

WESTFÄLISCHE
WILHELMS-UNIVERSITÄT
MÜNSTER

DIPLOMARBEIT

Grundzustandsenergieaufspaltung im RAZAVY-Potential in semiklassischer Näherung

Auf dem Weg zum Faktor \mathcal{K}

Autor:

Christopher KÜNSTLER

Betreuer:

Prof. Dr. Gernot MÜNSTER



institut für
theoretische physik

3. Februar 2014

Grundzustandsenergieaufspaltung im RAZAVY-Potential in semiklassischer Näherung

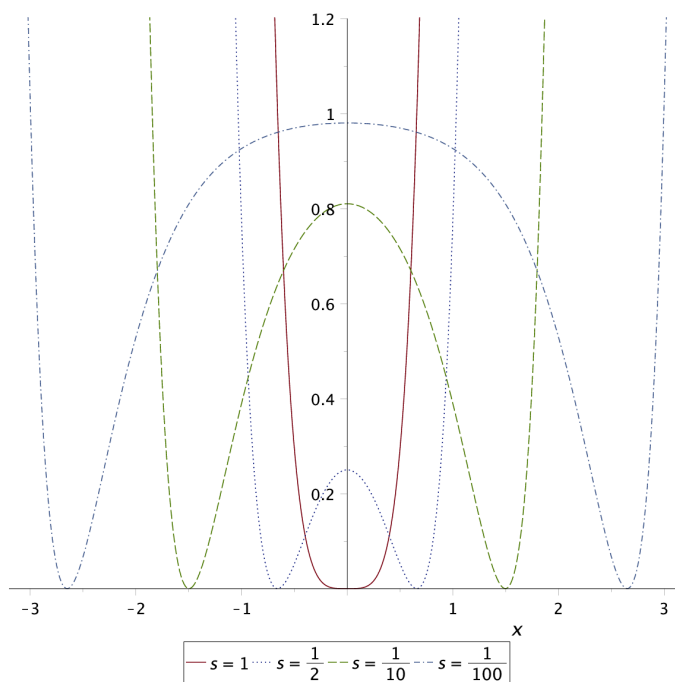
Auf dem Weg zum Faktor \mathcal{K}

Autor:

Christopher KÜNSTLER

Betreuer:

Prof. Dr. Gernot MÜNSTER



Das RAZAVY-Potential zu unterschiedlichen Parameterwerten.
Die Doppelmuldenform führt zu einer nur kleinen Aufspaltung
der beiden niedrigsten Energieeigenwerte.

Diese korrigierte Version unterscheidet sich nur geringfügig von der im Prüfungsamt am 03. Februar 2014 eingereichten Diplomarbeit. Die Änderungen betreffen hauptsächlich Tippfehler sowie Notation. Es wurden keine inhaltlichen Aussagen verändert.

Münster, 11. März 2014

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	8
2	Theoretische Grundlagen	14
2.1	Energieaufspaltung in Doppelmuldenpotentialen	14
2.1.1	Die quantenmechanische Übergangsamplitude	14
2.1.2	Sattelpunktmethode	15
2.1.3	Die Grundzustandsenergieaufspaltung	18
2.1.4	Die Nullmodentransformation	20
2.1.5	Multi-Instantonen	22
2.1.6	Das RAZAVY-Potential	26
2.2	Lösungsmethoden für Funktionaldeterminanten	30
2.2.1	Eigenwertprodukte	30
2.2.2	Gelfand-Yaglom-Methode	35
2.2.3	Coleman-Affleck-Methode	36
2.3	WKB-Näherung	39
2.3.1	WKB-Näherung für das RAZAVY-Potential	42
3	Die semiklassischen Berechnungen	43
3.1	Gelfand Yaglom	43
3.2	Eigenwertmethode	44
3.2.1	Eigenwertbedingung	48
3.2.2	Phasenverschiebungen	49
3.3	Energieaufspaltung	56
4	Korrekturen höherer Ordnung	60
4.1	Korrelations-Funktionen	60
4.2	Pfadintegral mit Quellterm und Greensfunktion	63
4.3	Wickscher Entwicklungssatz	66
4.4	Korrektur in 2-Loop-Ordnung	68
4.5	Allgemeine Darstellung der Greensfunktion $G'(t, t')$	69
4.5.1	Greensfunktion für das RAZAVY-Potential	76
5	Zusammenfassung und Diskussion	94
5.1	Zusammenfassung	94
5.2	Diskussion	95
5.3	Ausblick	100

1 Einleitung

In einer Arbeit von W.C. Poel [1] wurde das in [2] erstmals vorgestellte RAZAVY-Potential

$$V(x) = \frac{\beta^2}{2m} \left(\frac{1}{8} \xi^2 \cosh(4\beta x) - \hbar(n+1)\xi \cosh(2\beta x) - \frac{1}{8} \xi^2 \right) \quad (1.1)$$

hinsichtlich der exakten Energieeigenwerte untersucht, um anhand dessen eine Abschätzung für den sogenannten Faktor \mathcal{K} zu treffen. Dieser tritt bei der Berechnung des Pfadintegrals zur Bestimmung der Grundzustandsenergieaufspaltung typischer Doppelmuldenpotentiale in quadratischer Ordnung in Form einer Fluktuationsdeterminante auf. In dieser quadratischen Näherung gehen die Integrale in Gaußsche über. Berücksichtigt man noch höhere Ordnungen, so sind, zumindest nicht ohne weitere Näherungsannahmen, die Integrale nicht mehr geschlossen lösbar. Das interessante an der Pfadintegralmethode ist, dass sie wie die WKB-Methode, auf die wir später auch noch zu sprechen kommen werden, eine asymptotische Näherung ist. Asymptotisch, d.h. hier im Grenzfall hoher Wälle des Doppelmuldenpotentials, ist die Lösung daher exakt. Der Zusammenhang zwischen der Energieaufspaltung und diesem Faktor \mathcal{K} ist durch $\Delta E = 2\hbar\mathcal{K} e^{-\frac{1}{\hbar}\mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}]}$ gegeben. Der Exponent in der e -Funktion ist die Wirkung einer Lösung der klassischen (euklidischen) Bewegungsgleichung $m\ddot{x}_{\text{kl}} = V'(x_{\text{kl}})$. Dieser Faktor bildet den Beitrag 0. Ordnung, d.h. den klassischen Beitrag. Ziel dieser Arbeit soll es sein, den Faktor \mathcal{K} zu berechnen und mit den Abschätzungen aus der früheren Arbeit zu vergleichen.

Praktische Anwendungsgebiete wie z.B. der Ammoniak-Maser wurden in der damaligen Arbeit schon erörtert. Für den engen Zusammenhang zu Doppelmuldenpotentialen soll diese Problemstellung hier noch einmal rekapituliert werden. Beim Ammoniak-Molekül bilden die drei Wasserstoffatome die Grundfläche des einem Tetraeder ähnelnden Moleküls, bei dem das Stickstoffatom an der Spitze sitzt. Trägt man nun die Bindungsenergie als Funktion des Abstandes x des Stickstoffatoms zur Grundfläche auf, so ist die Abstoßung bei $x = 0$, also innerhalb der Fläche lokal am größten. Bei großen Abständen verhindert die kovalente Bindung zwischen den Elektronen eine weitere Entfernung des Stickstoffatoms. Infolgedessen gibt es einen idealen Abstand a , für den die Bindungsenergie minimal wird. Aufgrund der Symmetrie des Problems kann sich das Stickstoffatom allerdings auch genau so gut auf der Seite unterhalb der Fläche bei $-a$ befinden. Genau dies macht den Charakter von Doppelmuldenpotentialen aus. Da der abstoßende Potentialwall bei $x = 0$ endlich ist, besteht quantenmechanisch daher eine Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen diesen durchtunnelt. Für eine einfache heuristische Beschreibung nehmen wir zunächst einmal an, der Wall wäre unendlich hoch. Bekanntermaßen müssen die Wellenfunktionen dann bei $x = 0$ verschwinden.



Abbildung 1.1: Das Ammoniak-Molekül NH_3 . Der Aufenthaltsort des N -Atoms ist offensichtlich symmetrisch unter einer Spiegelung an der $H-H-H$ -Ebene. Zur einfachen quantenmechanischen Beschreibung des Moleküls als Funktion vom Abstand zur Ebene kann das RAZAVY-Potential herangezogen werden.¹

Wegen der Symmetrie des Problems reicht es außerdem aus, sich zunächst auf eine Seite (rechts oder links der Symmetrieachse) zu beschränken. Für eine Wellenfunktion $\psi_n(x)$, die das Problem für $x > 0$ löst (und für $x < 0$ dementsprechend verschwindet), löst $\psi_n(-x)$ das Problem offensichtlich für $x < 0$. Eine Wellenfunktion, die das gesamte Problem löst, kann durch diese Konstruktion geschrieben werden als

$$\Psi_n^\pm(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_n(x) \pm \psi_n(-x)) . \quad (1.2)$$

Auf diese Weise hat man die Wellenfunktionen bereits nach gerader und ungerader Parität sortiert. Bei der Berechnung der Energien stellt man nun fest

$$\langle \Psi_n^+ | \hat{H} | \Psi_n^+ \rangle = E_n = \langle \Psi_n^- | \hat{H} | \Psi_n^- \rangle . \quad (1.3)$$

Die Energien sind also entartet. Insbesondere auch der Grundzustand Ψ_0^+ und der erste „Angeregte“ Ψ_0^- . Bei nur endlich hohen Wällen müssen nun die zu den oben mit ψ bezeichneten korrespondierenden Wellenfunktionen in dem jeweils anderen Bereich, $x > 0$ bzw. $x < 0$, nicht mehr notwendigerweise verschwinden. Daraus resultiert, dass der Energie-Erwartungswert der damit gebildeten symmetrischen und antisymmetrischen Linearkombinationen nicht mehr identisch ist. Man sagt auch die Energien spalten auf. In Abbildung 1.2 sind die soeben gemeinten Zustände nebst dem RAZAVY-Potential eingezeichnet. Im Allgemeinen bleibt die Aufspaltung allerdings sehr klein,

¹www.caslab.com

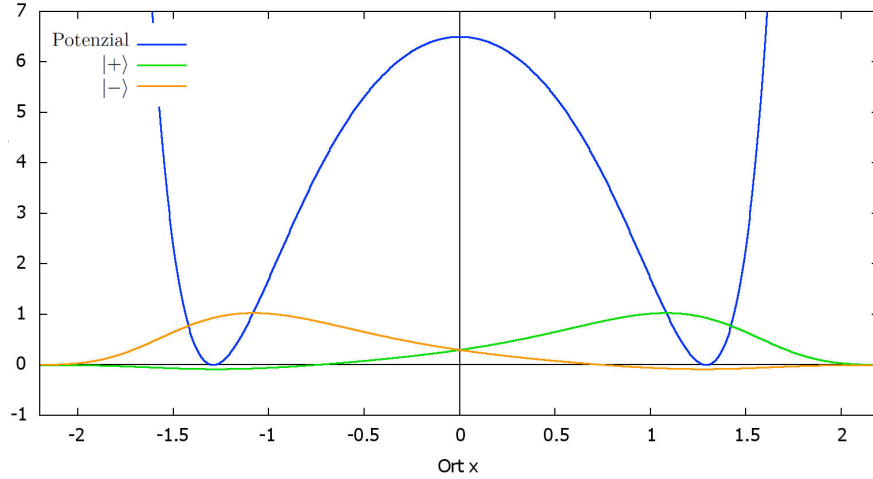


Abbildung 1.2: Für endlich hohe Wälle müssen die zu den ψ korrespondierenden Wellenfunktionen in den jeweils anderen Bereichen nicht mehr notwendigerweise verschwinden. Eingezeichnet ist auch das RAZAVY-Potential.²

so dass Näherungsmethoden hier ihre Anwendung finden. Am bekanntesten ist dabei wohl die zeitunabhängige nicht-entartete Störungsreihe. Weniger bekannt ist vielleicht die Tatsache, dass es sich schon bei den einfachsten Beispielen (z.B. anharmonischer Oszillator $V_I(x) = \lambda x^4$) nicht mehr um Potenzreihen im analytischen Sinn handelt. Vielmehr besitzen diese Reihen Konvergenzradius 0, so dass man hier von asymptotischen Reihen spricht. Anhand des folgenden Beispiels soll verdeutlicht werden, weshalb es sich nicht um analytische Potenzreihen handeln kann. Betrachtet man das Potential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda x^4$ für $\lambda > 0$, so hat das Potential nur ein reelles Extremum (Minimum) bei $x = 0$. Die echten Eigenwerte $E_n(\lambda)$ existieren $\forall n \in \mathbb{N}$ und $E > 0$. Bei der Wahl einer Entwicklungsbasis bieten sich die Lösungen des harmonischen Oszillators an. Da die Reihe meist nach ein paar Gliedern abgebrochen wird, sollten die Abweichungen der exakten Energieeigenwerte gegenüber den Eigenwerten des harmonischen Oszillators klein sein und für $\lambda \rightarrow 0$ in diese übergehen. Aus diesem Grund wird die Reihendarstellung der Eigenenergien des anharmonischen Oszillators die Gestalt $E_n(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} E_n^{(k)} \lambda^k$ haben. Dies impliziert aber insbesondere, dass die Eigenwerte des anharmonischen Oszillators für jedes $n \in \mathbb{N}$ lediglich eine Verschiebung gegenüber den harmonischen Eigenwerten $E_n^{\text{harm}} = E_n^{(0)}$ darstellen. Wäre diese Reihe nun holomorph, d.h. insbesondere analytisch in λ , so würden auch für $\lambda < 0$ noch innerhalb des Konvergenzradius $\forall n \in \mathbb{N}$ Energieeigenwerte existieren. Dies steht aber im Widerspruch zur Tatsache, dass für $\lambda < 0$ das Potential die Gestalt wie in Abbildung 1.3 hat, insbesondere nach unten unbeschränkt ist und daher gar keine normierbaren Eigenfunktionen im Hilbertraum existieren können.

