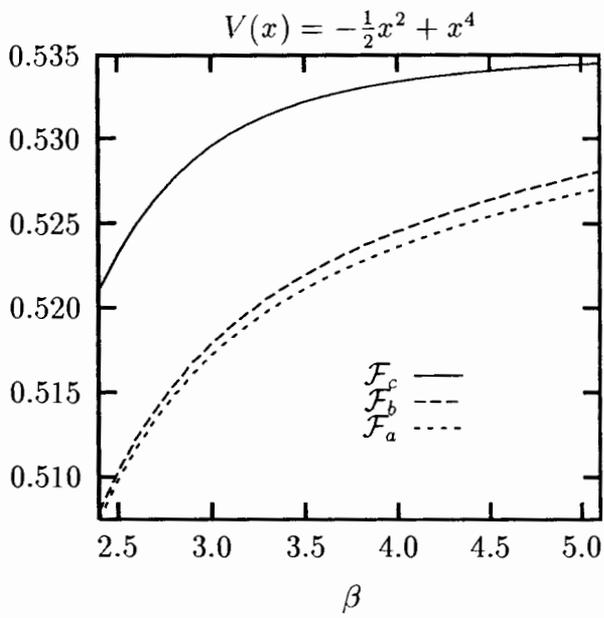


Abbildung 3.11

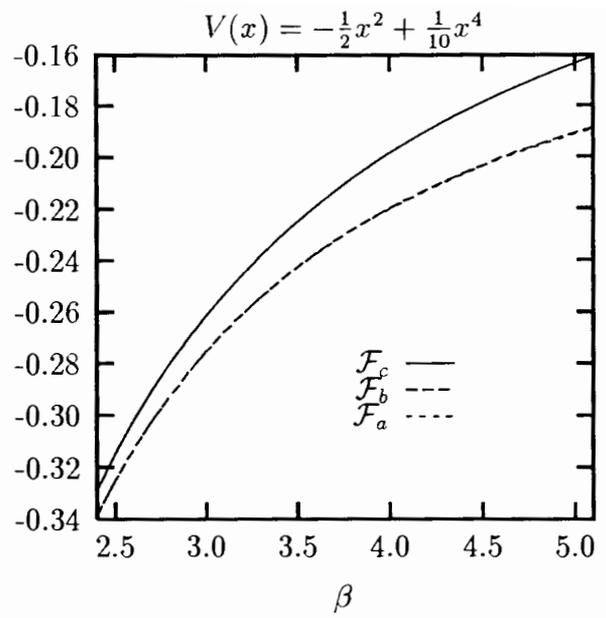


Abbildung 3.12

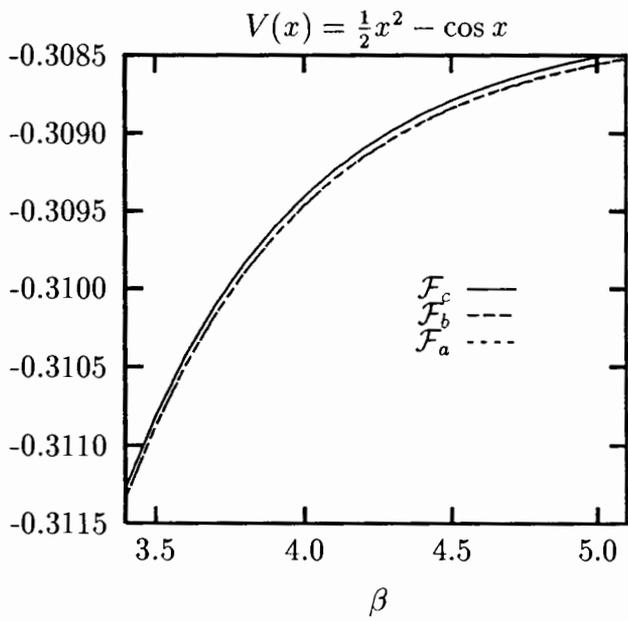


Abbildung 3.13

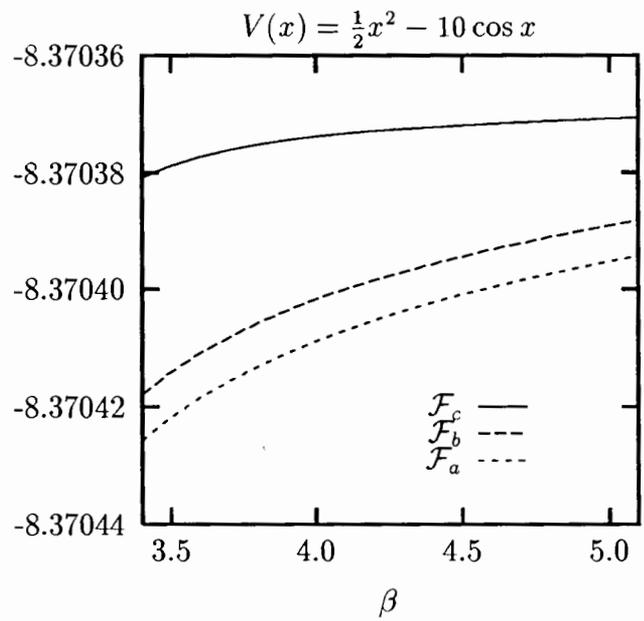


Abbildung 3.14

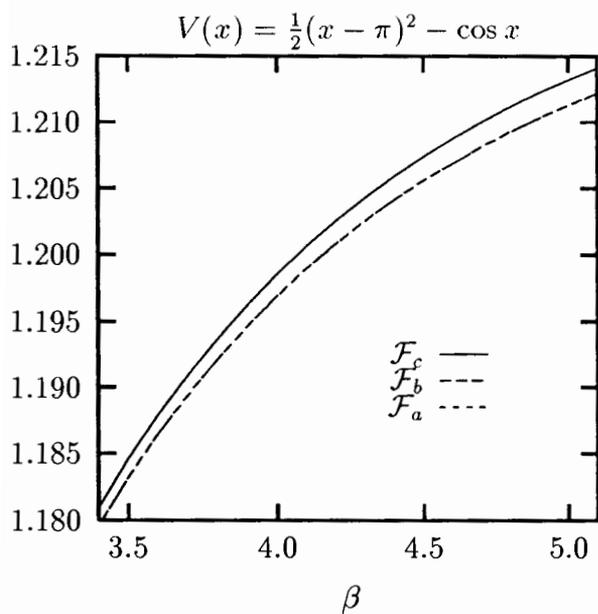


Abbildung 3.15

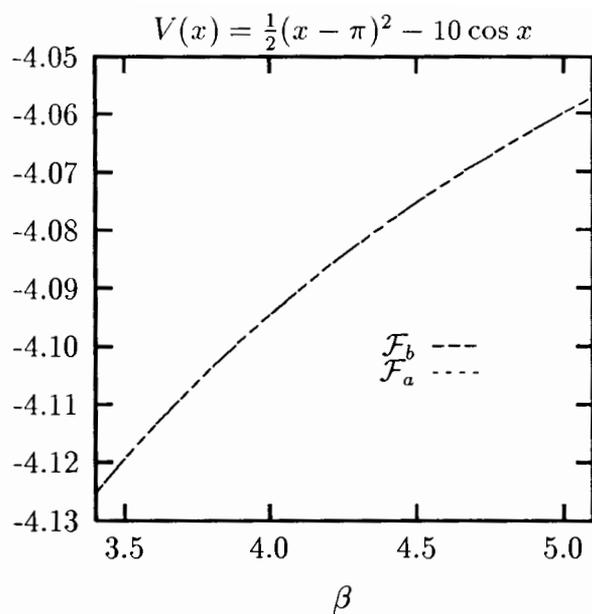


Abbildung 3.16

Der Fall tiefer Temperaturen

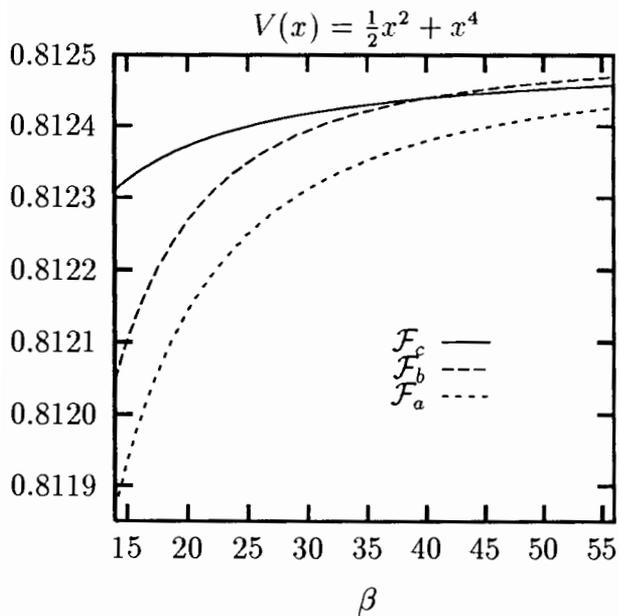


Abbildung 3.17

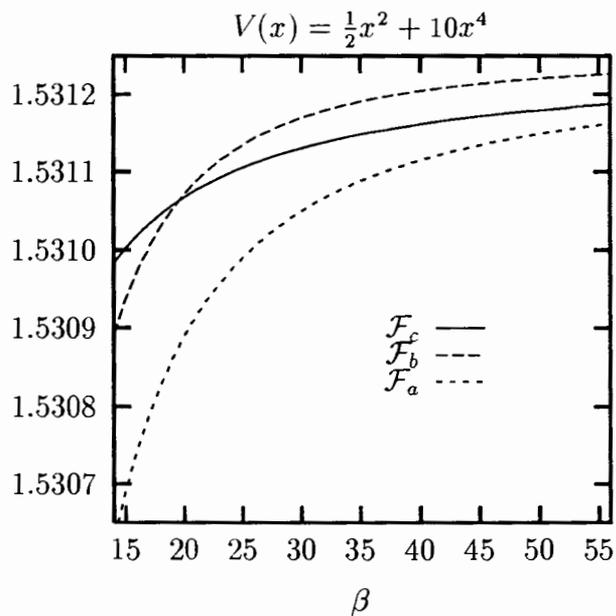


Abbildung 3.18

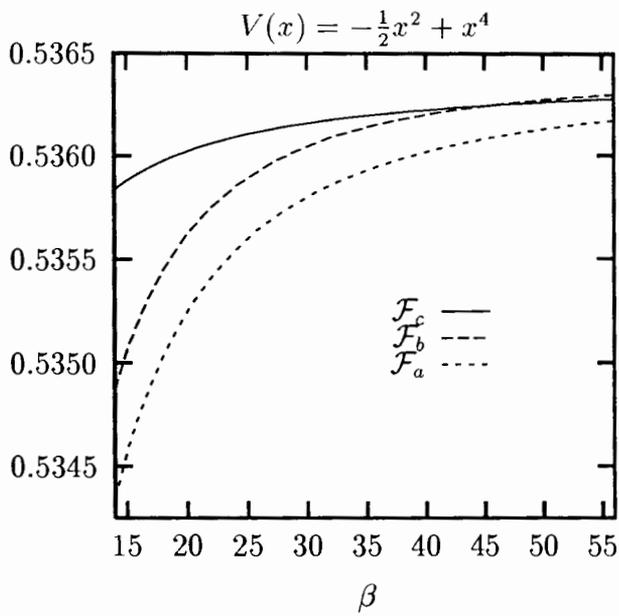


Abbildung 3.19

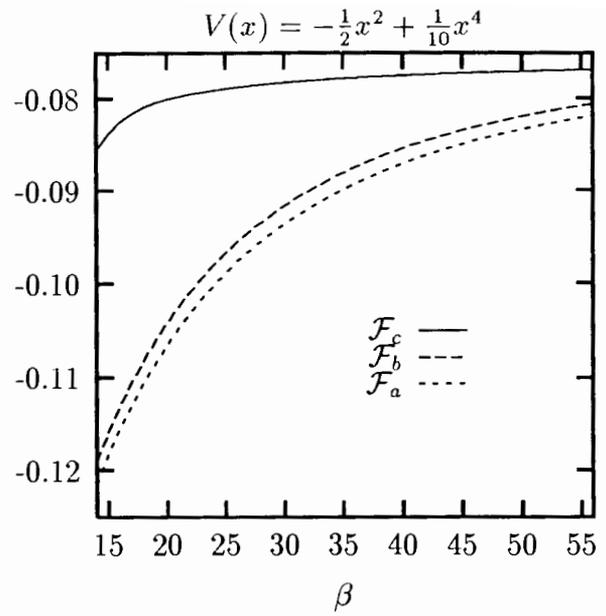


Abbildung 3.20

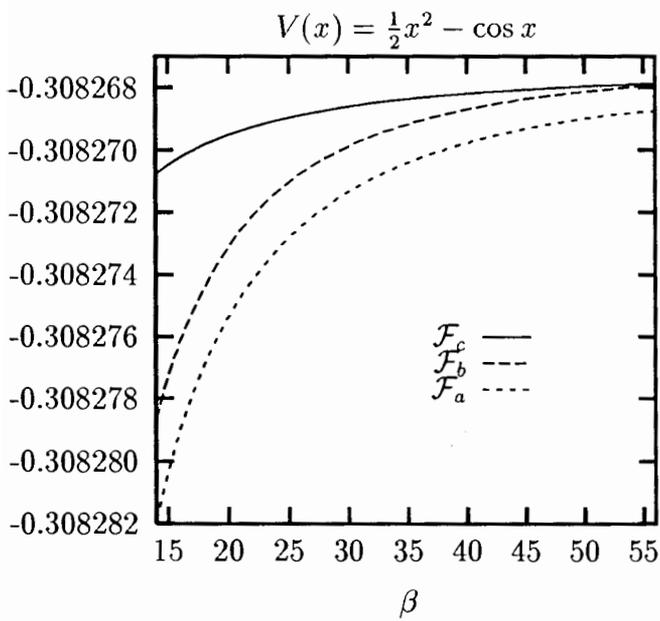


Abbildung 3.21

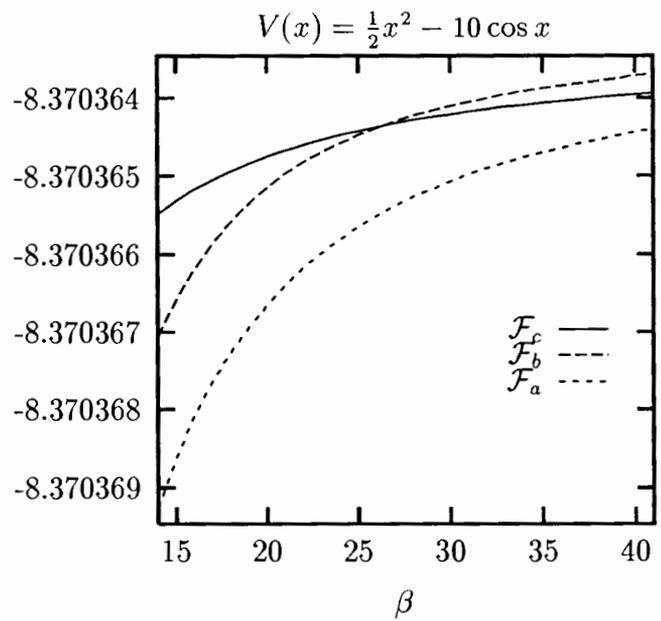


Abbildung 3.22

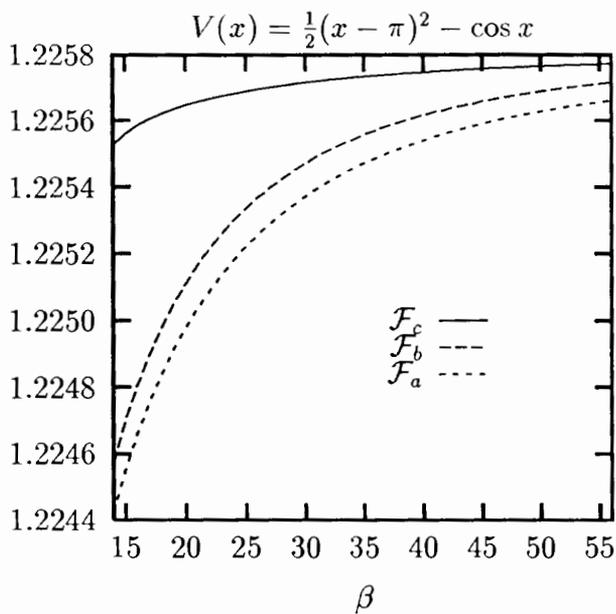


Abbildung 3.23

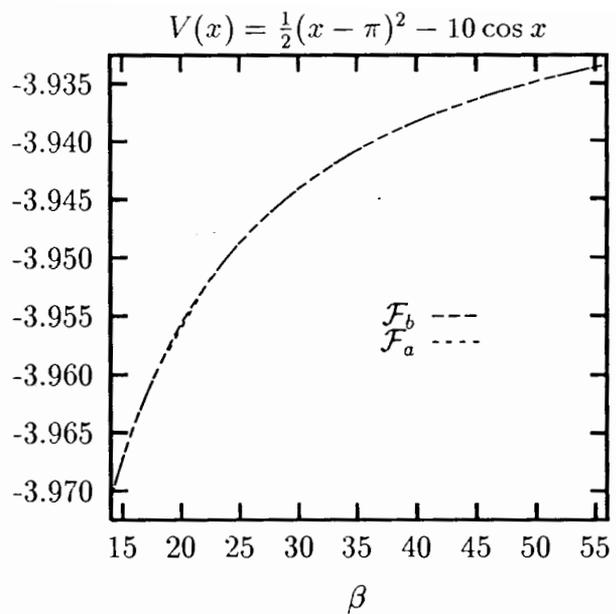


Abbildung 3.24

Die Überlegenheit der Methode a

Aus den voranstehenden Abbildungen geht hervor, daß das Näherungsverfahren a stets kleinere (und damit bessere) obere Schranken für die Freie Energie \mathcal{F} liefert. Dies stellt jedoch – wie die folgenden Überlegungen zeigen – keine Überraschung dar. Denn seien $\Omega_a(\bar{x}, x_0)$, $\Omega_b(\bar{x})$ und $\Omega_c(x_0)$ die von einer bzw. zwei Variablen abhängigen Funktionen, die man im jeweiligen Fall bei der Variation der Größe $\Phi(\nu)$ bezüglich des Parameters Ω erhält. Dann gewinnt man die angenäherten Zustandssummen \mathcal{Z}_b bzw. \mathcal{Z}_c aus der approximativen Zustandssumme \mathcal{Z}_a , indem man in den Formeln für \mathcal{Z}_a an gegebener Stelle die Funktion $\Omega_a(\bar{x}, x_0)$ durch die folgende ebenfalls von zwei Variablen abhängige Funktion $\Omega(\bar{x}, x_0)$ ersetzt:

$$\begin{aligned} \Omega(\bar{x}, x_0) &= \Omega_b(\bar{x}) && \text{(Fall b)} \\ \Omega(\bar{x}, x_0) &= \Omega_c(x_0) && \text{(Fall c)}. \end{aligned} \tag{3.45}$$

Bei dieser Ersetzung taucht im Fall c natürlich die Frage auf, was man mit der Größe $\Delta_x(x_0)$ anzufangen hat. Dieser Fragestellung begegnet man am besten dadurch, daß man sich vorstellt, man hätte bei der Herleitung des Falles a alle von der Größe Δ_x abhängenden Terme nicht weggekürzt. Dann ist unmittelbar klar, daß man jede Funktion