Ein weiteres bekanntes Beispiel einer solchen asymptotischen Reihe ist die Quantenelektrodynamik, mit dessen Hilfe der anomale gyromagnetische Faktor mit einer rela-

²Quelle: [1]

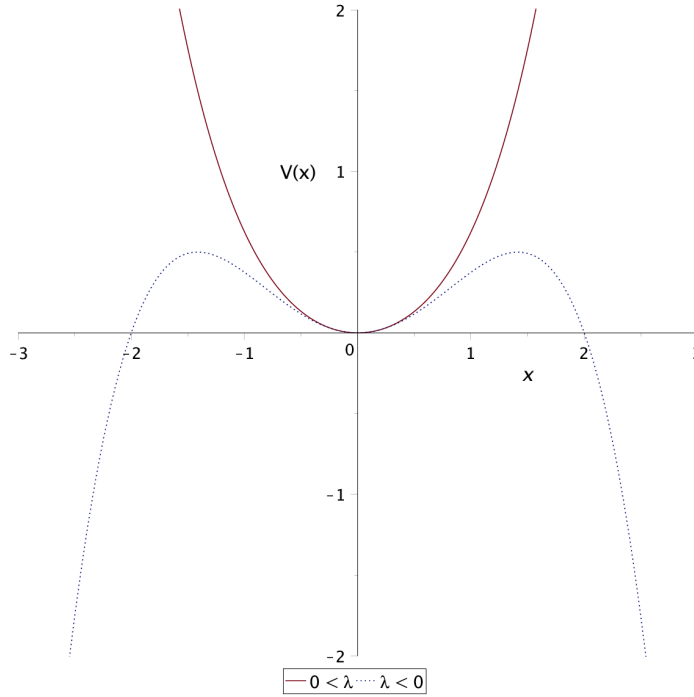


Abbildung 1.3: anharmonischer Oszillator $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda x^4$ für $\lambda > 0$ und $\lambda < 0$

tiven Genauigkeit von $2.19 \cdot 10^{-10}$ berechnet wurde. Dies Beispiel zeigt, dass trotz der Nichtkonvergenz der Störungsreihe, durchaus brauchbare Näherungslösungen erzielt werden können. Wie es um die Güte der Näherung bestimmt ist, hängt von der Kopplungskonstante (hier: λ , QED: Feinstrukturkonstante α) ab. Je kleiner dessen Wert, desto brauchbarer ist die Reihe. Im Allgemeinen gibt es eine ideale Ordnung N bis zu der die Genauigkeit zunimmt. Oberhalb dieser Grenze wird die Näherung wieder schlechter. Im Falle der QED z.B. liegt diese Grenze bei $N = 137$.

Für $\lambda > 0$ und $\omega^2 < 0$ erhält man bei obigem Beispiel ein Doppelmuldenpotential. Die Kopplungskonstante λ variiert sowohl die Tiefe als auch die Breite der Mulde. Dabei wächst der Potentialwall mit abnehmendem λ . In führender Ordnung ist die Energieaufspaltung von der Form $\Delta E \propto e^{-\frac{\text{konst}}{\lambda}}$ und beim Razavy-Potential $\Delta E \propto e^{-(n+1)\text{arccosh}(\frac{1}{g})}$, wobei hier $g = \frac{1}{n+1}$ die Höhe des Walls verändert. Beiden gemein ist, dass sie keine Potenzreihenentwicklung um $\lambda = 0$ bzw. $g = 0$ besitzen. Dies ist bei Doppelmuldenpotentialen allgemein so, was die herkömmliche störungstheoretische Behandlung unterbindet.

Eine genauere Untersuchung offenbart auch die Hintergründe. Für eine beliebige Funktion kann man anhand der Reihendarstellung eine sogenannte Borel-Transformierte definieren. Umgekehrt kann man aber auch die Borel-Transformierte vorgeben und versuchen, so die Borel-Summe (also die ursprüngliche Funktion) zu berechnen. Es kann nun allerdings der Fall eintreten, dass die Borel-Transformierte nun innerhalb eines Konvergenzradius eine gleichmäßig konvergente Reihendarstellung besitzt, während die Borel-Summe und damit die Funktion als Reihendarstellung nicht konvergiert. Ein

einfaches Beispiel ist die asymptotische (also divergente) Reihe

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} n! z^n \quad (1.4)$$

Die Boreltransformierte ist dann gegeben durch

$$\mathcal{BT}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n = \frac{1}{1-z}. \quad (1.5)$$

Die Borelsumme

$$f(z) = \int_0^{\infty} dt \mathcal{BT}(tz) e^{-t}, \quad (1.6)$$

angewandt auf die Reihendarstellung der Boreltransformierten, liefert wieder obige asymptotische Reihe. Die Ursache der Divergenz liegt offenbar an der Tatsache, dass die Reihe nur für $|tz| < 1$ konvergiert. Während im Integral bis unendlich summiert wird, muss stets $|z| < \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{|t|}$ sein. Die Reihe hat daher Konvergenzradius 0. Alternativ kann allerdings die auf ganz $\mathbb{C} \setminus \{1\}$ gültige analytische Fortsetzung der Reihe herangezogen werden. Auf diese Weise liefert die Borelsumme

$$f(z) = \int_0^{\infty} dt \frac{e^{-t}}{1-tz} = \frac{1}{z} e^{-\frac{1}{z}} \text{Ei}\left(\frac{1}{z}\right), \quad (1.7)$$

wobei das Integral als cauchyscher Hauptwert zu verstehen und $\text{Ei}(x)$ die Integraleponentialfunktion ist. Letztendlich haben wir also eine globale Darstellung gefunden, die nicht nur für kleine z Gültigkeit besitzt. In der Störungstheorie kennt man im Allgemeinen nicht einmal die Boreltransformierte. Man entwickelt die zu suchende Funktion lediglich in eine Reihe nach dem Störparameter, die man ohnehin nach ein paar Termen abbricht. In dem Fall des anharmonischen Oszillators mit $\omega^2 > 0$ gelingt dies auch recht zufriedenstellend. Ändert man jedoch das Vorzeichen des harmonischen Terms und lässt $\omega^2 < 0$ zu, dann existieren sogar die Entwicklungsfunktionen nicht mehr, so dass hier die Näherung zusammenbricht. Generell lässt sich festhalten, dass das Verhalten für Doppelmuldenpotentiale (z.B. $e^{-\frac{\text{konst}}{\lambda}}$ beim anharmonischen Oszillator) nicht störungstheoretisch ist. Für solche Fälle bieten dann die Pfadintegral- und WKB-Methode u.U. vielversprechende Näherungsverfahren.

Abschließend sei hier vielleicht noch auf das RAZAVY-Potential selbst eingegangen. Dies gehört zur Klasse der sogenannten quasi-exakt-lösbaren Potentiale. Sie spielen praktisch eine Übergangsrolle zwischen den exakt lösbaren und der großen Klasse nicht analytisch lösbarer Potentiale. Die Bezeichnung *quasi-exakt* kommt daher, dass per Definition eine endliche Anzahl an Wellenfunktionen mit zugehörigen Eigenwerten exakt gefunden werden können. Dabei handelt es sich immer um die energetisch niedrigsten Zustände. Für gewöhnlich tritt im Hamilton-Operator ein Parameter η auf, der für positiv ganzzahlige Werte eine exakte Lösung erlaubt. Bei vielen Lösungsansätzen von

Potentialproblemen spaltet man zuerst das asymptotische Verhalten ab und fordert dann für den Reihenansatz der verbleibenden Differentialgleichung eine Abbruchbedingung. Dies ist z.B. korrekt für Differentialgleichungen vom Typ *hypergeometrisch*. Bei komplizierteren DGLs der Fuchsschen Klasse, d.h. bei zunehmender Zahl von Singularitäten, erhält man allerdings mindestens 3-Term-Rekursionen. Dies verkompliziert das Problem enorm. Das Verhalten des nicht abbrechenden Reihenansatzes für Koeffizienten, die z.B. diese 3-Term-Rekursion erfüllen, ist auf dem Konvergenzradius nicht notwendigerweise divergent, so wie es bei 2-Term-Rekursionen der Fall ist (und was letztendlich der Grund für die Abbruchbedingung dort ist). Betrachten wir hierfür eine solche 3-Term-Rekursion mit Koeffizientenfunktionen f_n , g_n und h_n .

$$f_n c_{n+1} + g_n c_n + h_n c_{n-1} = 0 \quad (c_{-1} = 0 \quad \& \quad c_0 = 1). \quad (1.8)$$

Würde man nun für solche Reihenansätze dennoch einen Abbruch nach dem N -ten Term fordern, so ergäbe sich zunächst ein Gleichungssystem aus $N + 1$ Gleichungen mit $N + 1$ Koeffizienten. Dies kann man in Matrixform mit einer Matrix A schreiben und nichttriviale Lösbarkeit würde dann $\text{Det } A = 0$ nach sich ziehen. Dies ist ein Polynom vom Grade $N + 1$ in dem Eigenparameter ϵ . Für den Abbruch muss allerdings zusätzlich noch $h_{N+1} c_N = 0$ erfüllt sein. In den meisten Fällen widerspricht das der ersten Bedingung $\text{Det } A = 0$. Nur wenn beide Bedingungen erfüllt sind erhält man also ein Polynom aus dem Reihenansatz. Ist es nun möglich den Parameter η so zu wählen, dass diese Bedingung automatisch erfüllt ist, dann genügen die Lösungen des charakteristischen Polynoms in ϵ . Man erhält also eine endliche Anzahl an Lösungen für den Eigenparameter ϵ und damit auch für die Wellenfunktionen.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Energieaufspaltung in Doppelmuldenpotentialen

2.1.1 Die quantenmechanische Übergangsamplitude

Im Falle von nicht explizit von der Zeit abhängigen Hamiltonoperatoren ist die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Zustands $|\psi(t)\rangle$ durch

$$|\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle \quad (2.1)$$

gegeben. Multipliziert man die Gleichung von links mit einem Bra $\langle x|$, so erhält man den Zustand in der Ortsdarstellung

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \langle x | \psi(t) \rangle = \int dx' \langle x | \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) | x' \rangle \langle x' | \psi(t_0) \rangle \\ &= \int dx' \mathcal{K}(x, t; x', t_0) \psi(x', t_0). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Die Funktion $\mathcal{K}(x, t; x', t_0)$ bezeichnet man als Propagator oder auch quantenmechanische Übergangsamplitude

$$\mathcal{K}(x, t; x', t_0) = \langle x | \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) | x' \rangle = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t-t_0)} | x' \rangle. \quad (2.3)$$

Eine elegante Methode um $\mathcal{K}(x, t; x', t_0)$ zu berechnen liefert das Feynman-Pfadintegral,

$$\mathcal{K}(x, t; x', t_0) = \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[x]} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi \hbar i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int \prod_{n=1}^{N-1} dx_n e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[x]} \quad (2.4)$$

wobei

$$\mathcal{S}[x] = \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} \right)^2 - V(x_n) \right] \quad \text{mit} \quad (x_0 = x', x_N = x) \quad (2.5)$$

und \mathcal{D} symbolisch für das Integrationsmaß steht. [3]

$\epsilon = \frac{t-t_0}{N}$ ist hier eine zeitgestückelte Intervaleinheit. Zur praktischen Anwendung ist es vorteilhaft, (2.4) vorerst für imaginäre Zeiten zu betrachten, d.h. $t \rightarrow -i\tau$ mit τ reell, um anschließend durch analytische Fortsetzung von τ in die komplexe Ebene zurück zu reellen Zeiten zu gelangen. Diese Vorgehensweise - auch bekannt unter Wick-Rotation

[3] - hat den entscheidenden Vorteil, dass der Integrand für $\tau \rightarrow \infty$ wohldefiniert ist. Ist eine analytische Fortsetzung zu komplexen Argumenten τ (insbesondere $\tau \rightarrow it$) möglich, so ist auch das ursprüngliche Integral wohldefiniert. Im weiteren rechnen wir daher ausschließlich im Wick-rotierten Bild und nach einer Rückbenennung $\tau \rightarrow t$ schreibt sich die Übergangsamplitude

$$\mathcal{H}_E(x, t; x', t_0) = \langle x | e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | x' \rangle = \int \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_E[x]}, \quad (2.6)$$

wobei der Index E lediglich die euklidische Variante andeutet. Bis auf ein Vorzeichen stimmt \mathcal{S} mit \mathcal{S}_E überein

$$\mathcal{S}_E[x] = \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{\epsilon} \right)^2 + V(x_n) \right] \quad \text{mit} \quad (x_0 = x', x_N = x). \quad (2.7)$$

Lässt man in (2.7) $N \rightarrow \infty$ gehen, so schreibt sich die Riemann-Summe nach Übergang zum Integral in der Form

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_E[x] &= \int_{t_0}^t dt' \left[\frac{1}{2} m \dot{x}(t')^2 + V(x(t')) \right] \\ &= \int_{t_0}^t dt' \mathcal{L}_E(x(t'), \dot{x}(t')). \end{aligned} \quad (2.8)$$

An dieser Stelle ist der Zusammenhang zur Wirkung evident.

2.1.2 Sattelpunktmethode

Offensichtlich lässt sich das Integral (2.6) zunächst nicht für beliebige $V(x)$ in geschlossener Form lösen. Exakt lösbar ist dieses z.B. für Potentiale der Form $V(x) \propto x^2$. Den wesentlichen Beitrag liefert jedoch jenes $x(t)$ für das $\mathcal{S}_E[x]$ minimal wird. Pfade, die von diesem $x(t)$ abweichen, werden wegen der Exponentialfunktion mehr oder weniger stark unterdrückt. Es würde sich also anbieten, den Pfad $x(t)$ um das Minimum zu entwickeln. Bekanntermaßen trifft dies nun aber genau auf den klassischen Pfad $x_{\text{kl}}(t)$ zu. Dieser ist nach dem Hamiltonschen Prinzip gerade dadurch definiert, dass er die Wirkung minimiert. Eine Entwicklung um x_{kl} erscheint daher erfolgsversprechend. Bis zum quadratischen Glied schreibt sich (2.8) mittels Variationsableitung als

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_E[x] &\approx \mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}] + \int dt_1 \left. \frac{\delta \mathcal{S}_E[x]}{\delta x(t_1)} \right|_{x=x_{\text{kl}}} y(t_1) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int \int dt_1 dt_2 y(t_1) \left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}_E[x]}{\delta x(t_1) \delta x(t_2)} \right|_{x=x_{\text{kl}}} y(t_2) \\ &= \mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}] + \frac{1}{2} \int dt y(t) \left(-m \frac{\partial^2}{\partial t^2} + V''(x_{\text{kl}}(t)) \right) y(t). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Dabei wurde der Variationspfad $y(t) = x(t) - x_{\text{kl}}(t)$ eingeführt und ausgenutzt, dass der erste Term verschwindet. Wählt man für x_{kl} bereits die Randbedingungen $x_{\text{kl}}(t_0) = x'$ sowie $x_{\text{kl}}(t) = x$, so muss $y(t_0) = y(t) = 0$ gelten. Im letzten Satz bedeutet t wie im ersten Abschnitt die Intervallendzeit. Bereits hier soll darauf aufmerksam gemacht werden, dass der Operator in (2.9) folgende Eigenschaft hat

$$\begin{aligned} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial t^2} + V''(x_{\text{kl}}(t)) \right) \dot{x}_{\text{kl}}(t) &= \left(-m \frac{\partial^3}{\partial t^3} x_{\text{kl}}(t) + \frac{\partial x_{\text{kl}}}{\partial t} V''(x_{\text{kl}}(t)) \right) \\ &= \frac{d}{dt} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial t^2} x_{\text{kl}}(t) + V'(x_{\text{kl}}(t)) \right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Letztere Gleichheit gilt, weil $x_{\text{kl}}(t)$ die (euklidische) Bewegungsgleichung erfüllt. Damit ist $\dot{x}_{\text{kl}}(t)$ eine (nicht normierte) Eigenfunktion zum Eigenwert 0. $x_{\text{kl}}(t)$ wird auch als Kink-Lösung bezeichnet.

Da bei der Integration über alle möglichen Pfade integriert wird und die Transformation linear ist, kann $\mathcal{D}x$ einfach durch $\mathcal{D}y$ ersetzt werden. Im Folgenden wird, sofern nicht anders angegeben, der Variationspfad $y(t)$ wieder mit $x(t)$ bezeichnet.

Eine Tücke sollte hier vielleicht noch erwähnt werden. Die obige gaußsche Näherung klappt nur dann, wenn das Minimum, um das entwickelt wird, eindeutig ist. Im vorliegenden Fall ist aber neben $x_{\text{kl}}(t)$ auch $x_{\text{kl}}(t - t_0)$ für beliebige t_0 eine Lösung der Bewegungsgleichung und damit ein Minimum. Dies kann man vergleichen mit einem Potential, dessen Minimum z.B. radialsymmetrisch um den Ursprung liegt (siehe Abbildung 2.1). Am Beispiel der Funktion $f(x, y) = (x^2 + y^2 - a^2)^2$ soll einmal illustriert werden, auf welche Problematiken man bei solch symmetrischen Potentialen stößt. Betrachten wir also das folgende Integral

$$I = \int dx dy e^{-f(x,y)} \quad (2.11)$$

im Rahmen der Sattelpunktsnäherung. Die Extrema von $f(x, y)$ liegen bei $\vec{r} = 0$ und $\vec{r}_0 = a \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$, wobei θ beliebig ist. Letzteres Tupel entspricht dem Minimum. Bis zur quadratischen Ordnung gilt dann

$$\begin{aligned} f(x, y) &\approx \frac{1}{2} \begin{pmatrix} x - x_0 & y - y_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 8a^2 \cos^2 \theta & 8a^2 \sin \theta \cos \theta \\ 8a^2 \sin \theta \cos \theta & 8a^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{pmatrix} \\ &\equiv \frac{1}{2} (\vec{r} - \vec{r}_0)^T A (\vec{r} - \vec{r}_0). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Die Matrix A ist symmetrisch und lässt sich diagonalisieren. Die Eigenwerte sind $\lambda_1 = 8a^2$ und $\lambda_2 = 0$. Die Eigenvektoren $\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$ und $\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}$ bilden die

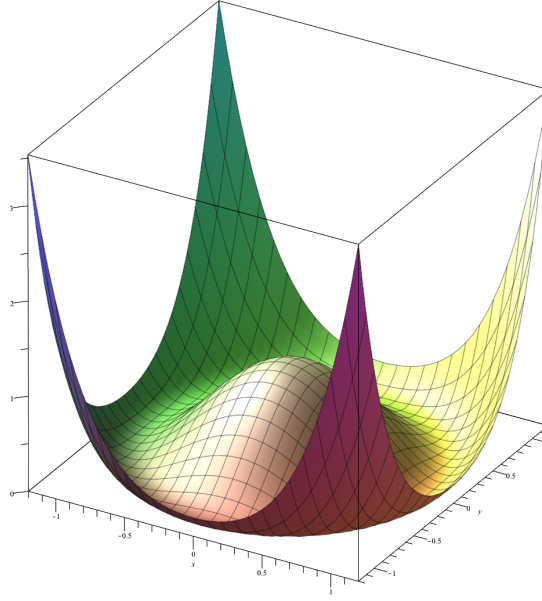


Abbildung 2.1: ein radialsymmetrisches Potential verursacht bei der Sattelpunktsnäherung immer Divergenzen

Transformationsmatrix $U = \begin{pmatrix} \vec{v}_1 & \vec{v}_2 \end{pmatrix}$. Damit schreibt sich (2.12) als

$$\begin{aligned}
 2 f(x, y) &= (\vec{r} - \vec{r}_0)^T A (\vec{r} - \vec{r}_0) \\
 &= (\vec{r} - \vec{r}_0)^T U A^{\text{diag}} U^T (\vec{r} - \vec{r}_0) \\
 &= (U^T (\vec{r} - \vec{r}_0))^T A^{\text{diag}} (U^T (\vec{r} - \vec{r}_0)) \\
 &= (\vec{\eta} - \vec{\eta}_0)^T A^{\text{diag}} (\vec{\eta} - \vec{\eta}_0) \\
 &= \lambda_1 (\eta_1 - \eta_{1,0})^2 + \lambda_2 (\eta_2 - \eta_{2,0})^2
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

mit $\vec{\eta} = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} = U^T \vec{r} = \begin{pmatrix} \vec{v}_1^T \cdot \vec{r} \\ \vec{v}_2^T \cdot \vec{r} \end{pmatrix}$. (2.11) wird schließlich wegen $|\det U| = 1$ zu

$$I \approx \int d\eta_1 d\eta_2 e^{-\frac{1}{2}(\lambda_1 (\eta_1 - \eta_{1,0})^2 + \lambda_2 (\eta_2 - \eta_{2,0})^2)}. \tag{2.14}$$

Offensichtlich ist in (2.14) wegen $\lambda_2 = 0$ die Integration über η_2 divergent. Dies ist die Folge der Nichtexistenz eines ausgezeichneten Minimums. Eine solche Symmetrie führt immer zu Eigenwerten 0 (sogenannte Nullmoden), die wiederum verantwortlich für die Divergenz des Integrals sind. Die obige Hessematrix entspricht dabei unserem Operator in (2.9). Wie kann nun anhand dieser Darstellung die η_2 -Integration derart transformiert werden, dass diese Symmetrie berücksichtigt wird? Um dies zu sehen, erkennen wir, dass bei dem ursprünglichen Problem eine Variablentransformation auf Polarkoordinaten (r, ϕ) lediglich eine Entwicklung der r -Variable

um das Minimum r_0 nach sich ziehen würde. Die ϕ -Variable bleibt von dieser Sattelpunktsnäherung somit unberührt. Mit diesem Ziel im Ausblick schreibt sich zunächst $\eta_2 = -x \sin \theta + y \cos \theta = r \sin(\phi - \theta)$. Analog ist $\eta_1 = x \cos \theta + y \sin \theta = r \cos(\phi - \theta)$. Die transformierten Variablen haben also formal dieselbe Darstellung in Polarkoordinaten wie die üblichen kartesischen Koordinaten (x,y), lediglich mit einer anderen Phase. Dies ist nicht verwunderlich, ist das neue Koordinatensystem gegenüber dem Alten ja nur um den Winkel θ gedreht. Fixiert man die Freiheit in θ nun derart, dass stets $\theta = \phi$ gilt, so verschwindet die divergente Variable η_2 . Dennoch kann das Differential $d\eta_2$ definiert werden und mittels der Jacobiante $\left| \frac{\partial \eta_2}{\partial \theta} \right|_{\theta=\phi} = r$ haben wir $d\eta_2 = r d\theta$. Für η_1 haben wir entsprechend $\left| \frac{\partial \eta_1}{\partial r} \right|_{\theta=\phi} = 1 \rightarrow d\eta_1 = dr$. Ohne die vollständige Jacobiante der Transformation hinzuschreiben, ist durch Transformation der problematischen Koordiante auf die Variable θ und geschickte Wahl von $\theta = \phi$ bei der Auswertung der Jacobiante der Zusammenhang zu Polarkoordinaten nun evident.

$$I \approx \int r dr d\theta e^{-\frac{1}{2}\lambda_1 (r-a)^2} \quad (2.15)$$

Nach der Hauptachsentransformation entspricht die η_1 -Variable anschaulich also der Radialkomponente. Mit der Wahl der Situation angepasster Koordinaten hätte man dieses Problem also auch direkt umgehen können. In komplizierteren Fällen ist das aber nicht immer möglich. Man müsste also auch im $(N - 1)$ - dimensionalen allgemeinen Fall durch geschickte Transformation der problematischen Koordinate das Integral in die Form bringen, die die korrekte Transformation des kompletten Integrationsmaßes liefern würde. Im Folgenden sollte dies im Falle des uns vorliegenden Funktionalintegrals deutlicher werden.

2.1.3 Die Grundzustandsenergieaufspaltung

Gleichung (2.6) kann benutzt werden, um die Grundzustandsenergie näherungsweise zu bestimmen. Fügt man in das Übergangsmatrixelement eine vollständige Eins ein, so erhält man die spektrale Zerlegung von \mathcal{K}_E .

$$\mathcal{K}_E(x, t; x', t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n^*(x') e^{-\frac{1}{\hbar} E_n (t-t_0)} \quad (2.16)$$

Setzt man hier $t_0 = -\frac{T}{2}$ und $t = +\frac{T}{2}$ und lässt T gegen unendlich gehen, so ist wegen $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$ der $n = 0$ Term der Dominierende. Falls jedoch die beiden niedrigsten Energien sehr nahe beieinander liegen, wie es bei typischen Doppelmuldenpotentialen der Fall ist, so kann der erste Term nicht mehr ohne Weiteres vernachlässigt werden. Für \mathcal{K}_E erhält man daher in guter Näherung

$$\mathcal{K}_E \left(x, \frac{T}{2}; x', -\frac{T}{2} \right) \approx \psi_0(x) \psi_0^*(x') e^{-\frac{1}{\hbar} E_0 T} + \psi_1(x) \psi_1^*(x') e^{-\frac{1}{\hbar} E_1 T} \quad (2.17)$$

mit T groß.