$\Delta_x(x_0)$ in die Formeln des Falles a einsetzen kann, um nach wie vor dieselbe Abschätzung für die Zustandssumme \mathcal{Z} zu erhalten. Insbesondere könnte man also auch die im Fall c durch die Minimierung der Größe $\Phi(x_0)$ erzielte funktionale Form von $\Delta_x(x_0)$ einsetzen, ohne effektiv eine Veränderung zu erzielen. Ersetzt man nun – wie oben angedeutet – im Ausdruck für die angenäherte Zustandssumme \mathcal{Z}_a die Funktion $\Omega_a(\bar{x}, x_0)$ durch die Funktion $\Omega(\bar{x}, x_0)$ (siehe die Gleichung (3.45)), so ist unmittelbar klar, daß die Größe \mathcal{Z}_a nur kleiner werden kann. Denn die Funktion $\Omega_a(\bar{x}, x_0)$ war ja gerade dadurch definiert, daß es zu minimalem $\Phi(\bar{x}, x_0)$, und damit maximalem \mathcal{Z}_a führt. Damit ist im Hinblick auf eine approximative Bestimmung der Zustandssumme \mathcal{Z} (und damit der Freien Energie \mathcal{F}) bewiesen, daß unter den drei Näherungsverfahren die Methode a am genauesten ist.

Die Größe Δ_x

Unter den drei Näherungsverfahren nimmt die Methode c insofern eine Sonderstellung ein, daß nicht nur bezüglich der Variablen Ω , sondern auch bezüglich der Variablen Δ_x zu minimieren ist. Wenngleich die sich daraus ergebende Notwendigkeit einer zweidimensionalen (numerischen) Minimierung prinzipiell kein allzu großes Problem darstellt, so ergaben sich dennoch bei der Untersuchung des Potentials $V(x) = \frac{1}{2}(x - \pi)^2 - 10 \cos x$ (numerische) Probleme. Denn in einem großen Temperaturbereich konnte für gewisse Werte von x_0 beobachtet werden, daß der Minimierungsalgorithmus nicht mehr konvergierte, sondern je nach Startwert wahlweise das “Lösungsverhalten” $\Delta_x \rightarrow \infty$ bzw. $\Delta_x \rightarrow -\infty$ lieferte. Die Untersuchung des Potentials $V(x) = \frac{1}{2}(x - \pi)^2 - 10 \cos x$ zeigt also, daß beim Näherungsverfahren c grundsätzlich Probleme bei der Minimierung entstehen können. Da im Falle eines betragsmäßig kleinen Differentialquotienten $\frac{\partial \Phi}{\partial \Delta_x}$ ein unstetiger Verlauf von $\Delta_x(x_0)$ nicht notwendig zu einem derart unstetigen Verlauf von $\exp[-\beta \Phi(x_0)]$ führen muß, daß eine gegebene Integrationsroutine bei der (numerischen) Auswertung des Integrals $\int dx_0 \exp[-\beta \Phi(x_0)]$ versagt ⁸, empfiehlt es sich beim Näherungsverfahren c, daß man die erfolgreiche Ausführung der Minimierung dadurch überprüft, daß man gegebenenfalls den Verlauf der Funktion $\Delta_x(x_0)$ graphisch darstellt. Dies soll im folgenden für die in dieser Arbeit untersuchten Potentiale geschehen:

⁸Dazu beachte man, daß eine Integrationsroutine gerade so konzipiert ist, daß der Integrand nur an endlich vielen (d.h. genauer gesagt möglichst wenigen) Stellen berechnet werden muß, so daß gegebenenfalls alle Werte der Integrationsvariablen, für die Unstetigkeiten auftreten, bei der Integration unberücksichtigt bleiben (bzw. so selten angetroffen werden, daß der Integrationsalgorithmus darüber “hinwegextrapoliert”).