Ist die linke Seite als Funktion von T bekannt, kann folglich eine Aussage über die

Energien getroffen werden. In [4] findet man z.B. einen Ausdruck für \mathcal{K}_E in semiklassischer (quadratischer) Näherung. Da wir an einer Grundzustandsenergieaufspaltung interessiert sind, sind die führenden Beiträge in (2.17) dann am größten, wenn ψ_0 bzw. ψ_1 maximal werden. Dies ist offenbar der Fall, wenn man x und x' in das Potentialminimum legt, da dort die Wellenfunktionen am stärksten lokalisiert sind. Beim Doppelmuldenpotential liegen die Minima o.B.d.A. symmetrisch um den Ursprung und die Positionen bezeichnen wir mit $\pm a$. Nach einer willkürlichen Verschiebung der Skala kann man $V(\pm a) = 0$ voraussetzen. Die benötigten klassischen Lösungen $x_{\text{kl}}(t)$ können dann aus dem euklidischen Energiesatz $E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x) = 0$ gewonnen werden. Sie erfüllen automatisch die Randbedingungen $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} |x_{\text{kl}}(t)| = a$. In Kapitel 2.1.6 werden wir eine solche Lösung angeben. Mit dieser Wahl hat \mathcal{K}_E folgende Gestalt:

$$\mathcal{K}_E \left(\pm a, \frac{T}{2}; a, -\frac{T}{2} \right) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \begin{cases} e^{-(\frac{\omega}{2}-R)T} + e^{-(\frac{\omega}{2}+R)T} & (a \rightarrow a) \\ e^{-(\frac{\omega}{2}-R)T} - e^{-(\frac{\omega}{2}+R)T} & (a \rightarrow -a) \end{cases} \quad (2.18)$$

Der hier mit dem Buchstaben R (in Anlehnung an eine Rate) bezeichnete Parameter ist mit dem gesuchten Vorfaktor \mathcal{K} bis auf einen Gamowfaktor identisch.

$$\begin{aligned} R &= \sqrt{\frac{\mathcal{A}_{\text{kl}}}{2\pi\hbar} \frac{\text{Det}(-m\frac{\partial^2}{\partial t^2} + m\omega^2)}{\text{Det}'(-m\frac{\partial^2}{\partial t^2} + V''(x_{\text{kl}}))}} e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{\text{kl}}]} \\ &= \mathcal{K} e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{\text{kl}}]} \end{aligned} \quad (2.19)$$

Um (2.18) zu erhalten, benutzt man den Kontinuumslimites (2.8) und macht von der soeben eingeführten Sattelpunktsnäherung Gebrauch.

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_E \left(\pm a, \frac{T}{2}; a, -\frac{T}{2} \right) &\approx e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{\text{kl}}]} \\ &\times \int \mathcal{D}x \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt x(t) \left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + m^{-1}V''(t) \right) x(t) \right] \end{aligned} \quad (2.20)$$

Der hintere Faktor wird dann auch als Fluktuationsfaktor $\mathcal{F}(T)$ bezeichnet. Wie bereits erwähnt, muss der Variationspfad $x(t)$ die Randbedingungen $x(\frac{T}{2}) = x(-\frac{T}{2}) = 0$ erfüllen. An dieser Stelle bietet sich an, die Variationspfade nach Eigenfunktionen des Operators $-\partial_t^2 + m^{-1}V''(t)$ zu entwickeln

$$x(t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n y_n(t) \quad (2.21)$$

und anschließend eine Transformation der Integrationsvariablen $\mathcal{D}x \rightarrow \mathcal{D}c$ durchzuführen.

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_E &= e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{\text{kl}}]} \int \mathcal{N} \prod_{n=0}^{\infty} dc_n \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n c_n^2 \right] \\ &= e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{\text{kl}}]} \mathcal{N} \sqrt{\prod_{n=1}^{\infty} \frac{2\pi\hbar}{m\lambda_n}} \int dc_0 \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \lambda_0 c_0^2 \right] \end{aligned} \quad (2.22)$$

Dabei wurde innerhalb des Skalarprodukts die Orthogonalität der Eigenfunktionen ausgenutzt. \mathcal{N} ist eine nicht weiter zu spezifizierende Konstante, die sowohl die Faktoren, die in $\mathcal{D}x$ (siehe (2.4)) stecken, als auch die Jacobi-Determinante der Transformation beinhaltet. Da die Transformation aber linear ist, muss die Jacobianante konstant sein. Man kann nun einen kleinen Trick anwenden um die Konstante \mathcal{N} zu eliminieren, indem man die Eigenwertprodukte eines schon gelösten Problems ausklammert. Dabei greifen wir auf das Ergebnis des Fluktuationsfaktors $\mathcal{F}_0(T)$ für den harmonischen Oszillator in (2.84) mit (2.86) vor

$$\mathcal{F}_0(T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh \omega T}} \approx \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \quad (2.23)$$

wobei für große T der Sinus-Hyperbolicus durch die Exponentialfunktion ersetzt wurde.

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_E &= e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}]} \underbrace{\mathcal{N} \sqrt{\prod_{n=0}^{\infty} \frac{2\pi\hbar}{m\lambda_n^0}}}_{\mathcal{F}_0(T)} \sqrt{\frac{\prod_{n=1}^{\infty} \frac{2\pi\hbar}{m\lambda_n}}{\prod_{n=0}^{\infty} \frac{2\pi\hbar}{m\lambda_n^0}}} \int dc_0 \\ &= e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}]} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \sqrt{\frac{\prod_{n=0}^{\infty} \lambda_n^0}{\prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n}} \int \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} dc_0 \\ &= e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}]} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \sqrt{\frac{\text{Det}(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega^2)}{\text{Det}'(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + m^{-1}V''(x_{\text{kl}}))}} \int \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} dc_0 \quad (2.24) \end{aligned}$$

Das dabei auftretende ω hat den Wert $m\omega^2 = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} V''(x_{\text{kl}}(t)) = V''(\pm a)$.

Auch wurde hier die c_0 Integration nicht ausgeführt, da wegen $\lambda_0 = 0$ das zugehörige Integral keine Dämpfung erfährt und damit formal divergiert. Dies ist übrigens die Situation, der wir im vorigen Abschnitt begegnet sind. Dort war es die Rotations-symmetrie des Minimums von $f(x, y)$, während es hier die Zeit-Translationssymmetrie des Funktional $\mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}]$ ist, welches ja das Minimum von $\mathcal{S}_E[x]$ darstellt. Zur Erinnerung, dass die Nullmode im Eigenwertprodukt ausgelassen wird, kennzeichnen wir die Determinante mit einem Strich.

2.1.4 Die Nullmodentransformation

Im letzten Kapitel mussten wir bei der Auswertung des Funktionalintegrals stoppen, da die Integration über die c_0 -Mode keine Dämpfung erfuhr und der Ausdruck somit divergierte. Wie aber bereits im Abschnitt „Sattelpunktmethode“ offenbart, ist diese Divergenz Ausdruck der naiven Entwicklung der Funktion im Exponenten um ihr Minimum, wo dieses doch gar nicht eindeutig bestimmt ist. Eine solche Symmetrie führt auch hier zum Eigenwert 0 mit der normierbaren Eigenfunktion $\dot{x}_{\text{kl}}(t)$. Die Ursache dieser Symmetrie liegt in der Translationsinvarianz der klassischen Bewegungsgleichung, denn für jedes $t_c \in \mathcal{I}$ minimiert $x_{\text{kl}}(t+t_c)$ das Funktional, wobei $\mathcal{I} \equiv [-T/2, T/2]$ ist. Eine geeignete Koordinatentransformation könnte dieses Problem eliminieren, doch stellt

sich die Frage wie eine solche Transformation in unserem Fall auszusehen hat. Stattdessen transformiert man pro Symmetriefreiheitsgrad eine Variable derart, so dass das korrespondierende Integral mit dem korrekt angepasster Koordinaten übereinstimmt. Ein Ansatz die c_0 -Integration zu ersetzen ist, ausgehend von der Entwicklung des Pfades um die klassische Lösung

$$x(t) = x_{\text{kl}}(t) + \sum_{n=0}^{\infty} c_n y_n(t), \quad (2.25)$$

den Entwicklungsparameter c_0 gegen t_c zu tauschen. Um die Analogie noch einmal aufzugreifen, t_c korrespondiert zum Parameter θ aus dem Abschnitt Sattelpunktsmethode. Die Entwicklung des Variationspfades nach den Eigenfunktionen entspricht der Linearkombination der Eigenvektoren \vec{v}_1 und \vec{v}_2 mit den Koeffizienten η_1 und η_2 für den Variationspfad $\vec{r} - \vec{r}_0$. Bei dieser Wahl eines ausgezeichneten Minimums, wird das Verhalten der Funktion im Exponenten der Exponentialfunktion in Richtung \vec{v}_2 jedoch asymptotisch nicht hinreichend gut beschrieben. Um dieses Fehlverhalten wieder richtigzustellen, wurde die Variable η_2 auf θ transformiert. Die andere Koordinate η_1 , die das Verhalten in radialer Richtung beschreibt, wurde dabei beibehalten. Im Unterschied zu vorher wird also nun zu jedem θ , d.h. an jeder Stelle des Minimums, das Verhalten in radialer Richtung ausgewertet. Gleiches soll nun auch beim Pfadintegral geschehen. Zu jedem t_c wird das Verhalten orthogonal zur Nullmodeneigenfunktion $y_0(t)$ ausgewertet. Wie im Modell zuvor auch die Eigenvektoren von der SymmetrievARIABLE θ abhingen, hängen nun auch die Eigenfunktionen $y_n(t + t_c)$ von t_c ab. Dies rechtfertigt die Ersetzung $c_0 \rightarrow t_c$

$$x(t) = x_{\text{kl}}(t + t_c) + \sum_{n=1}^{\infty} c_n y_n(t + t_c). \quad (2.26)$$

Da auch t_c jeden beliebigen Wert annehmen kann, berücksichtigt diese Reihe ebenso sämtliche möglichen Pfade. Der Fall $t_c = 0$ entspricht offensichtlich der Situation $c_0 = 0$. Es bietet sich also potentiell an eine Störungsreihe um $t_c = 0$ zu bilden. Zunächst betrachtet man den Ausdruck

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt_c \delta(c_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_c \left| \frac{\partial c_0}{\partial t_c} \right| \delta(c_0) = 1. \quad (2.27)$$

Da c_0 aus (2.25) durch Multiplikation mit $y_0(t)$ und anschließender Ausintegration gewonnen werden kann,

$$c_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dt x(t) y_0(t) \quad (2.28)$$

ist durch Einsetzen von (2.26) in (2.28) ein Zusammenhang zwischen c_0 und t_c gegeben. Die Entwicklung in t_c bis zum linearen Term ergibt dann

$$\begin{aligned} c_0 &= \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-\frac{1}{2}} t_c \left[\int_{-\infty}^{\infty} dt \dot{x}_{\text{kl}}^2 + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_{-\infty}^{\infty} dt \dot{x}_{\text{kl}} \dot{y}_n \right] + \mathcal{O}(t_c^2) \\ &= \mathcal{A}_{\text{kl}}^{\frac{1}{2}} t_c \left[1 + \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} c_n r_n \right] + \mathcal{O}(t_c^2) \end{aligned} \quad (2.29)$$

mit den Skalarprodukten

$$r_n \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \dot{x}_{\text{kl}} \dot{y}_n \quad (2.30)$$

und dem Normierungsintegral

$$\mathcal{A}_{\text{kl}} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \dot{x}_{\text{kl}}^2. \quad (2.31)$$

Setzt man dies in (2.27) ein, so gelangt man schließlich zur Jacobideterminante

$$\left| \frac{\partial c_0}{\partial t_c} \right| = \sqrt{\mathcal{A}_{\text{kl}}} \left[1 + \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} c_n r_n \right], \quad (2.32)$$

Die in c_n linearen Terme verschwinden bei der Ausintegration in (2.22) in der hier betrachteten quadratischen Näherung, da der gesamte Ausdruck ungerade in c_n ist. Die c_0 -Mode in (2.24) liefert somit den Beitrag

$$\int \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} dc_0 = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} \mathcal{A}_{\text{kl}} dt_c = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} \mathcal{A}_{\text{kl}} T. \quad (2.33)$$

Als Eselsbrücke kann man sich daher merken

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda_0}} \longrightarrow \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} \mathcal{A}_{\text{kl}} T. \quad (2.34)$$

Für endliche T ist auch λ_0 kein Nulleigenwert. Erst im Limes $T \rightarrow \infty$ macht sich damit auch die Divergenz in λ_0 bemerkbar.

Für eine mehr ins Detail gehende Behandlung siehe [4].