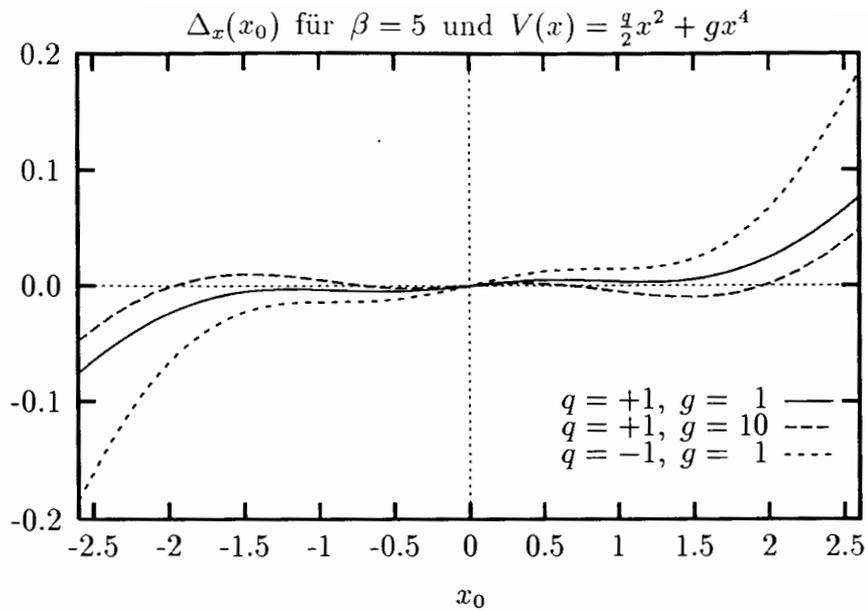


Abbildung 3.25

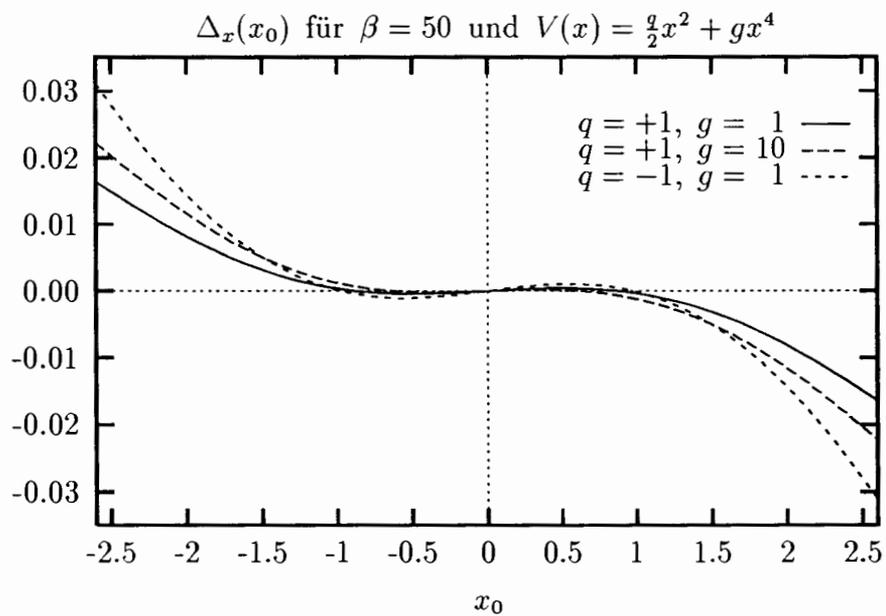


Abbildung 3.26

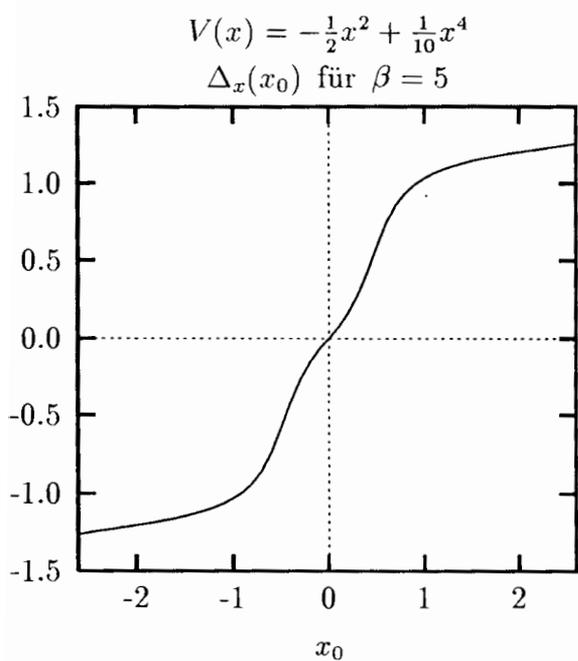


Abbildung 3.27

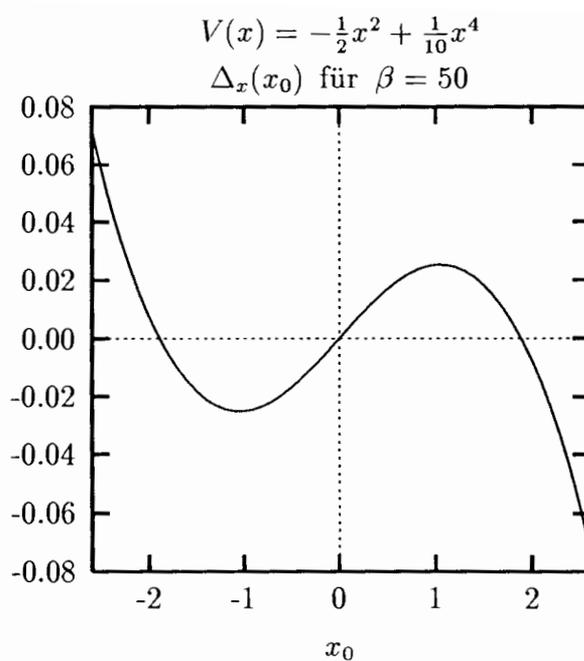


Abbildung 3.28

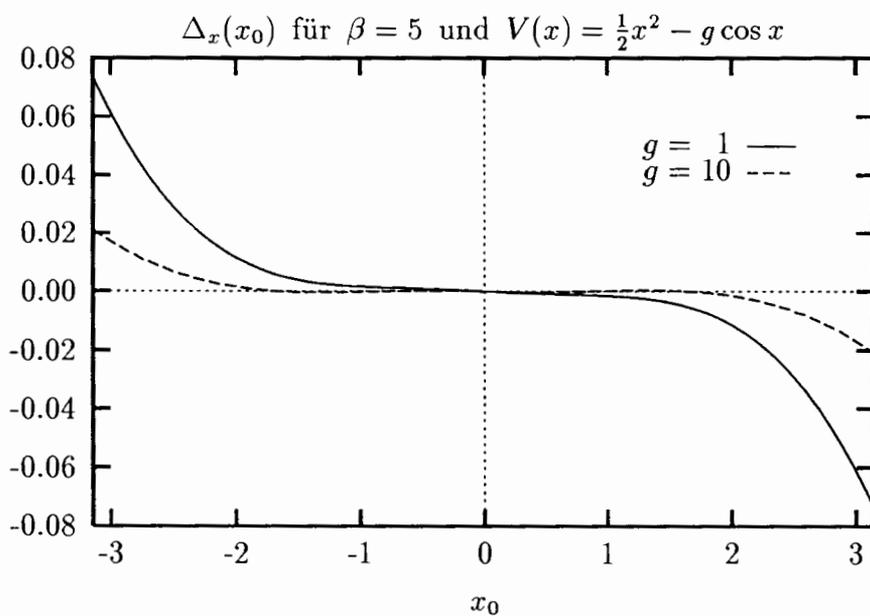


Abbildung 3.29

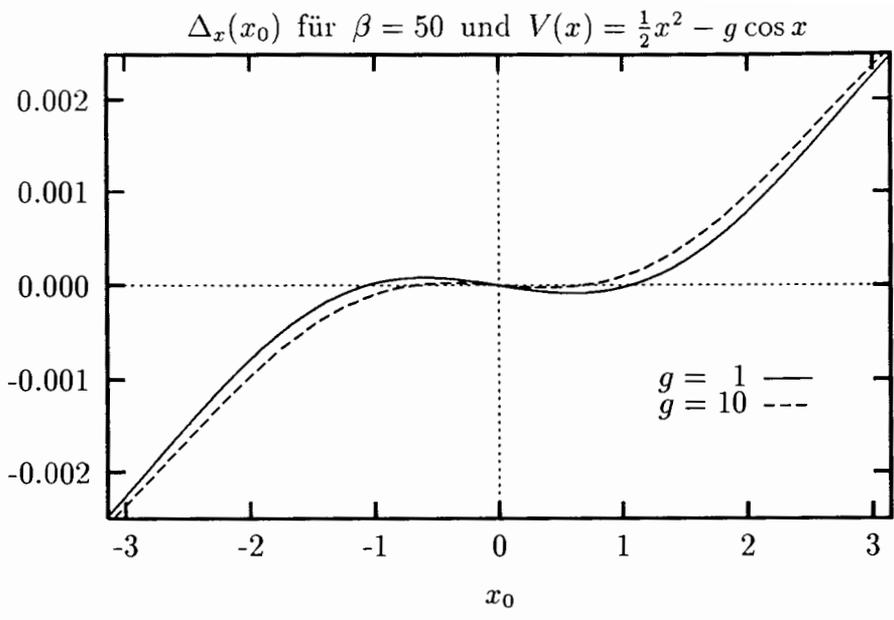


Abbildung 3.30

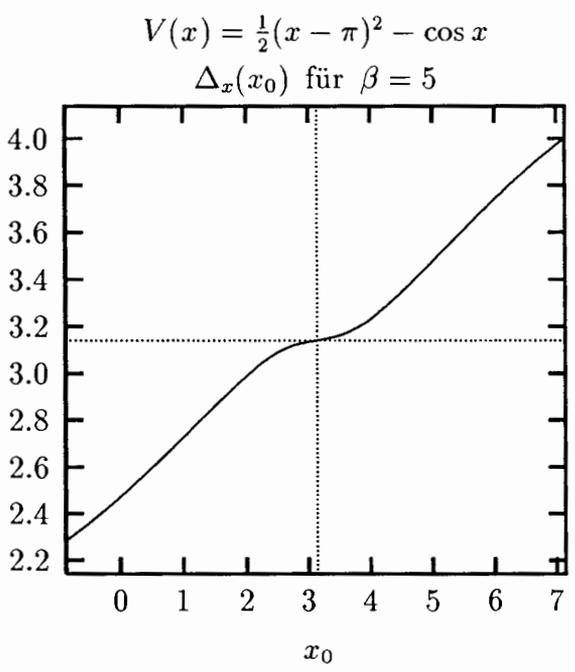


Abbildung 3.31

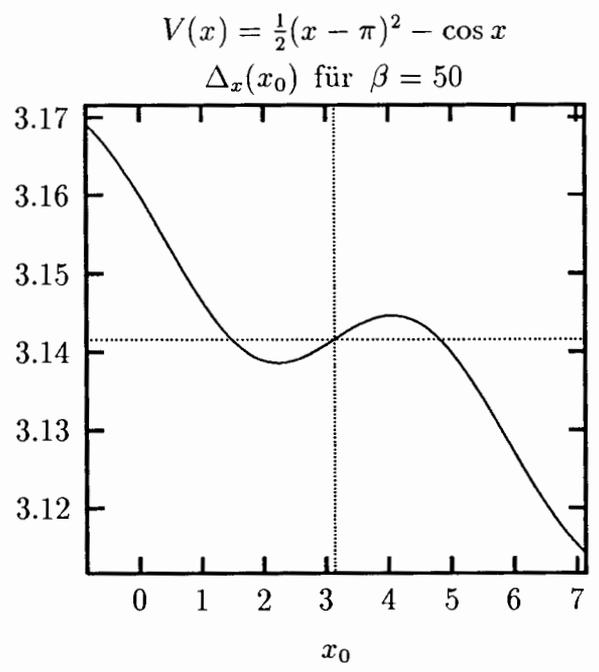


Abbildung 3.32

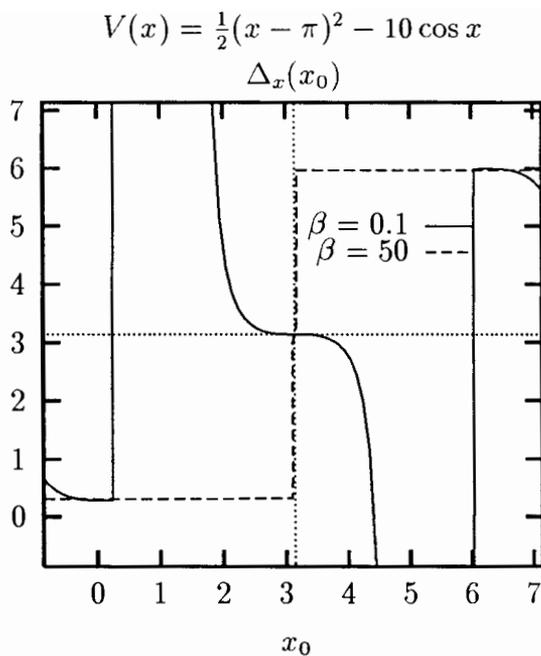


Abbildung 3.33

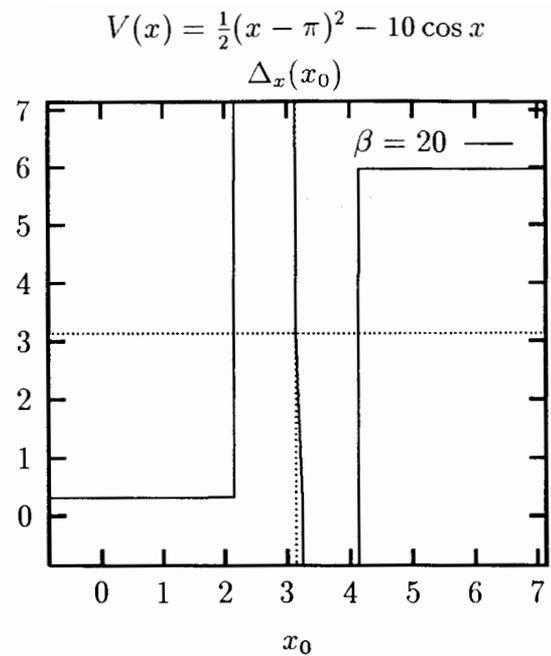


Abbildung 3.34

Die letzten zwei der voranstehenden Abbildungen zeigen das diffuse Verhalten der Funktion $\Delta_x(x_0)$, das bei der Untersuchung des Potentials $V(x) = \frac{1}{2}(x - \pi)^2 - 10 \cos x$ zum Vorschein tritt. Um auch für diesen Fall die generelle Möglichkeit einer Anwendung des Näherungsverfahrens c sicherzustellen, kann man versuchen, von einer Variation bezüglich der Größe Δ_x abzusehen, um als einzigen Variationsparameter die Größe Ω zu verwenden. Denn, wie bereits im Abschnitt (2.2.6) erwähnt, handelt es sich bei der Minimierung (bezüglich Δ_x) nicht um eine “Muß”-, sondern lediglich um eine “Soll”-Bestimmung, da die allgemeine Gültigkeit der betreffenden Ungleichungen von der Wahl der Variationsparameter prinzipiell unberührt bleibt. Schon jetzt sei darauf hingewiesen, daß dieses Motiv im Abschnitt (3.2.5) in ähnlicher Weise ein zweites Mal auftauchen wird. Die folgenden zwei Abbildungen zeigen, welche Resultate man (numerisch) erzielt, wenn man das Näherungsverfahren c unter der Nebenbedingung eines festgewählten $\Delta_x(x_0)$ ausführt. Dabei bietet sich einerseits die Wahl $\Delta_x(x_0) = \pi$ an, andererseits aber auch die Wahl $\Delta_x(x_0) = x_0$:

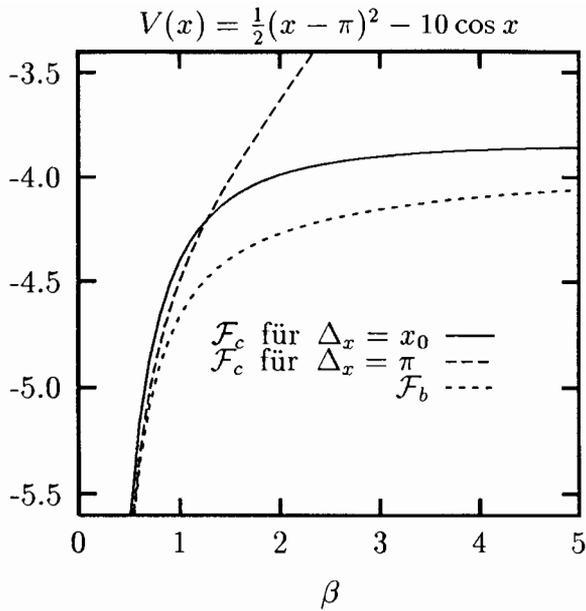


Abbildung 3.35

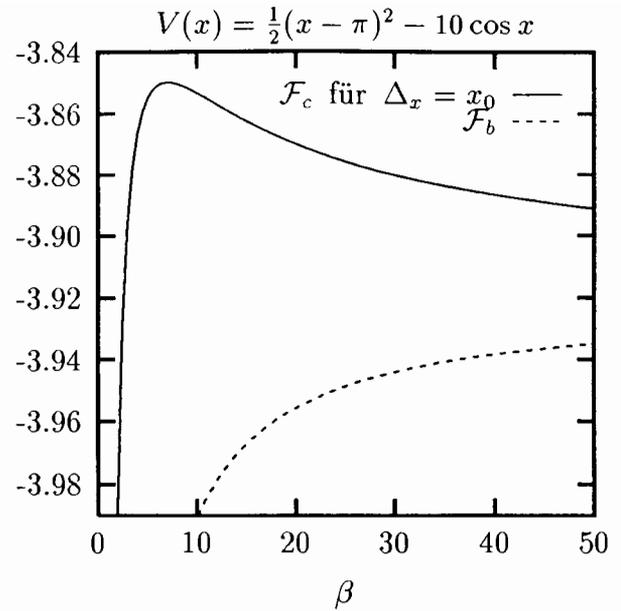


Abbildung 3.36

3.2.4 Die Ortsverteilungen

In diesem Abschnitt sollen die Resultate vorgestellt werden, die man auf numerischem Wege erzielt, wenn man gemäß dem Abschnitt (2.3) die Ortsverteilungen $\rho(x_0)$ näherungsweise berechnet. Bevor dies jedoch geschieht, soll darauf hingewiesen werden, daß man dabei keine Aussage mehr darüber machen kann, ob nun die Methode a oder etwa die Methode c die besseren Abschätzungen liefert⁹. Zwar überlegt man sich leicht¹⁰, daß die Methode a mit Sicherheit eine bessere Approximation der Diagonalmatrixelemente des Operators $e^{-\beta\hat{H}}$ liefert (vergleiche die Gleichung (2.137)). Dennoch überlebt in der Ortsverteilung

$$\rho(x_0) = \frac{\langle x_0 | e^{-\beta\hat{H}} | x_0 \rangle}{\int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \langle x_0 | e^{-\beta\hat{H}} | x_0 \rangle} \quad (3.46)$$

aufgrund der Normierung lediglich die funktionale Form der Matrixelemente $\langle x_0 | e^{-\beta\hat{H}} | x_0 \rangle$, nicht aber in gewisser Weise ihr absoluter Wert. Im folgenden sollen nun die numerischen

⁹Die Methode b scheidet bei dieser Überlegung von vornherein aus, da sie von weiteren Näherungen Gebrauch macht (siehe die Bemerkung vor Gleichung (2.140)).

¹⁰Analog zur Argumentation des Abschnitts (3.2.3).

Ergebnisse präsentiert werden. Dabei muß darauf hingewiesen werden, daß die Kurven der Verfahren a und c praktisch stets zusammenfallen. Gegebenenfalls stimmen sogar alle drei Kurven überein.

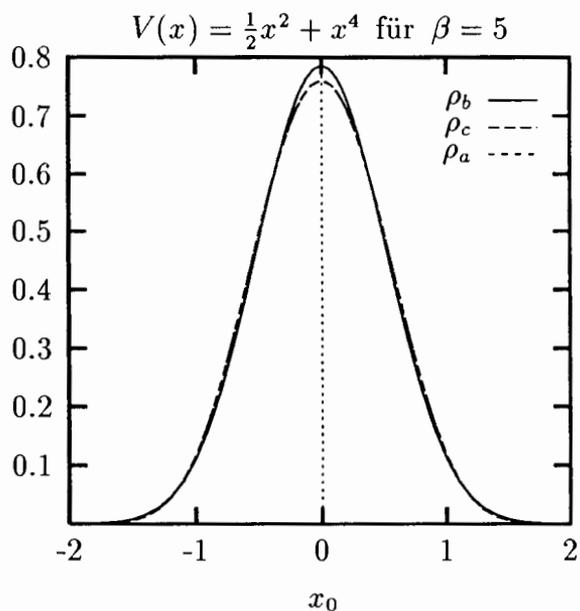


Abbildung 3.37

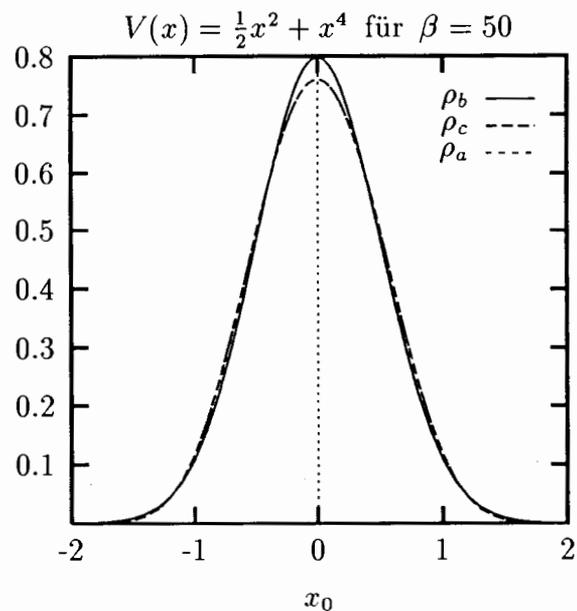


Abbildung 3.38

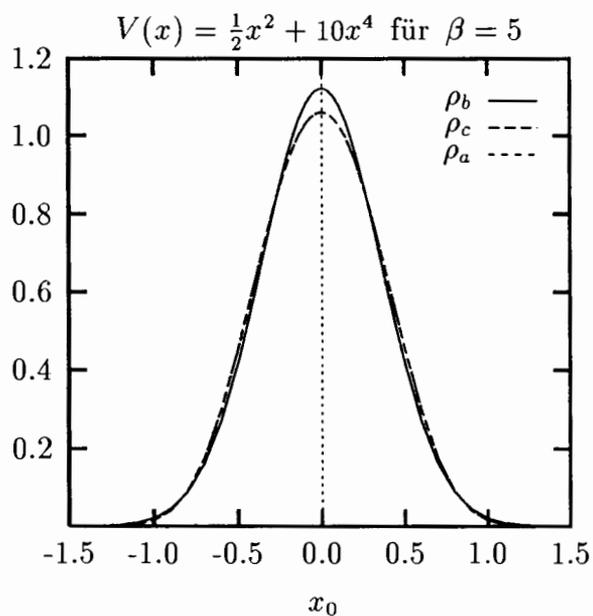


Abbildung 3.39

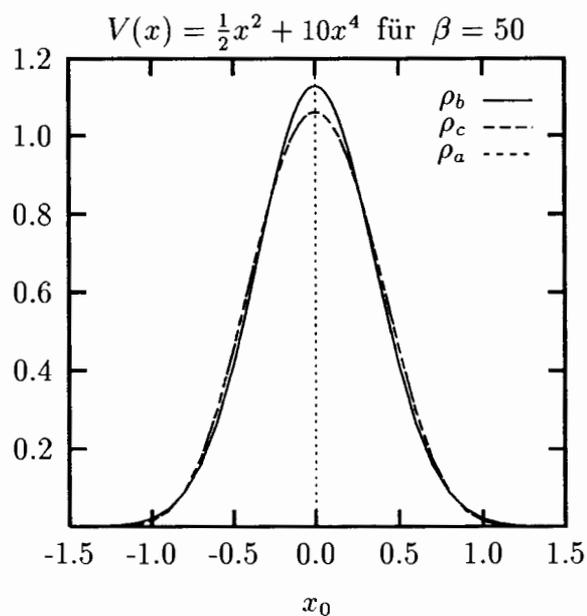


Abbildung 3.40

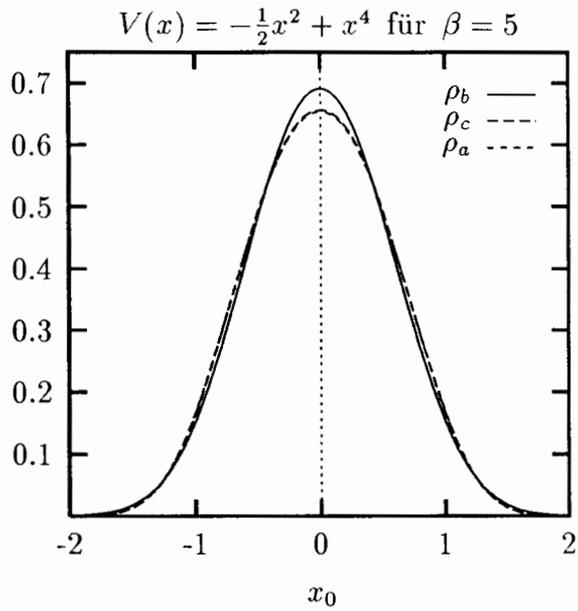


Abbildung 3.41

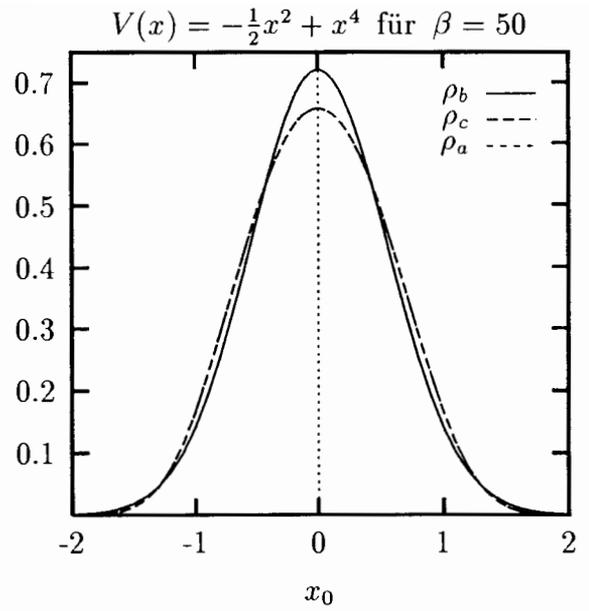


Abbildung 3.42

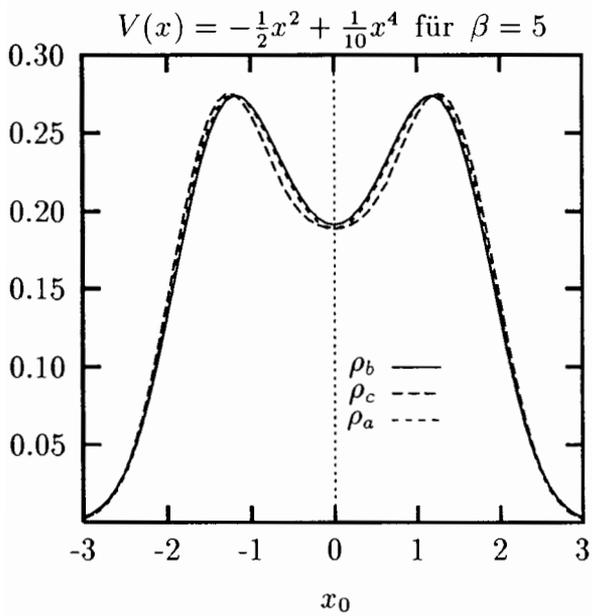


Abbildung 3.43

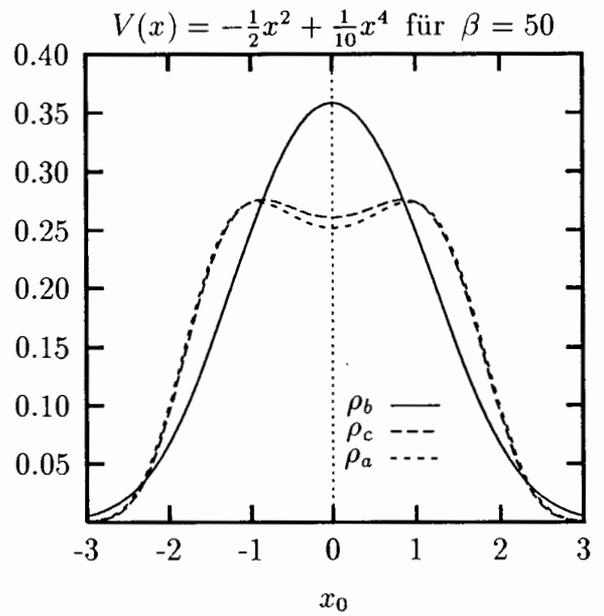


Abbildung 3.44

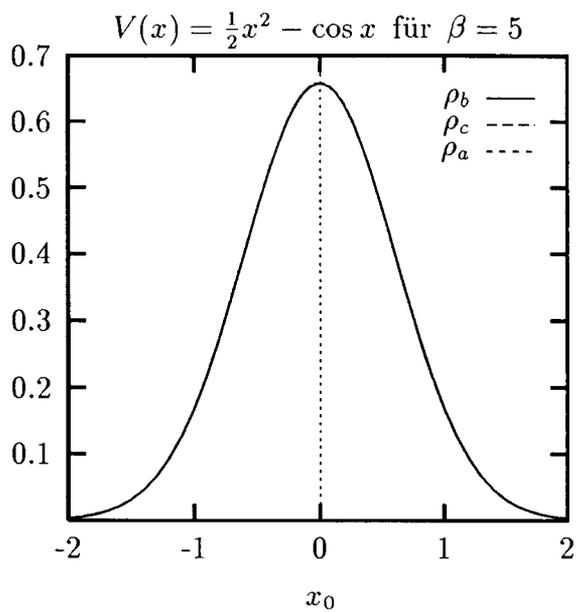


Abbildung 3.45

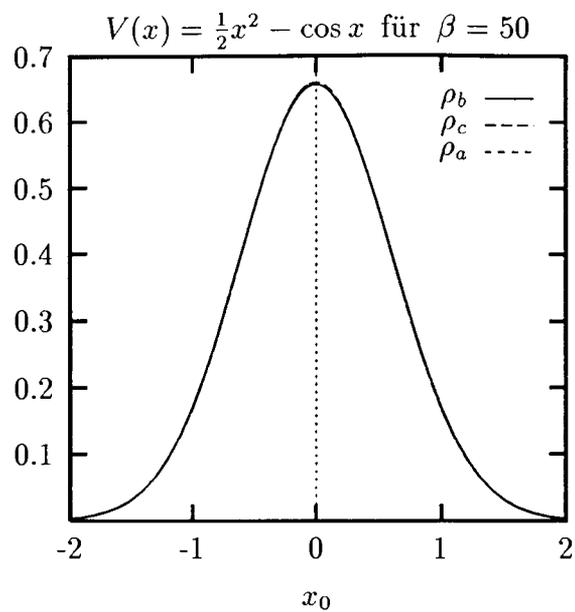


Abbildung 3.46

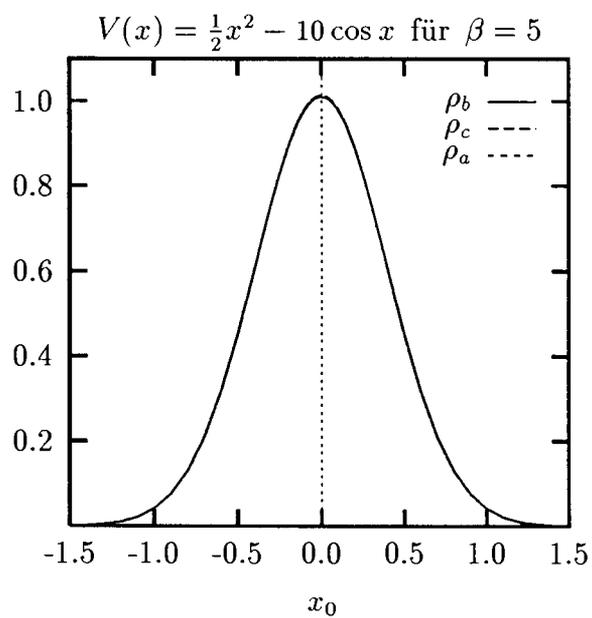


Abbildung 3.47

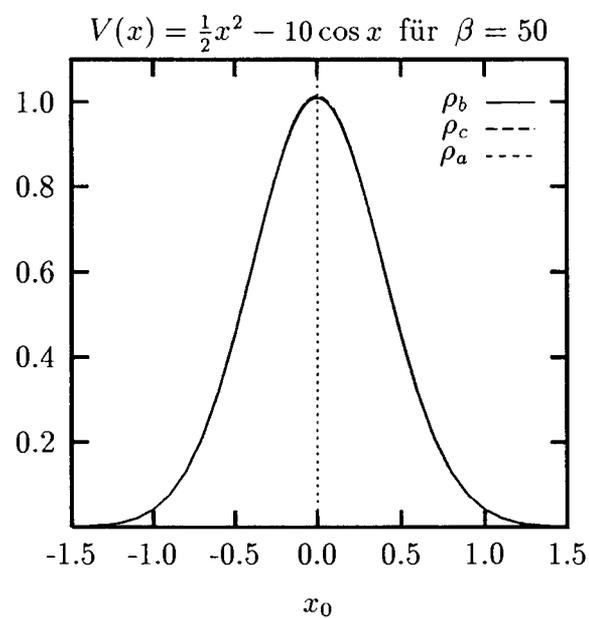


Abbildung 3.48

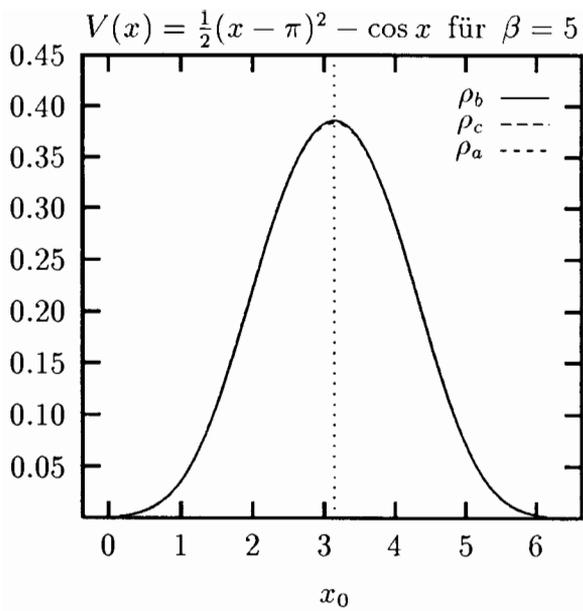


Abbildung 3.49

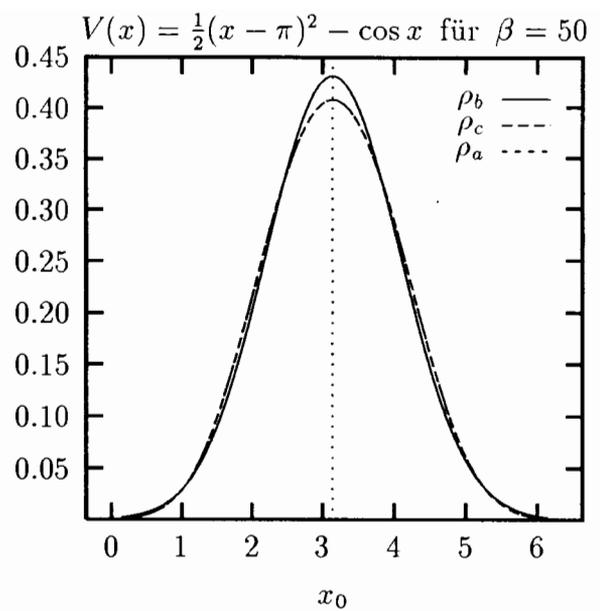


Abbildung 3.50

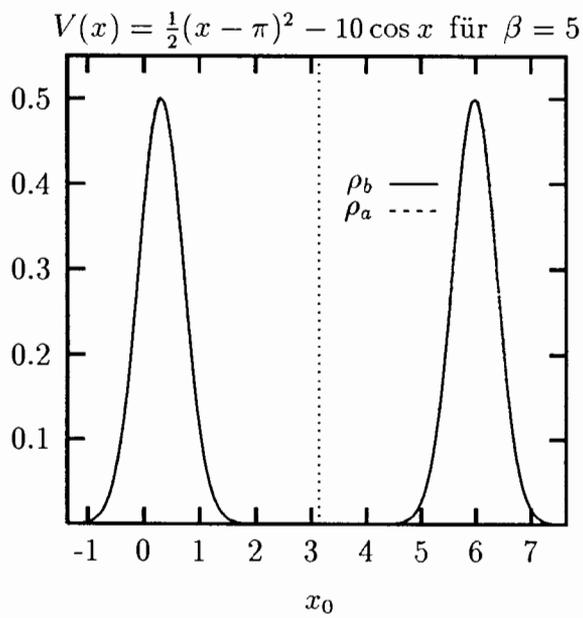


Abbildung 3.51

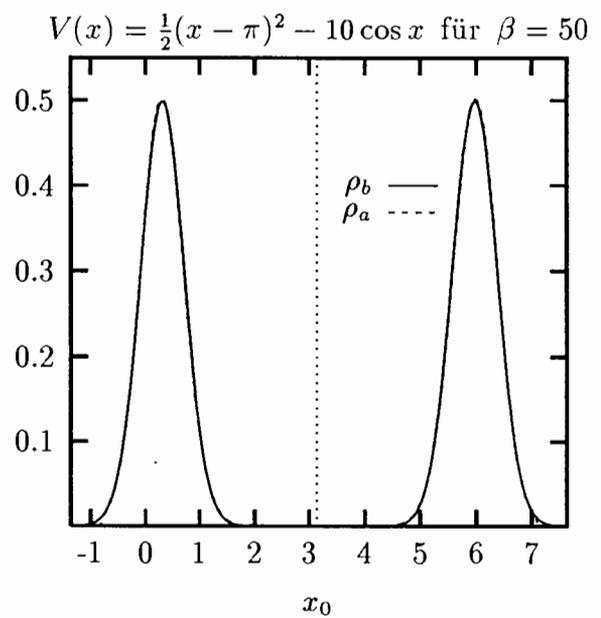


Abbildung 3.52

3.2.5 Die Untersuchung periodischer Potentiale

Vorbemerkung

Mit Hilfe der Überlegungen des Abschnitts (2.4.2) lassen sich im Fall 2π -periodischer Nebenbedingungen unmittelbar die folgenden zwei Abschätzungen für die Diagonalmatrixelemente des Operators $e^{-\beta\hat{H}}$ herleiten:

$$\langle \phi | e^{-\beta\hat{H}} | \phi \rangle \geq \sum_{\lambda} \exp\left[-\beta\frac{m}{2}\omega_{\lambda}^2\right] \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \left\{ \begin{array}{l} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp[-\beta\Phi_{\lambda}(\bar{x}, \phi)] \\ \exp[-\beta\Phi_{\lambda}(\phi)] \end{array} \right\}. \quad (3.47)$$