2.1.5 Multi-Instantonen

Das Ergebnis (2.24) mit (2.33) gibt allerdings nur die führende Ordnung einer zugrundeliegenden Reihe an. Für eine größere Genauigkeit müssen weitere semiklassische Beiträge berücksichtigt werden. Neben einem einzigen Übergang können auch sogenannte Multi-Instanton-Beiträge auftreten. Anschaulich kann man sich dies wie folgt

klar machen. Die klassische Lösung zur Energie $E = 0$ geht für $t \rightarrow \pm\infty$ gegen $+a$ oder $-a$. Die zeitliche Ausdehnung eines einzelnen Kinks ist für kleine s aber lediglich von der Größenordnung $\frac{1}{\omega} \ln\left(\frac{2}{s}\right)$. In typischen physikalischen Anwendungen ist s zwar relativ klein, aber nicht 0, da sonst das Potential konstant wäre und damit als Argument des Logarithmus wesentlich kleiner als die gesamte Intervallbreite T . In dem betrachteten Limes $T \rightarrow \infty$ wird es also möglich sein, eine Vielzahl solcher Kinks und Antikinks auf der gesamten Zeitachse unterzubringen. Eine ungefähre Lösung eines solchen Multikinks kann durch das Aneinanderflicken mehrerer Einfachkinks realisiert werden, ohne von der exakten Lösung eines Multikinks zu stark abzuweichen, solange die einzelnen Kinks hinreichend weit voneinander entfernt sind. Für den Abstand der Zentren zweier benachbarter Instantonen sollte daher $\Delta t_c \gg \frac{\ln(\frac{2}{s})}{\omega}$ gelten. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von einem verdünnten Instantongas. Die Abweichung von der exakten Lösung ist dann exponentiell klein, so dass diese Näherung annehmbar erscheint. Im folgenden sollen diese sogenannten Multi-Instanton-Beiträge Berücksichtigung finden. Im 1-Instanton-Beitrag aus (2.24)

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_E^1 &= e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}]} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \sqrt{\frac{\text{Det}\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega^2\right)}{\text{Det}'\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + m^{-1}V''(t)\right)}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} \mathcal{A}_{\text{kl}} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt_c \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} RT \end{aligned} \quad (2.35)$$

wurde zunächst der in Frage stehende Faktor wie in (2.19) mit R abgekürzt. Auch wurde zur Vereinfachung bei späteren Rechnungen (schon bei der Herleitung) ein Faktor m herausgezogen. Den Instantonbeitrag eines Teilchens, welches von a nach $-a$ und zurück tunnelt erhält man nun durch Einsetzen einer entsprechenden Kink-Lösung. Für die oben angesprochene Approximation erweist sich dabei das rasche Annähern von x_{kl} an $\pm a$ als sehr nützlich. Zur Illustration betrachten wir den 1-Kink $x_{\text{kl}} : [-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}] \rightarrow [-a, a]$. Das Intervall $[-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}]$ wird nun in 3 Abschnitte unterteilt. Auf $[-\frac{T}{2}, -\frac{T}{4}]$ und $[\frac{T}{4}, \frac{T}{2}]$ ist x_{kl} ziemlich genau um $\pm a$ lokalisiert, so dass das Teilchen auf diesem Zeitintervall das harmonische Potential $\frac{1}{2}m\omega^2(x \pm a)^2$ spürt. Lediglich auf dem Intervall $[-\frac{T}{4}, \frac{T}{4}]$ erfährt x_{kl} eine merkliche Änderung, die aus der komplizierteren Struktur des Potentials folgt. Die gesamte klassische Wirkung wird nun auf die 3 Bereiche unterteilt. Im Ersten und Dritten gestatten wir den Koordinaten eine gewisse Freiheit, solange diese in der unmittelbaren Umgebung des Minimums liegen. Dort ersetzen wir die Wirkung durch die des harmonischen Oszillators eines Teilchens, welches sich von x_{-a} nach $-a$ bzw. a nach x_a bewegt

$$\mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}] = \mathcal{S}_E^{\text{HO}}[x_{-a}] + \mathcal{S}_E^{\text{Kink}}[x_{\text{kl}}] + \mathcal{S}_E^{\text{HO}}[x_a] . \quad (2.36)$$

Der mittlere Term ist für große T auch weiterhin unter Vernachlässigung eines exponentiell kleinen Fehlers die klassische Wirkung des 1-Instantons. Die anderen beiden

Terme haben für ein Teilchen, das sich von $\tilde{x}_{\pm a}$ nach $x_{\pm a}$ bewegt, die Form¹

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_E^{\text{HO}}[x_{\pm a}] &= \frac{m\omega}{2 \sinh\left(\omega \frac{T}{4}\right)} \left\{ [(x_{\pm a} \mp a)^2 + (\tilde{x}_{\pm a} \mp a)^2] \cosh\left(\omega \frac{T}{4}\right) \right. \\ &\quad \left. - 2(x_{\pm a} \mp a)(\tilde{x}_{\pm a} \mp a) \right\} \\ &\approx \frac{m\omega}{2} [(x_{\pm a} \mp a)^2 + (\tilde{x}_{\pm a} \mp a)^2] .\end{aligned}\quad (2.37)$$

Da entweder der Anfangspunkt $\tilde{x}_{\pm a}$ oder der Endpunkt $x_{\pm a}$ gleich $\pm a$ ist, vereinfacht sich (2.37) zu

$$\mathcal{S}_E^{\text{HO}}[x_{\pm a}] \approx \frac{m\omega}{2} (x_{\pm a} \mp a)^2 . \quad (2.38)$$

Für den 2-Instanton-Beitrag fügt man nun zum Zeitpunkt t_{c_2} an dem $x_{\text{kl}} \approx -a$ ist eine vollständige Orts-Eins in das Matrixelement ein und betrachtet nur die wesentlichen Beiträge $x \approx -a$. In dieser Näherung lassen sich die Matrixelemente im Integranden mit obiger Vereinfachung berechnen und anschließend ausintegrieren.

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_E^2\left(a, \frac{T}{2}; a, -\frac{T}{2}\right) &= \int dx_{-a} \langle a | e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}\left(\frac{T}{2}-t_{c_2}\right)} | x_{-a} \rangle \langle x_{-a} | e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}\left(t_{c_2}+\frac{T}{2}\right)} | a \rangle \\ &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\right)^2 \underbrace{e^{-\frac{\omega}{2}\left(\frac{T}{2}-t_{c_2}\right)} e^{-\frac{\omega}{2}\left(t_{c_2}+\frac{T}{2}\right)}}_{e^{-\frac{\omega T}{2}}} R^2 \int dx_{-a} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}(x_{-a}+a)^2} \\ &\quad \times \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt_{c_2} \int_{-\frac{T}{2}}^{t_{c_2}} dt_{c_1} \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} R^2 \frac{T^2}{2!}\end{aligned}\quad (2.39)$$

Der Exponent ist hierbei lediglich als Index für die Anzahl der Übergänge zu verstehen. Abbildung 2.2 zeigt eine solche Instantonkonfiguration mit den Kink-Lösungen (2.48). Entsprechend (2.39) kann ein Multi-Instantonübergang der Ordnung n angegeben werden.

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_E^n\left(\pm a, \frac{T}{2}; a, -\frac{T}{2}\right) &= \int dx_1 \dots dx_{n-1} \langle \pm a | e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}\left(\frac{T}{2}-t_{c_n}\right)} | x_{n-1} \rangle \\ &\quad \times \langle x_{n-1} | e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}\left(t_{c_n}-t_{c_{n-1}}\right)} | x_{n-2} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}\left(t_{c_2}+\frac{T}{2}\right)} | a \rangle \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} R^n \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt_{c_n} \int_{-\frac{T}{2}}^{t_{c_n}} dt_{c_{n-1}} \dots \int_{-\frac{T}{2}}^{t_{c_2}} dt_{c_1} \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} R^n \frac{T^n}{n!}\end{aligned}\quad (2.40)$$

Ein solcher ist in 2.3 visualisiert. In (2.40) wurde schon zwischen den Fällen $a \rightarrow a$

¹Hagen Kleinert - Pfadintegrale / Kap. 17.6 Formel (17.174)

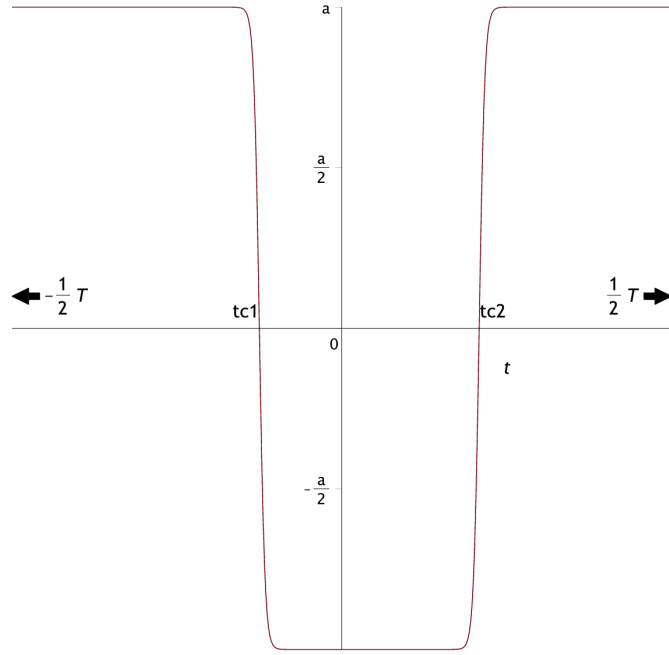


Abbildung 2.2: Doppel-Instantonkonfiguration mit der Randbedingung $x' = a$ und $x = a$ (Antikink-Kink-Kombination)

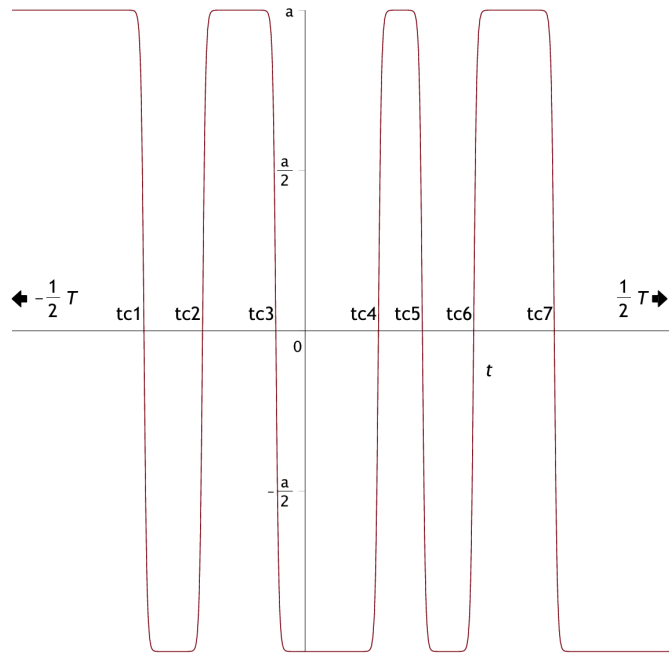


Abbildung 2.3: ungerade Multi-Instantonkonfiguration mit den Randbedingungen $x' = a$ und $x = -a$

und $a \rightarrow -a$ unterschieden. Offenbar ist Ersterer nur für eine gerade und Letzterer nur für eine ungerade Anzahl an Übergängen möglich. Summiert man nun sämtliche Beiträge unter Berücksichtigung dieser Randbedingungen auf,

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_E \left(a, \frac{T}{2}; a, -\frac{T}{2} \right) &= \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{K}_E^{2n} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} (RT)^{2n} \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \cosh(RT)\end{aligned}\quad (2.41)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_E \left(-a, \frac{T}{2}; a, -\frac{T}{2} \right) &= \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{K}_E^{2n+1} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} (RT)^{2n+1} \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \sinh(RT)\end{aligned}\quad (2.42)$$

so erhält man schließlich (2.18).

Setzt man in (2.17) entsprechend $x' = a$ und $x = \pm a$ ein, so erhält man durch Vergleich mit (2.18) die Energien E_0 und E_1 .

$$E_0 = \hbar \left(\frac{\omega}{2} - R \right) \quad (2.43)$$

$$E_1 = \hbar \left(\frac{\omega}{2} + R \right) \quad (2.44)$$

$$\Delta E = 2\hbar R \quad (2.45)$$

Dieses Ergebnis wurde auch schon in der früheren Arbeit vorgestellt².

2.1.6 Das RAZAVY-Potential

Schließlich betrachten wir nun die gesuchten Größen konkret für das RAZAVY-Potential. Analog zu [1] wird das mit (1.1) vorgestellte RAZAVY-Potential der Übersicht halber umskaliert. Dabei wird

$$s = \frac{\xi}{2\hbar(n+1)} \quad (2.46)$$

gesetzt. Nach einer Nullpunktverschiebung nimmt das Potential damit die einfache Form

$$V(x) = \frac{\beta^2 \hbar^2}{2m} (n+1)^2 (s \cosh(2\beta x) - 1)^2 \quad (2.47)$$

²W.C. Poel/Kap. 2.3 Formel (2.4), (2.11) und (2.17)

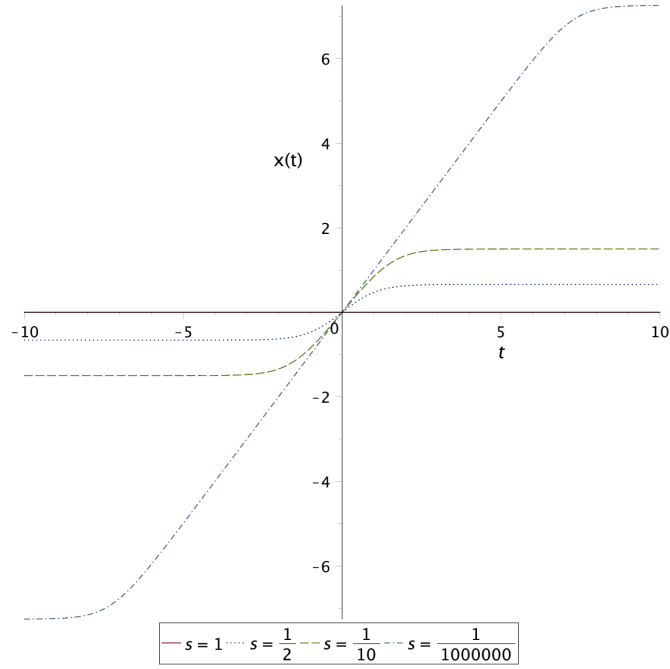


Abbildung 2.4: Kinklösungen mit $\omega = 2$ für $s = 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{10}, \frac{1}{1000000}$

an^3 .

Die (Anti)-Kinklösung zu $E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x(t)) = 0$ ergab dort⁴

$$\beta x_{\text{kl}}(t) = \mp \text{artanh} \left[\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \left(\frac{\omega}{2}(t - t_0) \right) \right] \quad (2.48)$$

$$\beta \dot{x}_{\text{kl}}(t) = \mp \frac{\frac{\omega}{2} \sqrt{1-s^2}}{1 + s \cosh \omega(t - t_0)} . \quad (2.49)$$

Hier wurde die neue Variable

$$\frac{\omega}{2} = \frac{\beta^2}{m} \hbar(n+1) \sqrt{1-s^2} \quad (2.50)$$

eingeführt. In Abbildung 2.4 sind einige Kinklösungen zu unterschiedlichen s dargestellt.

Da wir insbesondere an der Determinante in (2.19) interessiert sind, wird noch $V''(x_{\text{kl}})$ benötigt. Dies erhalten wir aber direkt aus (2.47) mit Hilfe von (2.48) und liefert mit

³W.C. Poel/Kap. 3

⁴W.C. Poel/Kap. 4.3.1 Formel (4.27)

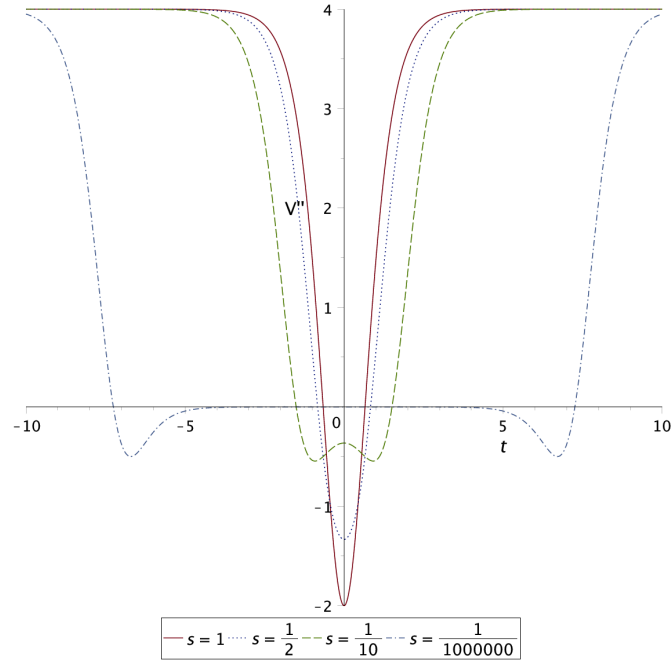


Abbildung 2.5: Potential $V''(x_{\text{kl}}(t))$ mit $\omega = 2$ für $s = 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{10}, \frac{1}{1000000}$ (von innen nach außen)

der Definition $z = \sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh\left(\frac{\omega}{2}t\right)$

$$\begin{aligned}
 V''(x_{\text{kl}}(t)) &= \frac{m\omega^2}{4(1-s^2)} \left[8s^2 \left(\frac{1+z^2}{1-z^2} \right)^2 - 4s \left(\frac{1+z^2}{1-z^2} \right) - 4s^2 \right] \\
 &= \frac{m\omega^2}{4} \left[4 - \frac{12}{1+s \cosh \omega t} + \frac{8(1-s^2)}{(1+s \cosh \omega t)^2} \right].
 \end{aligned} \tag{2.51}$$

Zum Schluss dieses Paragraphen berechnen wir noch den Gamowfaktor für das RAZA-vy-Potential.

Die Riemann-Summe (2.7) schreibt sich im Grenzübergang als Integral

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}] &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}_{\text{kl}}^2 + V(x_{\text{kl}}(t)) \right) \\
 &= \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dt m \dot{x}_{\text{kl}}^2}_{m \mathcal{A}_{\text{kl}}} \\
 &= \int_{-a}^a dx_{\text{kl}} m \dot{x}_{\text{kl}}
 \end{aligned}$$

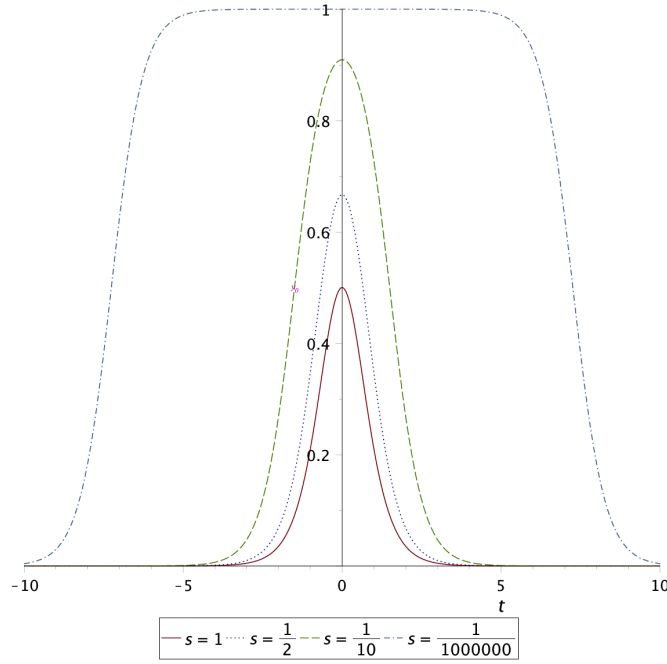


Abbildung 2.6: unnormierte Eigenfunktion $y_0(t)$ zum Eigenwert 0 für $s = 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{10}, \frac{1}{1000000}$ (von innen nach außen)

$$\begin{aligned}
 &= \int_{-a}^a dx_{\text{kl}} \sqrt{2mV(x_{\text{kl}})} \\
 &= \beta \hbar (n+1) \int_{-a}^a dx (1 - s \cosh(2\beta x)) \\
 &= \hbar (n+1) \left[\operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) - \sqrt{1 - s^2} \right], \tag{2.52}
 \end{aligned}$$

wobei zweimal der euklidische Energiesatz ausgenutzt wurde und $a = \frac{1}{2\beta} \operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right)$ ist. Zum Schluss ist vielleicht noch interessant zu wissen, wie die Eigenfunktion $y_0 \propto \dot{x}_{\text{kl}}$ und das zugehörige Potential $V''(x_{\text{kl}})$ überhaupt aussehen. Nach (2.49) hat y_0 die Gestalt

$$y_0(t) = \frac{C}{1 + s \cosh(\omega t)} \tag{2.53}$$

mit einer Normierungskonstanten C .

Abbildung 2.6 zeigt den Verlauf der Funktion für unterschiedliche Werte s . Insbesondere kann man der Grafik entnehmen, dass y_0 keine Knoten hat, es sich also um die Grundzustandswellenfunktion handelt.

2.2 Lösungsmethoden für Funktionaldeterminanten

2.2.1 Eigenwertprodukte

In (2.19) taucht das Verhältnis zweier Determinanten von Differentialoperatoren auf. Zunächst stellt sich allerdings die Frage, was genau man sich darunter vorstellen sollte. Für beschränkte lineare Operatoren, zu denen z.B. endlichdimensionale Matrizen zählen, ist aus der linearen Algebra wohlbekannt, dass die Determinante einer Matrix dem Produkt der Eigenwerte entspricht. Die Selbstadjungiertheit wird hier vorausgesetzt, da diese für schrödingerartige Operatoren mit reellen Potentialen, die hier betrachtet werden, immer erfüllt ist. Für eine $N \times N$ Matrix A_N gilt also

$$\text{Det } A_N = \prod_{n=1}^N \lambda_n. \quad (2.54)$$

Bei obigen Differentialoperatoren handelt es sich aber um unbeschränkte Operatoren. Dies verkompliziert das Problem zunächst. Eine Herangehensweise, dem Begriff der Determinante auch dort einen Sinn zu geben, bietet sich ganz im Einklang mit der Definition des Pfadintegrals durch "Zerstückelung" in N Segmente und anschließendem Limes $N \rightarrow \infty$ an, d.h. man berechnet das Pfadintegral in der zeitgestückelten Variante, nachdem man den Exponenten in Matrixschreibweise umgeformt hat. Die Matrix repräsentiert zwei Operatoren ∇ und $\bar{\nabla}$, die durch ihre Wirkung auf die Stützstellen x_n des in Intervalle unterteilten Pfades definiert sind⁵.

$$\nabla x_n \equiv \frac{1}{\epsilon} (x_{n+1} - x_n) \quad (2.55)$$

$$\bar{\nabla} x_n \equiv \frac{1}{\epsilon} (x_n - x_{n-1}) \quad (2.56)$$

Dabei ist $\epsilon = \frac{t-t_0}{N}$ wie in Abschnitt (2.1.1) definiert worden.

Man kann leicht nachrechnen, dass diese Operatoren die gleichen Eigenschaften wie die herkömmlichen kontinuierlichen Ableitungen haben. Hierunter fällt z.B. auch die partielle Summation, von der in (2.58) Gebrauch gemacht wird. Das Pfadintegral (2.6) mit (2.7) schreibt sich dann nach der Entwicklung der Wirkung (2.7) um den klassischen Pfad als

$$\mathcal{K}_E(x, t; x', t_0) = e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}]} \underbrace{\int \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{2\hbar} A[x]}}_{\equiv \mathcal{F}(t-t_0)}, \quad (2.57)$$

wobei $A[x]$ durch

$$\begin{aligned} A[x] &= \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[m (\nabla x_n)^2 + V''(x_{\text{kl}}(t_n)) x_n^2 \right] \\ &= \frac{m}{\epsilon} \sum_{n=1}^{N-1} x_n \left[-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 m^{-1} V''_n \right] x_n \quad \text{mit } (x_0 = 0, x_N = 0) \end{aligned} \quad (2.58)$$

⁵Hagen Kleinert - Pfadintegrale / Kap. 2

gegeben ist. Außerdem wurde der Fluktuationsfaktor $\mathcal{F}(t - t_0)$ zur Abkürzung gleich mitdefiniert.

Letzte Form ist besonders praktisch, da sie als einfache Matrix geschrieben werden kann. Für ein allgemeines $U(t)$ hat sie folgende Gestalt:

$$A_{N-1}^{nn'} \equiv [-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 U(t)]_{N-1}^{nn'} = \begin{pmatrix} 2 + \epsilon^2 U_1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 + \epsilon^2 U_2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 + \epsilon^2 U_{N-2} & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 + \epsilon^2 U_{N-1} \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

Wie zu erwarten war, ist A_{N-1} offensichtlich symmetrisch und daher diagonalisierbar. (2.58) lässt sich folglich durch

$$\begin{aligned} A[x] &= \frac{m}{\epsilon} x^T A_{N-1} x = \frac{m}{\epsilon} x^T \mathcal{U} A_{N-1}^{\text{Diag}} \mathcal{U}^T x \\ &= \frac{m}{\epsilon} (\mathcal{U}^T x)^T A_{N-1}^{\text{Diag}} (\mathcal{U}^T x) = \frac{m}{\epsilon} \xi^T A_{N-1}^{\text{Diag}} \xi \\ &= \frac{m}{\epsilon} \sum_{n=1}^{N-1} \lambda_n \xi_n^2 \end{aligned} \quad (2.60)$$

ersetzen, wobei hiesiges \mathcal{U} die orthogonale Transformationsmatrix und A_{N-1}^{Diag} die Diagonalmatrix zu A_{N-1} ist. Bei der Variablentransformation $x \rightarrow \xi$ im Integral ist die Jacobideterminante somit 1.