Dabei stellt die linke Seite der voranstehenden Ungleichung eine bezüglich der Variablen ϕ 2π -periodische Funktion dar, da man von der Voraussetzung eines 2π -periodischen Potentials (und damit Hamiltonians) ausgegangen ist. Nun ist es vernünftig, daß man zur Approximation einer periodischen Funktion nur solche Funktionen heranzieht, die zumindest bereits die Periodizität der ursprünglichen Funktion besitzen. Daraus ergibt sich für die rechte Seite der Ungleichung (3.47) unmittelbar die Bedingung, bezüglich der Variablen ϕ 2π -periodisch zu sein. Im folgenden soll nun die 2π -Periodizität des Ausdrucks

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp[-\beta\Phi_{\lambda}(\bar{x}, x_0)] \quad (3.48)$$

bezüglich der Variablen x_0 ¹¹ gezeigt werden. Dazu macht man sich zunächst anhand der Gleichung (2.78) klar, daß aus der Voraussetzung $V(x) = V(x + 2\pi)$ sofort folgt, daß der Ausdruck $\Xi[V(\cdot + \omega_{\lambda}\tau) | \zeta | \sigma]$ ¹² bezüglich der Variablen ζ 2π -periodisch ist:

$$\Xi[V(\cdot + \omega_{\lambda}\tau) | \zeta | \sigma] = \Xi[V(\cdot + \omega_{\lambda}\tau) | \zeta + 2\pi | \sigma]. \quad (3.49)$$

Setzt man dann die Variablentransformation

$$\bar{x} \longrightarrow \hat{x} = \bar{x} - x_0 \quad \text{mit} \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \longrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{x} \quad (3.50)$$

in die Gleichung (3.18) ein, so folgt aufgrund der Tatsache, daß ζ bis auf eine additive "Konstante" mit x_0 übereinstimmt¹³, mit Hilfe der Beziehung (3.49) unmittelbar die 2π -Periodizität des Ausdrucks (3.48).

¹¹Um mit den Formeln des Abschnitts (3.1) arbeiten zu können, wird an dieser Stelle aus Gründen der Bequemlichkeit ϕ wieder durch x_0 ersetzt.

¹²An dieser Stelle sei nochmal an die Ersetzung (2.161) erinnert.

¹³Denn nach der Transformation (3.50) gilt gemäß der Gleichung (3.19): $\zeta = x_0 - \hat{x} \left(\frac{T}{G} - 1 \right)$.

Versucht man nun, in analoger Weise die 2π -Periodizität des Ausdrucks $\Phi_\lambda(x_0)$ herzuleiten, so erlebt man eine Enttäuschung. Denn aus den Gleichungen (3.26) und (3.27) ergibt sich keinerlei Periodizität bezüglich der Variablen x_0 . Allerdings stellt man fest, daß man diese Periodizität sozusagen künstlich erzeugen kann, indem man von einer Variation bezüglich der Variablen Δ_x absieht und die feste Wahl $\Delta_x(x_0) = x_0$ trifft. Dabei sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß sich die Festsetzung $\Delta_x(x_0) = x_0$ nicht nur aus der analytischen Forderung nach Periodizität ergibt. Es stellt sich vielmehr heraus, daß es sich dabei um eine numerische Notwendigkeit handelt. Denn – wie schon im Fall des Potentials $V(x) = \frac{1}{2}(x - \pi)^2 - 10 \cos x$ geschehen – so scheitert man auch beim Potential $V(x) = -g \cos x$ beim Versuch, die Größe $\Phi_\lambda(x_0)$ numerisch bezüglich des Paares (Ω, Δ_x) zu minimieren ¹⁴.

Der klassische Grenzfall

Um auch im Fall periodischer Nebenbedingungen den klassischen Grenzfall diskutieren zu können, ist es selbstverständlich zuallererst notwendig, daß man sich den expliziten Ausdruck für die klassische Zustandssumme \mathcal{Z}_{class} beschafft ¹⁵. Dies geschieht im Anhang (B.2), wo darüber hinaus mit Hilfe der im Abschnitt (3.2.2) geleisteten Vorarbeiten gezeigt wird, wie im Grenzfall hoher Temperaturen, d.h. für $\beta = \frac{1}{k_B T} \rightarrow 0$, die rechte Seite der Ungleichung (2.162) in den klassischen Ausdruck \mathcal{Z}_{class} übergeht. Damit gilt also auch für den Fall periodischer Nebenbedingungen, daß im Grenzfall $\beta \rightarrow 0$ die angenäherten Zustandssummen \mathcal{Z}_a und \mathcal{Z}_c ¹⁶ in die klassische und damit exakte Zustandssumme (2.2) übergehen. Diese analytischen Überlegungen lassen sich selbstverständlich anhand der numerisch erzielten Resultate bestätigen:

¹⁴Dieser Versuch ist nicht verboten, da die Forderung nach Periodizität zwar venünftig ist, aber nicht notwendig ist im Hinblick auf die Gültigkeit der Ungleichung (3.47).

¹⁵Der für den nicht-periodischen Fall gültige Ausdruck (3.34) findet sich praktisch in jedem Buch über statistische Mechanik.

¹⁶Es bezeichnet \mathcal{Z}_a die obere und \mathcal{Z}_c die untere Zeile der rechten Seite der Ungleichung (2.162).

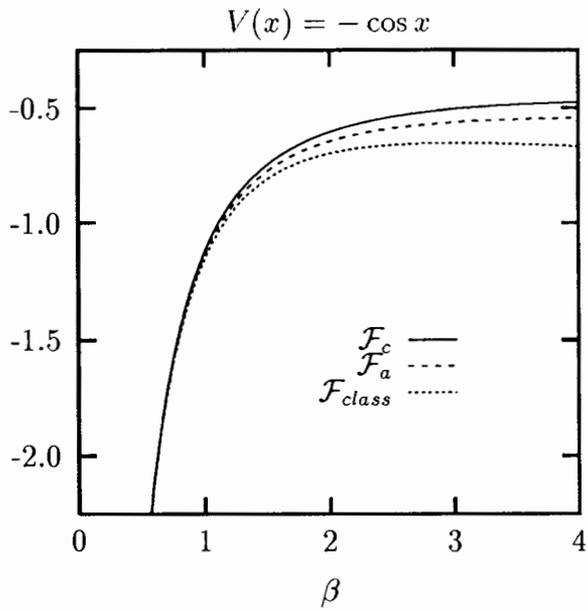


Abbildung 3.53

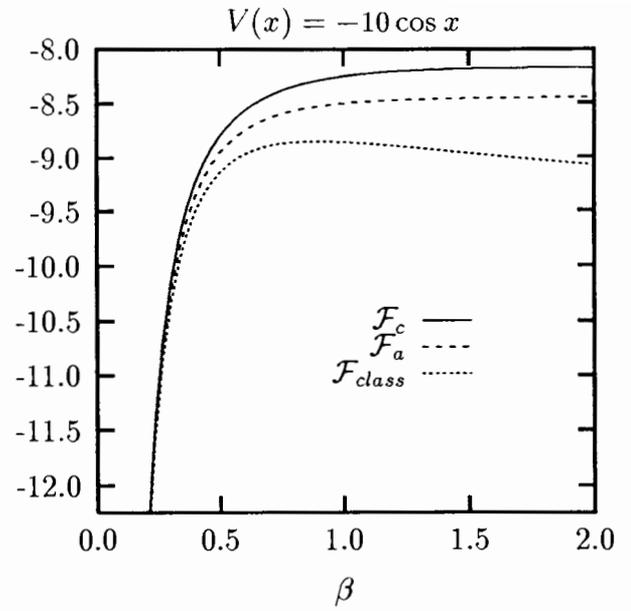


Abbildung 3.54

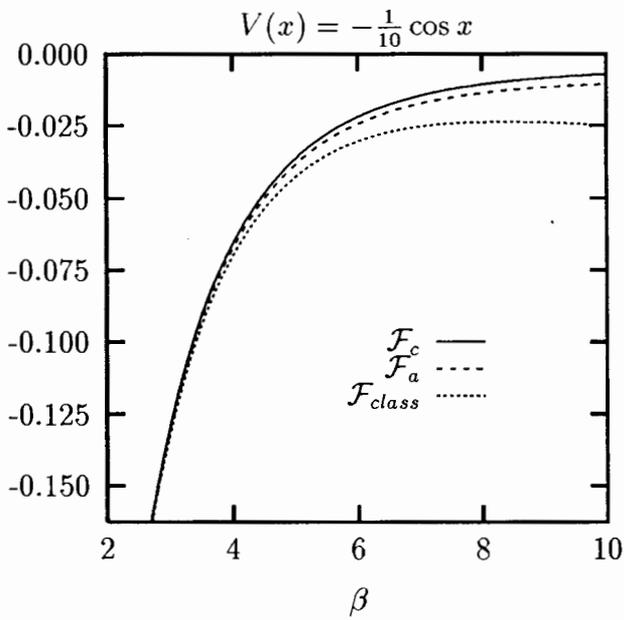


Abbildung 3.55

Die Freien Energien

In Analogie zur Vorgehensweise des Abschnitts (3.2.3) sollen auch im periodischen Fall die angenäherten Freien Energien \mathcal{F}_a und \mathcal{F}_c für $\beta \approx 5$ und $\beta \approx 50$ einander gegenübergestellt werden:

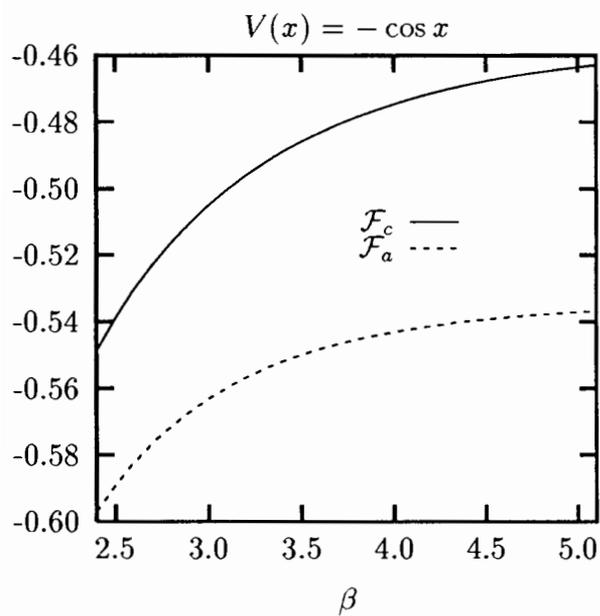


Abbildung 3.56

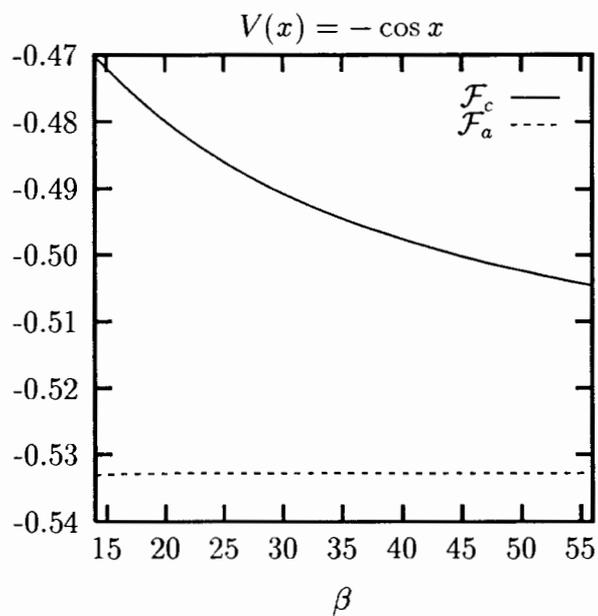


Abbildung 3.57

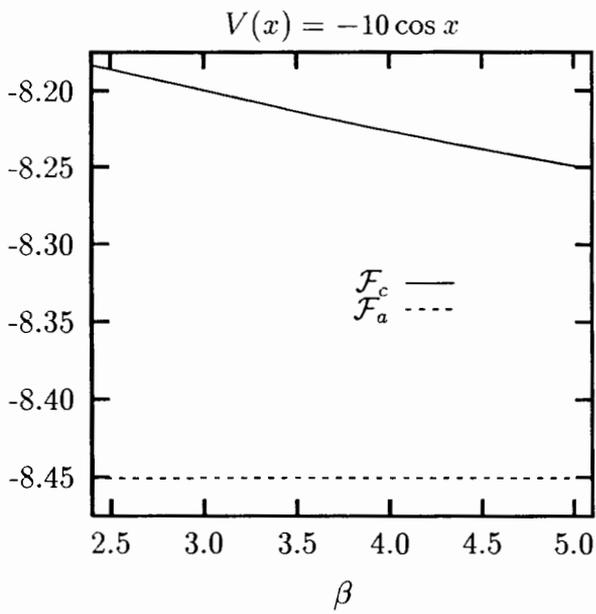


Abbildung 3.58

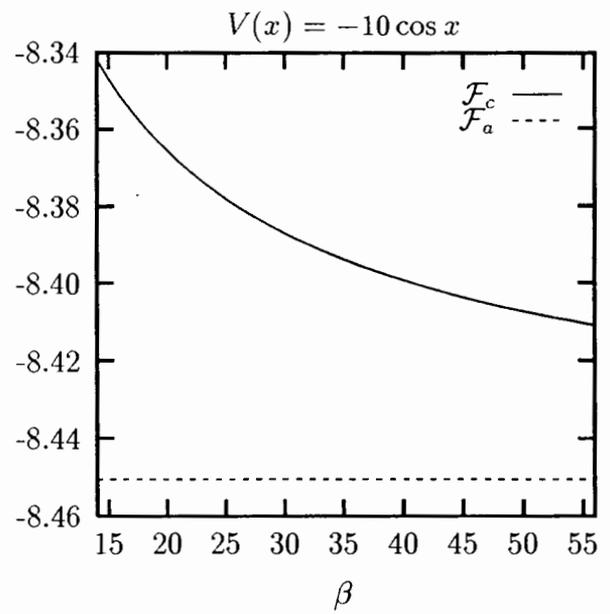


Abbildung 3.59

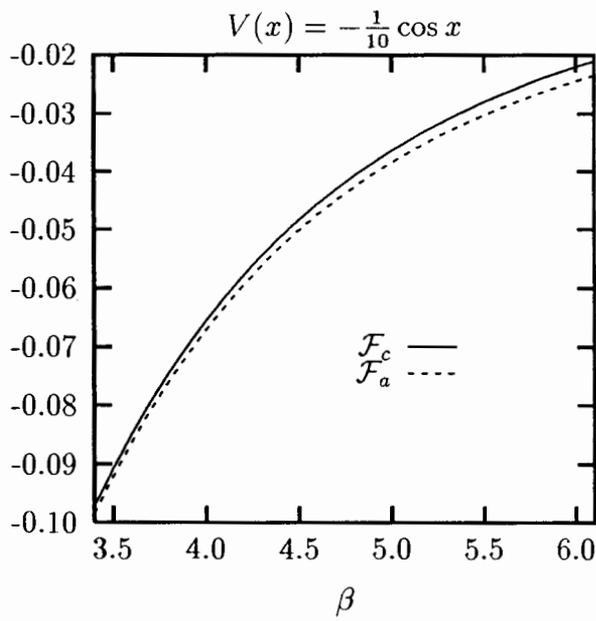


Abbildung 3.60

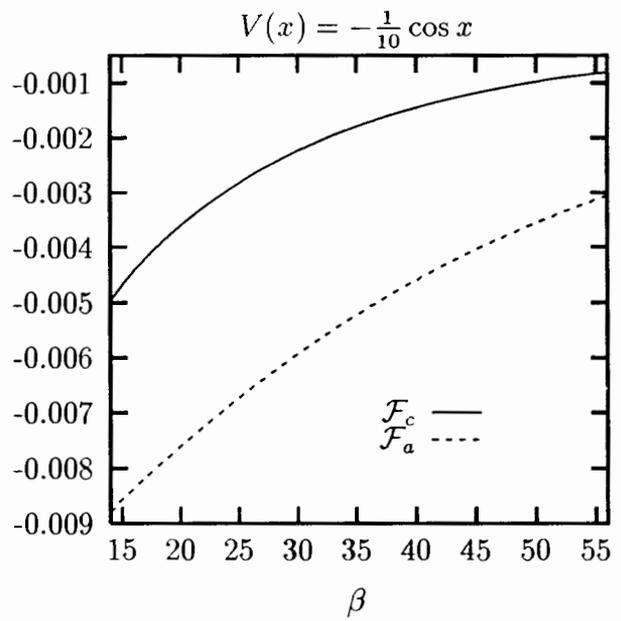


Abbildung 3.61

Der λ Plot

In numerischer Hinsicht unterscheidet sich der periodische vom nicht-periodischen Fall hauptsächlich dadurch, daß man im periodischen Fall mit dem zusätzlichen Problem zu kämpfen hat, die unendliche Summe über λ (numerisch) berechnen zu müssen (siehe die Gleichung (2.162)). Dabei kann man die Konvergenz der betreffenden unendlichen Summe aufgrund des Faktors $\exp[-\beta \frac{m}{2} \omega_\lambda^2]$ wohl als gesichert ansehen. Dennoch empfiehlt es sich im Bestreben, unnötigen Rechenaufwand zu vermeiden, daß man kontrolliert, wie rasch die Summenkonvergenz eintritt. Dies geschieht am besten dadurch, daß man die Ausdrücke

$$\begin{aligned}
 S_a(\lambda) &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp[-\beta \Phi_\lambda(\bar{x}, \phi)] \\
 S_c(\lambda) &= \int_0^{2\pi} d\phi \exp[-\beta \Phi_\lambda(\phi)]
 \end{aligned}
 \tag{3.51}$$

in Abhängigkeit von der diskreten Variablen λ aufträgt. Dabei reicht es aufgrund der sich unmittelbar aus der Gleichung (3.10) ergebenden Beziehungen

$$S_a(-\lambda) = S_a(\lambda) \quad \text{und} \quad S_c(-\lambda) = S_c(\lambda)
 \tag{3.52}$$

aus, daß man ausschließlich positive Werte für λ betrachtet:

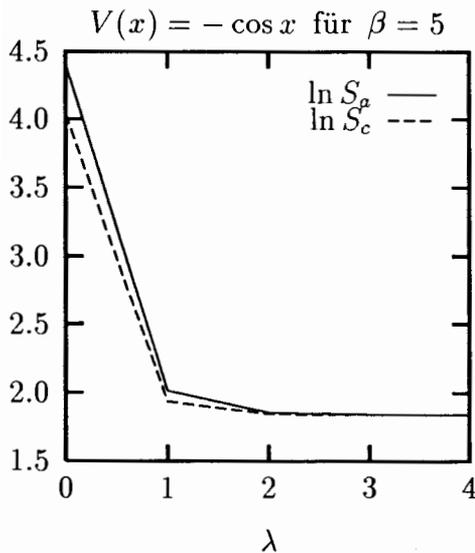


Abbildung 3.62

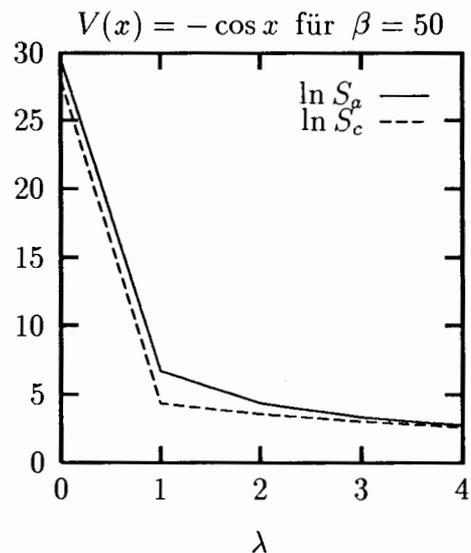


Abbildung 3.63

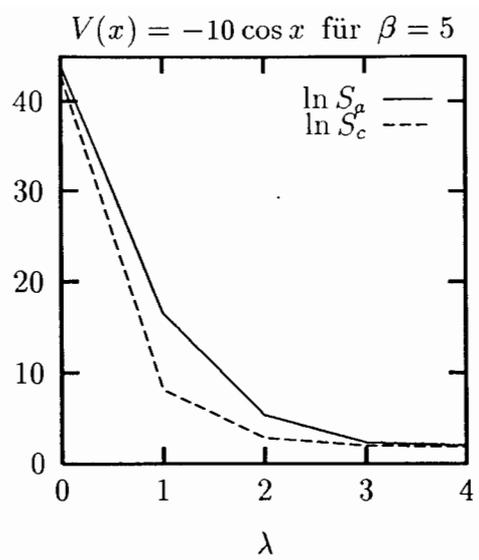


Abbildung 3.64

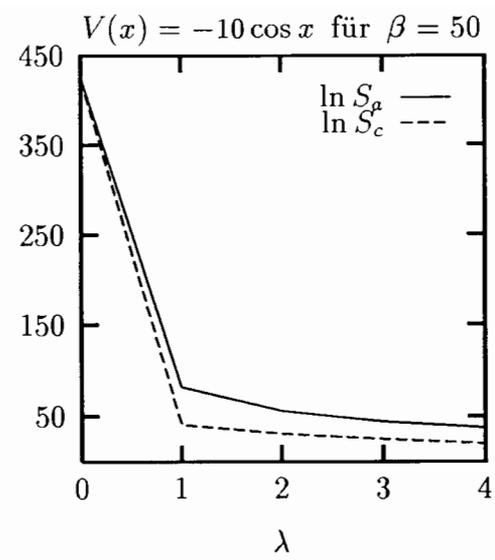


Abbildung 3.65

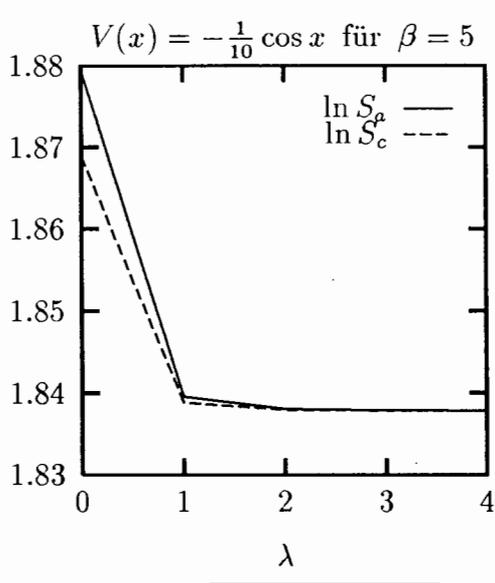


Abbildung 3.66

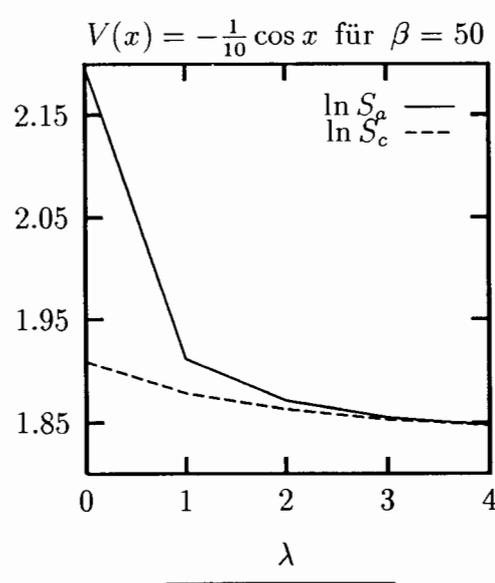


Abbildung 3.67

Die Ortsverteilungen $\rho(\phi)$

Selbstverständlich lassen sich auch im Fall periodischer Nebenbedingungen Ausdrücke herleiten, mit Hilfe derer es möglich ist, die (periodische) Ortsverteilung $\rho(\phi)$ approximativ zu bestimmen. Im speziellen ergeben sich analog zur Argumentation des Abschnitts (2.4.2) die folgenden zwei Abschätzungen für $\rho(\phi)$:

$$\rho(\phi) \approx \begin{cases} \rho_a(\phi) = \frac{1}{Z_a} \sum_{\lambda} \exp\left[-\beta \frac{m}{2} \omega_{\lambda}^2\right] \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \exp[-\beta \Phi_{\lambda}(\bar{x}, \phi)] \\ \rho_c(\phi) = \frac{1}{Z_c} \sum_{\lambda} \exp\left[-\beta \frac{m}{2} \omega_{\lambda}^2\right] \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \exp[-\beta \Phi_{\lambda}(\phi)] \end{cases} \quad (3.53)$$

Im folgenden sind die wiederum für $\beta = 5$ bzw. $\beta = 50$ erzielten numerischen Resultate abgebildet:

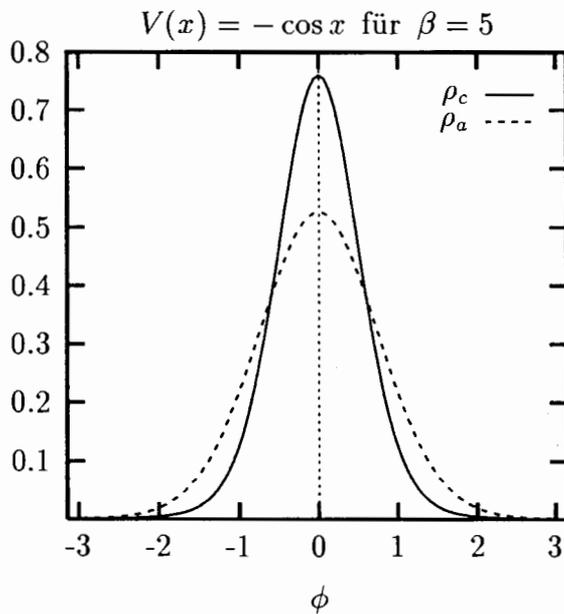


Abbildung 3.68

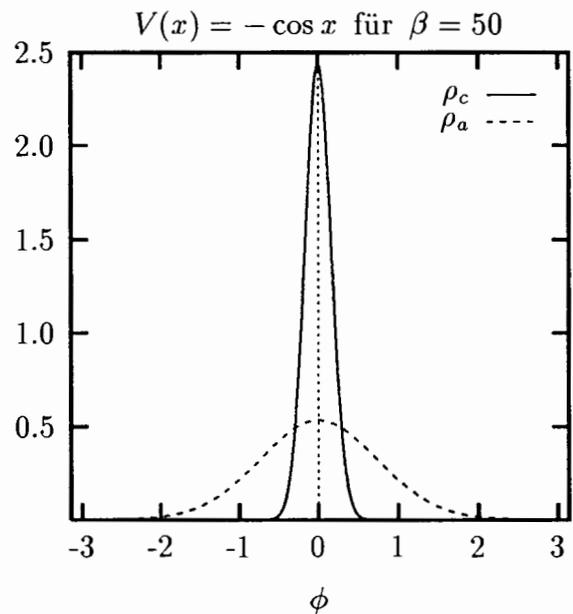


Abbildung 3.69

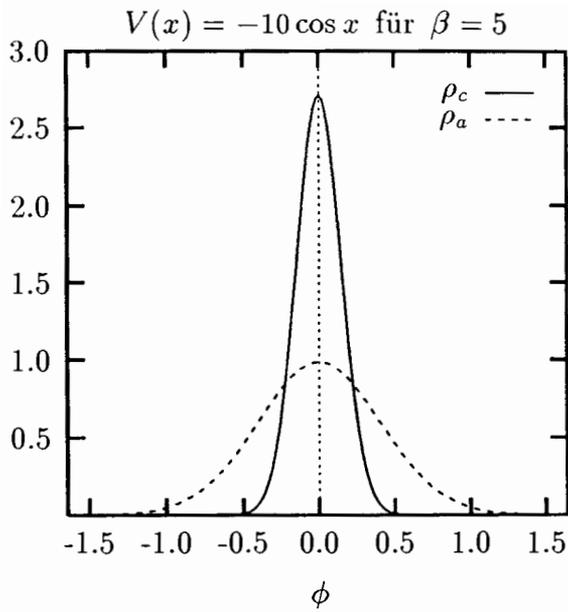


Abbildung 3.70

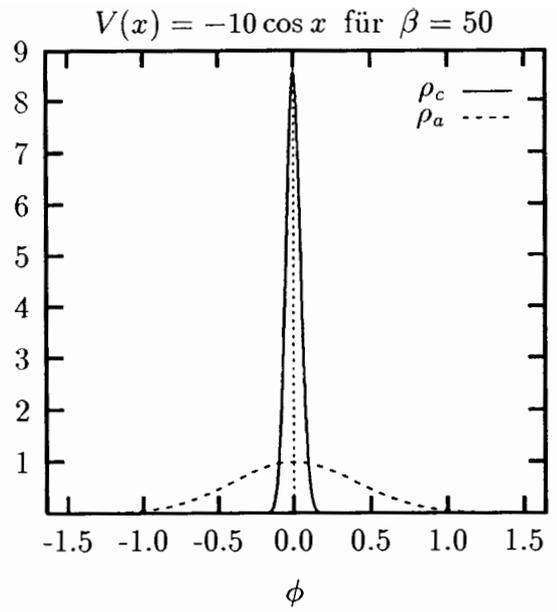


Abbildung 3.71

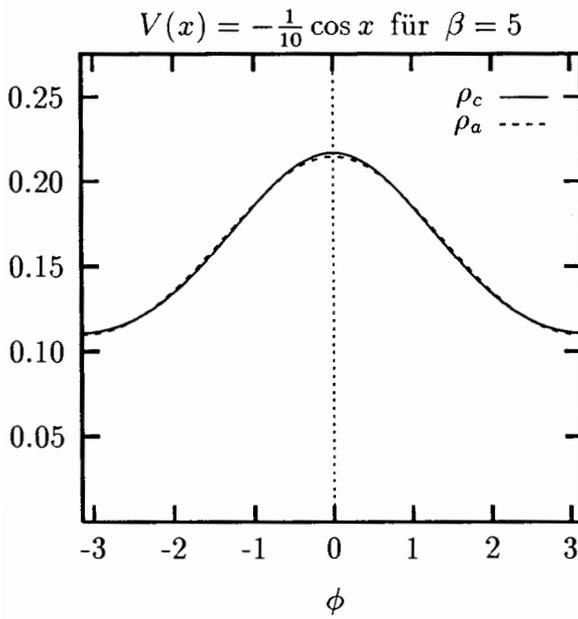


Abbildung 3.72

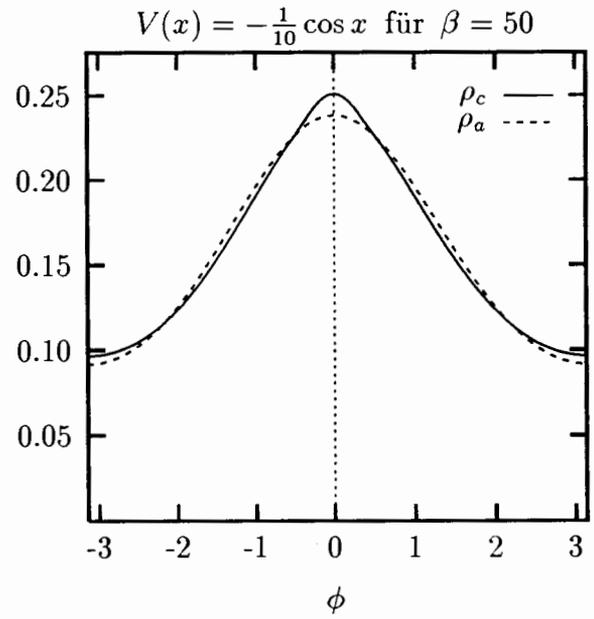


Abbildung 3.73

Kapitel 4

Zusammenfassung

In diesem Kapitel soll versucht werden, ein Resumé der in dieser Arbeit erzielten Resultate zu ziehen. Dabei fällt es schwer, ein allgemeingültiges Fazit aufzustellen, da je nach Problemstellung und je nach Standpunkt des Betrachters verschiedene Aspekte stärker oder schwächer in den Vordergrund rücken. Daher wird man dem Ganzen wohl am besten gerecht, wenn man bei der Zusammenfassung stichpunktartig vorgeht:

- Es wurde in dieser Arbeit erfolgreich geschafft, zwei neue Variationsansätze aufzustellen, die analog zum Ansatz von Feynman und Kleinert letztlich allein auf der Beziehung (2.36) beruhen. Dabei verkörpern die beiden neuen Ansätze den unmittelbaren Versuch, die Diagonalmatrixelemente des Operators $e^{-\beta\hat{H}}$ abzuschätzen, wodurch nicht nur eine angenäherte Berechnung der Freien Energie, sondern auch der Ortsverteilung in direkter Weise ermöglicht wird. Darüber hinaus wurde in dieser Arbeit erfolgreich aufgezeigt, wie sich damit der nachträgliche Einbau periodischer Nebenbedingungen bewerkstelligen läßt.
- Es wurde in dieser Arbeit erfolgreich geschafft, die bereitgestellten Näherungsverfahren numerisch umzusetzen und anhand von einigen Beispielfällen zu erproben.
- Im nicht-periodischen Fall stellt im Hinblick auf eine angenäherte Berechnung der Freien Energie der herkömmliche Ansatz von Feynman und Kleinert wohl immer noch die beste Möglichkeit dar. Zwar konnten mit der Methode a leichte Verbesserungen erzielt werden, aber es ist fraglich, ob diese Verbesserungen groß genug sind, um den stark erhöhten Rechenaufwand der Methode a ¹ zu rechtfertigen. .

¹Im Hinblick auf die numerische Umsetzung der drei Näherungsverfahren läßt sich die grobe Faustregel aufstellen, daß entsprechende Rechnungen bei der Methode b eine Angelegenheit von Sekunden, bei der

- Im nicht-periodischen Fall erscheint es möglich, daß bei der approximativen Bestimmung der Ortsverteilung mit Hilfe der beiden Näherungsverfahren a und c (siehe die Gleichung (2.139)) tatsächlich Verbesserungen gegenüber der von Kleinert vorgeschlagenen Abschätzung (2.140) erzielt werden können. Diese Annahme wird zum einen durch die Beobachtung gerechtfertigt, daß die beiden Kurven der Methoden a und c praktisch stets übereinstimmen, während die Kleinert'sche Kurve oftmals einen abweichenden Verlauf zeigt (siehe die Abbildungen (3.37) bis (3.52)), was sicherlich dadurch zu begründen ist, daß die Kleinert'sche Methode ja auch in analytischer Hinsicht den beiden Variationsansätzen a und c nicht völlig gleichzusetzen ist, da sie von einer zusätzlichen Näherung Gebrauch macht (siehe die Bemerkung vor Gleichung (2.140)). Darüber hinaus wird die obige Behauptung vor allem auch durch die bei der Untersuchung des Potentials $V(x) = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{10}x^4$ erzielten Resultate gestützt (siehe die Abbildung (3.44)). Denn für dieses Potential ist – wie aus der Referenz [5] (Kapitel 5.8) hervorgeht – im Tieftemperaturlimit zu erwarten, daß die Methode von Kleinert keine allzu gute Abschätzung der Ortsverteilung mehr liefert. Nun ist aber zu beobachten, daß gerade in diesem Fall die beiden Kurven a und c am stärksten von der Kleinert'schen Kurve abweichen (vergleiche dazu auch die Abbildung (5.8) in der Referenz [5]).
- Nach dem Einbau periodischer Nebenbedingungen scheint im Hinblick auf eine approximative Bestimmung der Freien Energie nur noch das Näherungsverfahren a brauchbar zu sein. Jedenfalls liefert die Methode c bei der Untersuchung des Potentials $V(x) = -g \cos x$ die wesentlich größeren oberen Schranken als die Methode a, so daß sich der erhöhte numerische Rechenaufwand des Näherungsverfahrens a in jedem Fall zu lohnen scheint.
- Im Hinblick auf eine angenäherte Berechnung der Ortsverteilung fällt auf, daß nach dem Einbau periodischer Nebenbedingungen die Übereinstimmung der beiden Näherungskurven a und c, die im nicht-periodischen Fall noch festzustellen war, praktisch nicht mehr gegeben ist. Da keine exakten Ergebnisse vorliegen, fällt es schwer zu beurteilen, welche der beiden Näherungskurven a und c dem tatsächlichen Verlauf wohl näher kommt (vergleiche dazu den Anfang des Abschnitts (3.2.4)). Im Fall pe-

Methode c von Minuten, und bei der Methode a von Stunden sind. Dabei führt bei der Methode a vor allem die Ausführung des Doppelintegrals über \bar{x} und x_0 zu einer Vervielfachung des Rechenaufwands gegenüber der Methode b.

riodischer Nebenbedingungen wäre es daher wünschenswert, daß man die gegebenen Näherungsverfahren noch anhand einiger anderer periodischer Beispielpotentiale untersucht, für die gegebenenfalls exakte Ergebnisse vorliegen.

Anhang A

Ergänzende Rechnungen zu Kapitel 2

A.1 Euklidische Wirkung des harmonischen Oszillators

Aus der Gleichung (2.12) gewinnt man unmittelbar die Fourier Entwicklung der Ableitung des Pfades $x(\tau)$ nach der imaginären Zeit τ :

$$\dot{x}(\tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i\omega_m \mathcal{X}_m e^{i\omega_m \tau}. \quad (\text{A.1})$$

Mit Hilfe der beiden Fourier Entwicklungen (2.12) und (A.1) erhält der Integrand auf der rechten Seite der Gleichung (2.6) für den Fall, daß man das Potential (2.18) diskutiert, die folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} \frac{m}{2} \dot{x}(\tau)^2 + V_0[x(\tau)] &= \frac{m}{2} \dot{x}(\tau)^2 + \frac{m}{2} \Omega^2 (x(\tau) - \Delta)^2 = \\ &= \frac{m}{2} \left(\begin{array}{llll} \sum_{m,n} & -\omega_m \omega_n & \mathcal{X}_m & \mathcal{X}_n & e^{i(\omega_m + \omega_n)\tau} \\ + \sum_{m,n} & \Omega^2 & \mathcal{X}_m & \mathcal{X}_n & e^{i(\omega_m + \omega_n)\tau} \\ - \sum_m & \Omega^2 & \mathcal{X}_m & 2\Delta & e^{i\omega_m \tau} \\ + & \Omega^2 & & \Delta^2 & \end{array} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Unter Verwendung des Integrals

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega_l \tau} = \hbar\beta \int_0^1 ds e^{i2\pi l s} = \hbar\beta \delta_{l,0} \quad (\text{A.3})$$

läßt sich nun das in der Gleichung (2.6) auftauchende Integral über τ leicht lösen. Man erhält:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_0[x(\tau)] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}(\tau)^2 + V_0[x(\tau)] \right\} \\
&= \hbar\beta \frac{m}{2} \left(\begin{array}{ccc} \sum_m -\omega_m \omega_{-m} & \mathcal{X}_m & \mathcal{X}_{-m} \\ + \sum_m \Omega^2 & \mathcal{X}_m & \mathcal{X}_{-m} \\ - \Omega^2 & \mathcal{X}_0 & 2\Delta \\ + \Omega^2 & & \Delta^2 \end{array} \right) = \hbar\beta \frac{m}{2} \left(\begin{array}{ccc} \sum_m \omega_m^2 & |\mathcal{X}_m|^2 \\ + \sum_m \Omega^2 & |\mathcal{X}_m|^2 \\ - \Omega^2 & \mathcal{X}_0 & 2\Delta \\ + \Omega^2 & & \Delta^2 \end{array} \right) \\
&= \hbar\beta m \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2) |\mathcal{X}_m|^2 + \hbar\beta \frac{m}{2} \Omega^2 (\mathcal{X}_0 - \Delta)^2.
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Mit den Beziehungen (2.13) und (2.16) ergibt sich daraus sofort das gewünschte Resultat (2.19).

A.2 Die Integrationen über \mathbf{R} und \mathbf{I}

Mit Hilfe der in der Gleichung (2.21) eingeführten Abkürzung

$$\int d\mathbf{R} \int d\mathbf{I} = \prod_{m=1}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{m\beta\omega_m^2}}{\pi} dR_m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{m\beta\omega_m^2}}{\pi} dI_m \right) \tag{A.5}$$

lassen sich die beiden in den Gleichungen (2.45) und (2.60) auftauchenden Integrale über \mathbf{R} und \mathbf{I} wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned}
&\int d\mathbf{R} \int d\mathbf{I} \exp \left[-\beta m \sum_{m=1}^{\infty} (\omega_m^2 + \Omega^2) \left([R_m - \Delta R_m]^2 + [I_m - \Delta I_m]^2 \right) \right] \\
&= \prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \Omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dR}{\sqrt{\pi}} e^{-R^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dI}{\sqrt{\pi}} e^{-I^2} \right) \\
&= \prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \Omega^2} \right) = F(\Omega).
\end{aligned} \tag{A.6}$$

Dabei findet man die explizite Definition der Funktion $F(\Omega)$ in der Gleichung (A.8). Das in der voranstehenden Gleichung auftauchende unendliche Produkt läßt sich mit Hilfe der Referenz [8], S.37, 1.431 lösen:

$$\prod_{m=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\Omega^2}{\omega_m^2} \right) = \prod_{m=1}^{\infty} \left(1 + \frac{[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega]^2}{m^2 \pi^2} \right) = \frac{1}{F(\Omega)}. \tag{A.7}$$

A.3 Tabelle der Funktionen

$$F(\Omega) = \begin{cases} \frac{\frac{\hbar\beta}{2}\Omega}{\sinh[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega]} & \Omega^2 \geq 0 \\ \frac{\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2}}{\sin[\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2}]} & \Omega^2 < 0 \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

$$G(\Omega) = \begin{cases} \frac{\hbar\beta}{2}\Omega \coth[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega] - 1 & \Omega^2 \geq 0 \\ \frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2} \cot[\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2}] - 1 & \Omega^2 < 0 \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

$$H(\Omega) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\frac{\frac{\hbar\beta}{2}\Omega}{\sinh[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega] \cosh[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega]} - 1 \right] & \Omega^2 \geq 0 \\ \frac{1}{2} \left[\frac{\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2}}{\sin[\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2}] \cos[\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2}]} - 1 \right] & \Omega^2 < 0 \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

$$a(\Omega) = \begin{cases} \frac{1}{\beta m} \frac{1}{\Omega^2} \left[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega \coth[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega] - 1 \right] & \Omega^2 \geq 0 \\ \frac{1}{\beta m} \frac{1}{\Omega^2} \left[\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2} \cot[\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2}] - 1 \right] & \Omega^2 < 0 \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

$$b(\Omega, \tau) = \begin{cases} \frac{1}{\beta m} \frac{1}{\Omega^2} \left[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega \frac{\cosh[(\frac{\hbar\beta}{2} - \tau)\Omega]}{\sinh[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega]} - 1 \right] & \Omega^2 \geq 0 \\ \frac{1}{\beta m} \frac{1}{\Omega^2} \left[\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2} \frac{\cos[(\frac{\hbar\beta}{2} - \tau)\sqrt{-\Omega^2}]}{\sin[\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2}]} - 1 \right] & \Omega^2 < 0 \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

$$c(\Omega, \tau) = \begin{cases} \frac{\frac{\hbar\beta}{2}\Omega \cosh[(\frac{\hbar\beta}{2} - \tau)\Omega] - \sinh[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega]}{\frac{\hbar\beta}{2}\Omega \cosh[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega] - \sinh[\frac{\hbar\beta}{2}\Omega]} & \Omega^2 \geq 0 \\ \frac{\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2} \cos[(\frac{\hbar\beta}{2} - \tau)\sqrt{-\Omega^2}] - \sin[\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2}]}{\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2} \cos[\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2}] - \sin[\frac{\hbar\beta}{2}\sqrt{-\Omega^2}]} & \Omega^2 < 0 \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