Der Fluktuationsfaktor $\mathcal{F}(t - t_0)$ aus (2.57) ergibt dann mit einem zunächst allgemeinen U_n in der zeitgestückelten Variante

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int \mathcal{D}\xi e^{-\frac{m}{2\hbar\epsilon} \sum_{n=1}^{N-1} \lambda_n \xi_n^2} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \prod_{n=1}^{N-1} \frac{1}{\lambda_n}} \quad (2.61)$$

$$\begin{aligned} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \frac{1}{\text{Det } A_{N-1}}} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \frac{1}{\text{Det } [-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 U(t)]_{N-1}}}. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Im Allgemeinen ist es sehr schwer, $\text{Det } A_{N-1}$ für beliebige $U(t)$ zu bestimmen. Es bietet sich aber an, sie bei gegebenen $U(t)$ (2.62) auf die Determinante des asymptotischen Verhaltens von $U(t)$ zu normieren (falls dieses existiert). Dabei bezeichnen wir wieder

$$\omega^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} U(t)$$

$$\mathcal{F}(t - t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \frac{1}{\text{Det}[-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 \omega^2]_{N-1}} \frac{\text{Det}[-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 \omega^2]_{N-1}}{\text{Det}[-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 U]_{N-1}}}. \quad (2.63)$$

Entwickelt man nun (2.59) nach der $N - 1$ -ten Zeile, so erhält man eine Rekursionsrelation für $D_{N-1} \equiv \text{Det } A_{N-1}$

$$D_{N-1} = (2 + \epsilon^2 U_{N-1}) D_{N-2} - D_{N-3}, \quad (2.64)$$

die mit den Anfangsbedingungen

$$D_1 = (2 + \epsilon^2 U_1) \quad (2.65)$$

$$D_2 = (2 + \epsilon^2 U_2) (2 + \epsilon^2 U_1) - 1 \quad (2.66)$$

zu lösen ist.

Für $U_n = \omega^2 = \text{konst.}$ lässt sich dies in geschlossener Form besonders einfach lösen und (2.63) reduziert sich nur auf die Bestimmung des Verhältnisses der zwei Determinanten (Vgl. (2.86) und (2.24))

$$\mathcal{F}(t - t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh \omega(t - t_0)}} \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\text{Det}[-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 \omega^2]_{N-1}}{\text{Det}[-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla} + \epsilon^2 U]_{N-1}}}. \quad (2.67)$$

An dieser Stelle erkennt man schon deutlich die formale Äquivalenz zum Ausdruck (2.24) bzw. (2.35). Im Kontinuumslimites ($\epsilon \rightarrow 0$ und $\nabla \bar{\nabla} \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial t^2}$) erhält man nämlich sofort den gleichen Ausdruck wie in (2.24). Dennoch ist an dieser Stelle Vorsicht geboten, denn die Kontinuumsdeterminante (als Produkt der Eigenwerte des Operators) ist für sich ein stark divergenter Ausdruck. Lediglich das Verhältnis zweier Kontinuumsdeterminanten kann so definiert werden, da sich die (konstanten) divergenten Anteile herauskürzen.

Desweiteren wurde sich bis dato in keinsten Weise über mögliche Nullmoden Gedanken gemacht. Offensichtlich enthalten diese Ausdrücke daher noch jene Divergenzen, deren Behandlung wir uns im übernächsten Abschnitt widmen. Formal schreiben wir nun

$$\frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod_n \lambda_n} \equiv \frac{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega^2 \right)}{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + U(t) \right)}, \quad (2.68)$$

was insbesondere den Fall der Kontinuumsspektren beinhalten soll.

In der Tat ist wegen $\lim_{t \rightarrow \infty} U(t) = \omega^2$ das Spektrum für $\lambda > \omega^2$ kontinuierlich. In [4] ist auch hierfür eine Formel angegeben⁶.

$$\left. \frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod_n \lambda_n} \right|_{\text{kont}} = \exp \left[- \int_0^\infty dk \left(\frac{\partial n}{\partial k} - \frac{\partial n}{\partial k} \Big|_0 \right) \ln \lambda \right] \quad (2.69)$$

⁶Hagen Kleinert - Pfadintegrale / Kap. 17 Formel (17.115)

Dabei ist $\lambda = k^2 + \omega^2$.

$\frac{\partial n}{\partial k}$ in (2.69) bezeichnet die Zustandsdichte, die sich aus den Phasenverschiebungen der Streuzustände berechnen lässt. Für $\lambda > \omega^2$ ist das asymptotische Verhalten der Zustände $y(t)$ durch $\cos(k|t| + \delta_g)$ für die Geraden und $\sin(k|t| + \delta_u)$ für die Ungeraden gegeben. Betrachtet man das System zunächst für ein endliches Intervall der Breite T , so müssen analog zum Teilchen im unendlich hohen Potentialtopf die Wellenfunktionen an den Enden verschwinden. Es müssen also die Randbedingungen

$$k \frac{T}{2} + \delta_g = \pi \left(n_g - \frac{1}{2} \right) \quad n_g \in \mathbb{N}^* \quad (2.70)$$

$$k \frac{T}{2} + \delta_u = \pi n_u \quad n_u \in \mathbb{N}^* \quad (2.71)$$

gelten. Bis auf konstante Terme entspricht $n_{g/u}$ auch schon der Anzahl an Zuständen für $k^2 \geq 0$. Man könnte daher meinen, die Zustandsdichte ergibt sich einfach durch Ableitung nach k .

$$\frac{\partial n_{g/u}}{\partial k} = \frac{T}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \frac{\partial \delta_{g/u}}{\partial k} \quad (\text{falsch}) \quad (2.72)$$

Eine kleine Raffinesse bleibt bei dieser Betrachtung allerdings unberücksichtigt.

Das Levinson-Theorem macht eine Aussage über den Zusammenhang der Phasenverschiebungen an der Stelle $k = 0$, also der Schwelle zwischen gebundenen Zuständen und Kontinuum, und der Anzahl der gebundenen Zustände des vorliegenden Potentials. Grob gesprochen ist das Theorem eine Folge der Tatsache, dass ein Potential mit n gebundenen Zuständen n weniger Zustände im Kontinuum besitzt.

Ursprünglich 1949 formuliert von Levinson für den Radialteil der 3-dimensionalen Schrödingergleichung, veröffentlichten Dong & Ma 1999 eine Version mit Gültigkeit für den streng 1-dimensionalen Fall.[12] Der wesentliche Unterschied liegt darin, dass hier gerade und ungerade Zustände voneinander getrennt behandelt werden müssen. In diesem Fall lautet das Theorem:

$$\delta_g(0) = \begin{cases} (n_g - \frac{1}{2}) \pi & \text{nicht-kritisch} \\ n_g \pi & \text{kritisch} \end{cases} \quad \delta_u(0) = \begin{cases} n_u \pi & \text{nicht-kritisch} \\ (n_u + \frac{1}{2}) \pi & \text{kritisch} \end{cases}$$

Die Bezeichnung kritisch bedeutet, dass das Potential einen geraden bzw. ungeraden sogenannten halbgebundenen Zustand besitzt. Dieser ist dadurch ausgezeichnet, dass er asymptotisch endlich bleibt, aber nicht normierbar ist. Ein Beispiel für einen halbgebundenen Zustand wäre die konstante Lösung des freien Teilchens $\propto \cos(0)$. Diese ist gerade. Die ungerade Lösung, $\sin(0)$, existiert nicht. Das Levinson-Theorem lautet dann in diesem Fall $\delta_g(0) = 0$ und $\delta_u(0) = 0$, in Übereinstimmung mit der Definition, dass für den freien Fall die Phasenverschiebungen verschwinden.

Diese halbgebundenen Zustände wirken sich nun auch auf die Zustandsdichten aus. Existiert dieser, so bekommt die Zustandsdichte einen deltafunktionsartigen Beitrag. Die korrekte Zustandsdichte lautet daher:

$$\frac{\partial n_{g/u}}{\partial k} = \frac{T}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \frac{\partial \delta_{g/u}}{\partial k} + \begin{cases} 0 & \text{nicht kritisch} \\ \delta(k) & \text{kritisch} \end{cases} \quad (2.73)$$

Wie bereits erwähnt, ist der freie Fall ein sogenannter kritischer. Dort verschwinden die gewöhnlichen Phasenverschiebungen und die Zustandsdichte ergibt:

$$\left. \frac{\partial n_{g/u}}{\partial k} \right|_0 = \frac{T}{2\pi} + \begin{cases} \delta(k) & \text{gerade} \\ 0 & \text{ungerade} \end{cases} \quad (2.74)$$

$V''(x_{kl})$ besitzt allerdings im allgemeinen keine solchen halbgebundenen Zustände. Für das RAZAVY-Potential existieren in dem Intervall $[0, 1]$ genau abzählbar unendlich viele Werte s_n für die ein halbgebundener Zustand auftritt. Dies kann man sich wie folgt klar machen. Für $s_1 = 1$ geht $V''(x_{kl})$ in das sogenannte Pöschl-Teller-Potential über, welches wir in Abschnitt 3.2 kurz behandeln werden. Mit den zugehörigen Parametern $\omega = 2$ und $l = 2$ besitzt dieses einen halbgebundenen geraden Zustand. Allgemein existieren beim \mathcal{PT} -Potential halbgebundene Zustände für alle ganzzahligen l .

Verringert man s nun langsam, so weitet sich das Potential immer mehr auf - Vgl. Abbildung 2.5. Ab einem bestimmten Wert $s_2 < 1$, kommt ein zusätzlicher „Eigenwert“ aus dem Kontinuum herein, der sich zunächst für genau diesen Wert s_2 jedoch noch auf der Grenze zwischen Kontinuum und gebunden befindet, d.h. bei $\lambda_2 = \omega^2$. Für diesen Wert λ_2 hat die zugehörige Eigenfunktion jedoch noch nicht das notwendige asymptotisch exponentiell abklingende Verhalten. Stattdessen nähert sie sich einer Konstanten. Erst für $s < s_2$ ist $\lambda_2 < \omega^2$ und die Eigenfunktion somit normierbar. Bei weiterer Abnahme von s wandert dieser Eigenwert weiter nach unten und ab einem nächsten Grenzwert s_3 wiederholt sich dieser Vorgang. Ein nächster Zustand aus dem Kontinuum landet auf der Grenze $\lambda_3 = \omega^2$, welcher schließlich für $s < s_3$ gebunden wird. Dieses Spiel setzt sich bei immer kleiner werdendem s unendlich oft fort, so dass sich immer mehr Eigenwerte zwischen 0 und ω^2 tummeln. Das Verschwinden des Potentials für $s \rightarrow 0$ kann man sich daher als unendlich dichte Ansammlung von Eigenwerten vorstellen, dem Kontinuum, welches sich von nun an von 0 bis unendlich erstreckt. Bis zu diesem Punkt existiert jedoch eine Folge s_n mit Häufungspunkt 0, deren Werte den Abschnitt eines zusätzlichen Eigenwerts einleiten. Der Grenzfall $s_\infty = 0$ hat übrigens die konstante Funktion als halbgebundenen Zustand.

Die gesuchte Größe nimmt für den uns relevanten Fall, dass kein halbgebundener Zustand auftritt dann die Form

$$\left. \frac{\partial n_{g/u}}{\partial k} - \frac{\partial n_{g/u}}{\partial k} \right|_0 = \frac{1}{\pi} \frac{\partial \delta_{g/u}}{\partial k} - \begin{cases} \delta(k) & \text{gerade} \\ 0 & \text{ungerade} \end{cases} \quad (2.75)$$

an und Gleichung (2.69) vereinfacht sich zu

$$\left. \frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod_n \lambda_n} \right|_{\text{kont}} = \omega \exp \left[-\frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \frac{d\delta_k}{dk} \ln(\omega^2 + k^2) \right]. \quad (2.76)$$

Dabei ist $\delta_k = \delta_g + \delta_u$ die Summe der geraden und ungeraden Phasenverschiebungen. Da der halbgebundene Zustand auf der Grenze zwischen gebunden und Kontinuum liegt, i.e. $\lambda_{\text{hg}} = \omega^2$, kann dies auch als Beitrag zum Eigenwertprodukt für den halbgebundenen Zustand interpretiert werden. Allerdings geht dieser nicht mit λ_{hg} wie die

anderen Eigenwerte ein, sondern mit $\sqrt{\lambda_{\text{hg}}} = \omega$. In Abschnitt 3.2 wird die Differentialgleichung für das RAZAVY-Potential aufgestellt und gelöst. Die sich dabei ergebenden Eigenwerte und Phasenverschiebungen ermöglichen die direkte Auswertung des Determinantenverhältnisses (2.69).