A.4 Die Transformation von “schiefen” zu “geraden” Pfaden

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, wie man ein Pfadintegral, bei dem über alle Pfade $x(\tau)$ integriert wird, die vom Anfangspunkt $x_a = x(\tau = 0)$ zum Endpunkt $x_b = x(\tau = \hbar\beta)$ laufen, in ein entsprechendes Pfadintegral umwandelt, bei dem über solche Pfade $y(\tau)$ integriert wird, die denselben Anfangs- und Endpunkt $x_a = y(\tau = 0) = y(\tau = \hbar\beta)$ besitzen. Dazu führt man zunächst die Geschwindigkeit v durch die Definition

$$v = \frac{x_b - x_a}{\hbar\beta} \quad (\text{A.14})$$

ein, um anschließend die folgende Beziehung zwischen dem “geraden” Pfad $y(\tau)$ und dem “schiefen” Pfad $x(\tau)$ aufzustellen:

$$y(\tau) = x(\tau) - v\tau \quad \iff \quad x(\tau) = y(\tau) + v\tau. \quad (\text{A.15})$$

Damit läßt sich das Quadrat der Ableitung des Pfades $x(\tau)$ nach der imaginären Zeit τ folgendermaßen umschreiben:

$$\dot{x}(\tau)^2 = (\dot{y}(\tau) + v)^2 = \dot{y}(\tau)^2 + 2v\dot{y}(\tau) + v^2. \quad (\text{A.16})$$

Mit Hilfe der beiden Integrale

$$\begin{aligned} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \dot{y}(\tau) &= y(\hbar\beta) - y(0) = x_a - x_a = 0 \\ \int_0^{\hbar\beta} d\tau v^2 &= \hbar\beta v^2, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

sowie der Beziehungen (A.15) und (A.16) gewinnt man unmittelbar das folgende Endergebnis:

$$\begin{aligned} &\int_{x_a}^{x_b} \mathcal{D}[x(\tau)] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}(\tau)^2 + V[x(\tau)] \right\} \right] \\ &= \exp \left[-\beta \frac{m}{2} v^2 \right] \int_{x_a}^{x_a} \mathcal{D}[y(\tau)] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{y}(\tau)^2 + V[y(\tau) + v\tau] \right\} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Anhang B

Ergänzende Rechnungen zu Kapitel 3

B.1 Die Minimierung

Wie bereits im Abschnitt (2.2.6) ausführlich dargestellt wurde, ist es notwendig, daß man den Ausdruck $\Phi(\nu)$ minimiert, um möglichst gute Annäherungen an die exakten Ergebnisse zu erzielen. Da ein entsprechendes numerisches Minimierungsverfahren durch die Kenntnis der Ableitung von $\Phi(\nu)$ wesentlich beschleunigt wird, wurden ausgehend von dem im Abschnitt (3.1) vorgestellten Formelapparat auch die Ableitungen der betreffenden Größen berechnet und in Programmcode umgesetzt. An dieser Stelle sollen aus Gründen der Vollständigkeit die erzielten Resultate aufgeführt werden. Dabei erweist es sich im Bemühen einer möglichst vereinfachten Darstellung als günstig, nicht die eigentlichen Ableitungen nach x , sondern die mit $(-2x)$ multiplizierten Ableitungen (nach x) aufzulisten. Dementsprechend soll an dieser Stelle der folgende Differentialoperator eingeführt werden:

$$\hat{D} \dots = -2x \frac{d}{dx} \dots \quad (\text{B.1})$$

Bevor man die Fälle a, b und c im einzelnen behandelt, ist es notwendig, die Ableitungen der im Abschnitt (3.1.2) aufgeführten Funktionen zu berechnen:

B.1.1 Tabelle der Ableitungen

$$\hat{D}F(x) = F(x) G(x) \quad (\text{B.2})$$

$$\hat{D}G(x) = F(x)^2 - G(x) - 1 = 2 H(x) (1 + G(x)) \quad (\text{B.3})$$

$$\hat{D}H(x) = (1 + 2H(x)) (G(x) - H(x)) \quad (\text{B.4})$$

$$\hat{D}a(x) = a(x) \left(\frac{\hat{D}G(x)}{G(x)} + 2 \right) \quad (\text{B.5})$$

$$\hat{D}T(x, t) = \begin{cases} G(x) (1 + T(x, t)) - F(x) \sqrt{x} t \sinh[\sqrt{x} t] & x \geq 0 \\ G(x) (1 + T(x, t)) + F(x) \sqrt{-x} t \sin[\sqrt{-x} t] & x < 0 \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

B.1.2 Fall a

Wendet man den in der Gleichung (B.1) eingeführten Differentialoperator \hat{D} auf beide Seiten der Gleichung (3.18) an, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \beta \hat{D} \Phi(\bar{x}, x_0) &= \beta \int \hat{D} \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma] - G + \\ &+ \frac{(1 - \Lambda_1) \Lambda_2 - \hat{D}G}{2} + \frac{\Lambda_1 \Lambda_2^2 + (1 - \Lambda_1) \hat{D}\Lambda_2}{4}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Dabei wurde bereits die sich aus

$$\Lambda_2 = \frac{\hat{D}G}{G} + 2 = \frac{\hat{D}a}{a} \quad (\text{B.8})$$

ergebende Beziehung

$$\hat{D}\Lambda_1 = -\Lambda_1 \frac{\hat{D}a}{a} = -\Lambda_1 \Lambda_2 \quad (\text{B.9})$$

benutzt. Zur expliziten Berechnung des letzten Summanden der rechten Seite der Gleichung (B.7) benötigt man ferner die folgende Ableitung:

$$\hat{D}\Lambda_2 = 2F^2 + (1 - \Lambda_2) \frac{\hat{D}G}{G} = 2F^2 - (1 - \Lambda_2)(2 - \Lambda_2). \quad (\text{B.10})$$

Dabei wurde erneut von der Gleichung (B.8) Gebrauch gemacht. Die Berechnung der ebenfalls in der Gleichung (B.7) auftauchenden Ableitung der Größe $\Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma]$ ergibt sich unmittelbar aus der folgenden Beziehung:

$$\hat{D}\Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma] = \hat{D}\zeta \frac{\partial \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma]}{\partial \zeta} + \hat{D}\sigma \frac{\partial \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma]}{\partial \sigma}. \quad (\text{B.11})$$

Dabei sind in diesem Fall die Ableitungen von ζ und σ durch die folgenden zwei Beziehungen gegeben:

$$\hat{D}\sigma = \Lambda_2 \sigma - 2 \frac{\rho}{x} \frac{T}{G} [T(2 - \Lambda_2) + \hat{D}T] \quad (\text{B.12})$$

$$\hat{D}\zeta = (x_0 - \bar{x}) \frac{T(2 - \Lambda_2) + \hat{D}T}{G}. \quad (\text{B.13})$$

B.1.3 Fall b

Nach Anwendung des Differentialoperators \hat{D} auf die Gleichung (3.22) ergibt sich:

$$\beta \hat{D} \Phi(\bar{x}) = \beta \hat{D} \Xi[V(\cdot) | \bar{x} | a] - G - \frac{\hat{D}G}{2}. \quad (\text{B.14})$$

Dabei berechnet man den Ausdruck $\hat{D} \Xi[V(\cdot) | \bar{x} | a]$ am einfachsten durch:

$$\hat{D} \Xi[V(\cdot) | \bar{x} | a] = \hat{D}a \frac{\partial \Xi[V(\cdot) | \bar{x} | a]}{\partial a}. \quad (\text{B.15})$$

B.1.4 Fall c

In diesem Fall stößt man auf das Problem einer zweidimensionalen Minimierung bezüglich der Variablen x und Δ_x . Dies führt dazu, daß man den Gradienten $(\frac{\partial \Phi}{\partial x}, \frac{\partial \Phi}{\partial \Delta_x})$ berechnen muß. Dementsprechend soll im folgenden der Differentialoperator \hat{D} nicht als gewöhnliche, sondern als partielle Ableitung nach x verstanden werden. Genauer gesagt, soll gelten:

$$\hat{D} \dots = -2x \frac{\partial}{\partial x} \dots \quad (\text{B.16})$$

Um die partielle Ableitung nach Δ_x zu berechnen, bemerkt man zunächst, daß die Größe σ nicht vom Variationsparameter Δ_x abhängt. Anschließend stellt man für die Größe ζ die folgende nützliche Identität fest:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial \Delta_x} = \frac{x_0 - \zeta}{x_0 - \Delta_x}. \quad (\text{B.17})$$

Daraus folgert man unmittelbar:

$$\frac{\partial \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma]}{\partial \Delta_x} = \frac{x_0 - \zeta}{x_0 - \Delta_x} \frac{\partial \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma]}{\partial \zeta}. \quad (\text{B.18})$$

Unter Verwendung des voranstehenden Ausdrucks läßt sich schließlich die Gleichung (3.26) partiell nach Δ_x differenzieren. Man erhält:

$$\beta \frac{\partial \Phi(x_0)}{\partial \Delta_x} = \beta \hat{\int} \left(\frac{x_0 - \zeta}{x_0 - \Delta_x} \frac{\partial \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma]}{\partial \zeta} \right) + \frac{\Lambda x H}{x_0 - \Delta_x}. \quad (\text{B.19})$$

Mit Hilfe der beiden Beziehungen

$$\frac{\hat{D}G}{1+G} = 2H \quad (\text{B.20})$$

$$\hat{D}\Lambda = -2H\Lambda \quad (\text{B.21})$$

läßt sich die Gleichung (3.26) unmittelbar partiell nach x ableiten. Das Ergebnis lautet:

$$\begin{aligned} \beta \hat{D} \Phi(x_0) &= \beta \hat{\int} \hat{D} \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma] + H - G + \\ &+ \frac{\hat{D}H - \hat{D}G - \Lambda x \hat{D}H}{2} + \Lambda x H (1 + H). \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Zur expliziten Berechnung des oben auftretenden Ausdrucks $\hat{D} \Xi[V(\cdot) | \zeta | \sigma]$ benötigt man neben der Gleichung (B.11) die folgenden zwei Beziehungen:

$$\frac{\hat{D}\sigma}{2} = \sigma(1+H) - \frac{\rho}{x}(1+T) \frac{\hat{D}T - (1+T)2H}{1+G} \quad (\text{B.23})$$

$$\hat{D}\zeta = (x_0 - \Delta_x) \frac{\hat{D}T - (1+T)2H}{1+G}. \quad (\text{B.24})$$

B.2 Die klassische Zustandssumme im Fall periodischer Nebenbedingungen

Wie allgemein bekannt ist, kann man die klassische Mechanik formal aus der Quantenmechanik ableiten, indem man den Grenzübergang $\hbar \rightarrow 0$ vornimmt. Da der Kommutator zwischen Impuls \hat{p} und Ort \hat{x} allgemein von der Größenordnung \hbar ist, kann man in diesem Grenzfall in der Exponentialfunktion die kinetische und die potentielle Energie wie folgt voneinander abspalten:

$$e^{-\beta\hat{H}} = e^{-\beta\frac{\hat{p}^2}{2m}} e^{-\beta V(\hat{x})} (1 + \mathcal{O}(\hbar)). \quad (\text{B.25})$$

Mit Hilfe der voranstehenden Beziehung, sowie den Gleichungen (2.143) und (2.144) läßt sich im klassischen Grenzfall die Gleichung (2.157) folgendermaßen umformen:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{class} &= \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \sum_k \langle \phi | e^{-\beta\frac{\hat{p}^2}{2m}} | k \rangle \langle k | e^{-\beta V(\hat{x})} | \phi \rangle \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \sum_k \langle \phi | k \rangle e^{-\beta\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} e^{-\beta V(\phi)} \langle k | \phi \rangle \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \sum_k \exp \left[-\beta \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\phi) \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Noch ist es nicht möglich, daß man mit Hilfe der Beziehungen des Abschnitts (3.2.2) für den klassischen Grenzfall die rechte Seite der Ungleichung (2.162) in den voranstehenden Ausdruck überführt. Dies ändert sich jedoch, wenn man – wie schon im Abschnitt (2.4.1) – die Beziehungen (2.149) und (2.150) benützt, um die Summe über den diskreten Impuls k wieder in ein Integral über den kontinuierlichen Impuls p umzuwandeln. Man erhält:

$$\mathcal{Z}_{class} = \sum_l \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left[i 2\pi \frac{p}{\hbar} l - \beta \left(\frac{p^2}{2m} + V(\phi) \right) \right]$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_l \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left[-\frac{\beta}{2m} \left(p - i m \frac{2\pi}{\hbar\beta} l \right)^2 - \beta \frac{m}{2} \left(\frac{2\pi}{\hbar\beta} l \right)^2 - \beta V(\phi) \right] \\
&= \sum_l \exp \left[-\beta \frac{m}{2} \omega_l^2 \right] \int_0^{2\pi} d\phi \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \exp[-\beta V(\phi)]. \tag{B.27}
\end{aligned}$$

Bedenkt man nun, daß im klassischen Grenzfall wegen des Faktors $\exp[-\beta \frac{m}{2} \omega_l^2]$ ¹ sowohl zur unendlichen Summe der rechten Seite der Ungleichung (2.162), als auch zur voranstehenden unendlichen Summe (B.27) einzig und allein der Summand mit $\lambda = 0$ bzw. $l = 0$ beiträgt, so wird anhand der Beziehungen (3.40) und (3.43)² unmittelbar klar, daß die rechte Seite der Ungleichung (2.162) in den klassischen Ausdruck

$$\mathcal{Z}_{class} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int_0^{2\pi} d\phi \exp[-\beta V(\phi)] \tag{B.28}$$

übergeht.

¹Man beachte, daß gemäß der Gleichung (2.11) gilt: $\omega_l \propto l/\hbar\beta$.

²Auf diese Beziehungen kann man wegen der trivialen Identität $\Phi_{\lambda=0}(\nu) = \Phi(\nu)$ zurückgreifen.

Literaturverzeichnis

- [1] B.D. Josephson, Possible New Effects in Superconductive tunneling, Phys. Lett. **1**, 251 (1962)
- [2] K.K. Likharev, Dynamics of Josephson Junctions and Circuits (Gordon and Breach Sciences Publishers, Philadelphia, 1986)
- [3] A. Schmid, Quantum Mechanics of a Macroscopic Object (Institut für Theorie der Kondensierten Materie, Karlsruhe, 1987)
- [4] Seitel C., Effective Classical Potential and Approximative Free Energy of a Josephson Junction in a Superconducting Loop (Praktikumsbericht, Universität Augsburg, 1994)
- [5] H. Kleinert, Pfadintegrale (BI-Wiss.-Verl., Mannheim, 1993)
- [6] R.P. Feynman, Statistical Mechanics (Addison-Wesley, Redwood 1988)
- [7] H. Kleinert und R.P. Feynman, Effective Classical Partition Functions, Phys. Rev. A **34**, 6 (1986)
- [8] I.S. Gradshteyn und I.M. Ryzhik, Table of Integrals, Series, and Products (Academic Press, San Diego, 1965)
- [9] G. Hämmerlin und K.H. Hoffmann, Numerische Mathematik (Springer-Verl., 1991)
- [10] Press, Teukolsky, Vetterling und Flannery, Numerical Recipes in C (Cambridge University Press, 1988 und 1992)
- [11] R.P. Feynman und A.R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals (McGraw-Hill, New York, 1965)