2.2.2 Gelfand-Yaglom-Methode

Gleichung (2.64) lässt sich umschreiben als

$$\epsilon^2 \left[-\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{D_{N+1} - D_N}{\epsilon} - \frac{D_N - D_{N-1}}{\epsilon} \right) + U_{N+1} D_N \right] = 0 \quad (2.77)$$

$$\iff \epsilon^2 (-\nabla \bar{\nabla} + U_{N+1}) D_N = 0, \quad (2.78)$$

wobei die Operatoren auf den Dimensionsindex N wirkend zu verstehen sind. Führt man eine sogenannte renormalisierte Funktion definiert über

$$D_{\text{ren}}(t_N) \equiv \epsilon D_N \quad (2.79)$$

ein, so schreibt sich (2.78) im Kontinuumsimes als

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + U(t) \right) D_{\text{ren}}(t) = 0. \quad (2.80)$$

Für diese Funktionen $D_{\text{ren}}(t)$ existieren die Anfangsbedingungen.

$$\epsilon D_1 = D_{\text{ren}}(t_0) = 0 \quad (2.81)$$

$$\frac{\epsilon D_2 - \epsilon D_1}{\epsilon} = \nabla \epsilon D_1 \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \dot{D}_{\text{ren}}(t_0) = 1 \quad (2.82)$$

Löst man also das Anfangswertproblem (2.80) mit (2.81) und (2.82), so ist $\lim_{N \rightarrow \infty} D_N$ gegeben durch

$$\lim_{N \rightarrow \infty} D_N = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} D_{\text{ren}}(t) \quad (2.83)$$

mit t als Endzeit wie in (2.6).

(2.62) ist daher durch Berechnung von $D_{\text{ren}}(t)$ bestimmt

$$\mathcal{F}(t - t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar} \frac{1}{D_{\text{ren}}(t)}}. \quad (2.84)$$

Anzumerken sei vielleicht noch, dass Differentialgleichungen vom Typ (2.80) zwei linear unabhängige Lösungen $f(t)$ und $g(t)$ besitzen. $D_{\text{ren}}(t)$ als Linearkombination eben solcher nimmt mit (2.81) und (2.82) daher die Gestalt

$$D_{\text{ren}}(t) = \frac{f(t_0)g(t) - f(t)g(t_0)}{f(t_0)g'(t_0) - f'(t_0)g(t_0)} = \frac{1}{W} [f(t_0)g(t) - f(t)g(t_0)] \quad (2.85)$$

an. Der Nenner in (2.85) ist dabei die Wronski-Determinante. Für DGLs, bei denen der Koeffizient vor der ersten Ableitung verschwindet, ist sie konstant. Im einfachen Fall des harmonischen Oszillators, $U(t) = \omega^2 = \text{konst}$, bestimmt sich (2.85) z.B. zu

$$D_{\text{ren}}^0(t) = \frac{1}{\omega} \sinh \omega(t - t_0). \quad (2.86)$$

Dieses asymptotisch exponentielle Verhalten für große $t - t_0$ ist natürlich zwingend erforderlich, vergleicht man dies mit (2.17).

2.2.3 Coleman-Affleck-Methode

Der Ausdruck z.B. in (2.19) soll also den Nulleigenwert des Operators $-\partial_t^2 + m^{-1}V''(t)$ nicht enthalten. Im Folgenden soll dieser daher aus dem Verhältnis eliminiert werden. Dazu betrachtet man zunächst das Problem für endliche $t - t_0 = T$, wobei man symmetrisch $t_0 = -\frac{T}{2}$ und $t = +\frac{T}{2}$ setzt. In jedem Fall wandern die Eigenwerte dann ein wenig nach oben. Insbesondere ist $\lambda_0 \approx 0$ nur eine Fast-Nullmode. Unser Ziel ist also, diese Fast-Nullmode in Abhängigkeit von T zu bestimmen und sie mit dem Verhältnis zu multiplizieren. Der Grenzfall $T \rightarrow \infty$ müsste dann das gewünschte Ergebnis liefern. Nach Gelfand-Yaglom kann das Verhältnis geschrieben werden als

$$\frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod_n \lambda_n} = \frac{D_{\text{ren}}^0\left(\frac{T}{2}\right)}{D_{\text{ren}}\left(\frac{T}{2}\right)}. \quad (2.87)$$

Ausgehend von der Eigenwertgleichung

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + U(t) \right] \psi_\lambda(t) = \lambda \psi_\lambda(t) \quad (2.88)$$

wird diese in eine Integralgleichung

$$\begin{aligned} \psi_\lambda(t) &= \phi_0(t) + \phi_\lambda(t) \\ &= \phi_0(t) - \frac{\lambda}{W} \int_{-\frac{T}{2}}^t dt' [\tilde{y}_0(t)y_0(t') - y_0(t)\tilde{y}_0(t')] \psi_\lambda(t') \end{aligned} \quad (2.89)$$

umgewandelt. $W = y_0 \partial_t \tilde{y}_0 - \tilde{y}_0 \partial_t y_0$ ist wie oben die Wronski-Determinante mit den beiden linear unabhängigen Lösungen y_0 und \tilde{y}_0 zum Eigenwert $\lambda = 0$. ϕ_0 ist hier eine beliebige allgemeine Lösung zu $\lambda = 0$, d.h. eine Linearkombination aus y_0 und \tilde{y}_0 .

Um zu sehen, dass $\psi_\lambda(t)$ aus (2.89) Gleichung (2.88) erfüllt, wenden wir den Operator

$-\partial_t^2 + U(t)$ direkt auf $\psi_\lambda(t)$ an.

$$\begin{aligned}
\left[-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + U(t)\right] \psi_\lambda(t) &= \left[-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + U(t)\right] (\phi_0(t) + \phi_\lambda(t)) \\
&= -\frac{\partial^2}{\partial t^2} \phi_\lambda(t) + U(t) \phi_\lambda(t) \\
&= \frac{\lambda}{W} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \int_{-\frac{T}{2}}^t dt' [\tilde{y}_0(t) y_0(t') - y_0(t) \tilde{y}_0(t')] \psi_\lambda(t') \\
&\quad + U(t) \phi_\lambda(t) \\
&= \frac{\lambda}{W} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int_{-\frac{T}{2}}^t dt' [\tilde{y}_0'(t) y_0(t') - y_0'(t) \tilde{y}_0(t')] \psi_\lambda(t') \right. \\
&\quad \left. + \underbrace{[\tilde{y}_0(t) y_0(t') - y_0(t) \tilde{y}_0(t')] \psi_\lambda(t') \Big|_{t'=t}}_0 \right\} + U(t) \phi_\lambda(t) \\
&= \frac{\lambda}{W} \int_{-\frac{T}{2}}^t dt' [\tilde{y}_0''(t) y_0(t') - y_0''(t) \tilde{y}_0(t')] \psi_\lambda(t') \\
&\quad + \frac{\lambda}{W} \underbrace{[\tilde{y}_0'(t) y_0(t) - y_0'(t) \tilde{y}_0(t)]}_{W} \psi_\lambda(t) + U(t) \phi_\lambda(t) \\
&= U(t) \underbrace{\frac{\lambda}{W} \int_{-\frac{T}{2}}^t dt' [\tilde{y}_0(t) y_0(t') - y_0(t) \tilde{y}_0(t')] \psi_\lambda(t')}_{-\phi_\lambda} \\
&\quad + \lambda \psi_\lambda(t) + U(t) \phi_\lambda(t) \\
&= \lambda \psi_\lambda(t)
\end{aligned} \tag{2.90}$$

Für $\lambda \approx 0$ genügt es nun einmal zu iterieren. Die Bedingung, dass λ für endliche T nun ein Eigenwert ist, kann durch

$$\psi_\lambda\left(\frac{T}{2}\right) = 0 \tag{2.91}$$

formuliert werden.

Setzt man konkret $\phi_0(t) = D_{\text{ren}}(t) = \frac{1}{W} [y_0(t_0) \tilde{y}_0(t) - y_0(t) \tilde{y}_0(t_0)]$ in (2.89) ein ($t_0 = -\frac{T}{2}$) und nutzt die Eigenwertbedingung (2.91) aus, so erhält man das asymptotische Verhalten von $\lambda_0(T)$.

$$\begin{aligned}
\frac{\lambda_0(T)}{D_{\text{ren}}\left(\frac{T}{2}\right)} &= \frac{W^2}{\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt' [\tilde{y}_0^2\left(\frac{T}{2}\right) y_0^2(t') - y_0^2\left(\frac{T}{2}\right) \tilde{y}_0^2(t')]} \\
&= \frac{W^2}{\tilde{y}_0^2\left(\frac{T}{2}\right) \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt' y_0^2(t')}
\end{aligned} \tag{2.92}$$

Dabei wurde der zweite Term im Integral vernachlässigt, da dieser für große T gegenüber dem ersten exponentiell klein ist. In diesem Ausdruck sind die beiden linear unabhängigen Lösungen y_0 und \tilde{y}_0 lediglich bis auf konstante Faktoren festgelegt. Besonders einfach wird der Ausdruck (2.92) daher, wenn man für die Eigenfunktion y_0 annimmt, dass sie vollständig auf 1 normiert ist.

$$y_0(t) = \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-\frac{1}{2}} \dot{x}_{\text{kl}}(t) \quad (2.93)$$

Für das asymptotische Verhalten folgt aus $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U(t) = \omega^2$

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} y_0(t) = \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-\frac{1}{2}} \cdot A e^{-\omega|t|}. \quad (2.94)$$

Da nun \tilde{y}_0 linear unabhängig ist und die Wronski-Determinante eine Konstante ist, muss \tilde{y}_0 asymptotisch wie $e^{+\omega|t|}$ verlaufen. Wählt man für diese Funktion nun den gleichen konstanten Vorfaktor

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \tilde{y}_0(t) = \pm \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-\frac{1}{2}} \cdot A e^{\omega|t|}, \quad (2.95)$$

dann hat die Wronski-Determinante den Wert $W = 2\omega \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1} \cdot A^2$. (2.92) vereinfacht sich damit weiter zu

$$\frac{\lambda_0(T)}{D_{\text{ren}}\left(\frac{T}{2}\right)} = 4\omega^2 \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1} \cdot A^2 e^{-\omega T}. \quad (2.96)$$

Für den gesuchten Faktor \mathcal{K} (2.19) ergibt sich dann das einfache Resultat

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar} \mathcal{A}_{\text{kl}} \frac{D_{\text{ren}}^0\left(\frac{T}{2}\right)}{D_{\text{ren}}\left(\frac{T}{2}\right)} \lambda_0(T)} \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} A. \end{aligned} \quad (2.97)$$

2.3 WKB-Näherung

Eine bewährte Herangehensweise zur Bestimmung von Energieaufspaltungen ist die WKB-Methode. Um nicht bei Adam und Eva anzufangen, verweise ich zunächst auf die einschlägige Literatur, insbesondere [5] [6] und [7]. Die normierte Wellenfunktion bei gegebener Energie lautet im klassisch verbotenen Bereich in WKB-Näherung

$$\psi(x) \approx \sqrt{\frac{m\omega}{2\sqrt{\pi}e|p(x)|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{\tilde{a}(E)} dx' |p(x')| \right], \quad (2.98)$$

wobei $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$, $\omega = \frac{2\pi}{T}$ die klassische Kreisfrequenz der periodischen Bewegung des Teilchens in einem Potential $V(x)$ und $\tilde{a}(E)$ der klassische Umkehrpunkt ist. Für $E = 0$ stimmt dieser mit dem Minimum des Potentials überein. Für den Gültigkeitsbereich ergibt sich die Forderung $\tilde{a} - x \gg \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Außerdem stellt die WKB-Wellenfunktion (2.98) an die Potentiale die Forderung, dass der gesamte Bereich jenseits eines Umkehrpunkts klassisch verboten ist. Das schließt deren Anwendung auf Doppelmuldenpotentiale zunächst aus. Stellt man allerdings für unser Doppelmuldenpotential $V(x)$ die Schrödingergleichung für die beiden niedrigsten Zustände auf,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1''(x) + V(x)\psi_1(x) = E_1\psi_1(x) \quad (2.99)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2''(x) + V(x)\psi_2(x) = E_2\psi_2(x) \quad (2.100)$$

so erhält man durch Linearkombination

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) + \psi_2(x)] \quad (2.101)$$

eine Wellenfunktion, die in guter Näherung in der rechten Mulde lokalisiert ist (siehe Abbildung 2.7). Dies impliziert, dass $\psi_0(x)$ Lösung zu einem Potential ist, dass die Anforderungen der WKB-Wellenfunktion erfüllt, solange der Wall in der Mitte hoch genug ist, so dass ein Teilchen, welches in einer der Mulden sitzt, nahezu nichts von der anderen merkt. In dieser Näherung hat ein Teilchen der Wellenfunktion ψ_0 die Energie

$$E_0 = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \left[(\langle \psi_1 | + \langle \psi_2 |) \hat{H} (| \psi_1 \rangle + | \psi_2 \rangle) \right] = \frac{E_1 + E_2}{2}. \quad (2.102)$$

Die Energie liegt also zwischen den beiden Energien der niedrigsten Zustände, so wie man es von einer Aufspaltung erwarten würde. Unter der Annahme, dass die Aufspaltung sehr klein gegenüber (2.102) ist, erfüllt auch $\psi_0(x)$ die Schrödingergleichung näherungsweise

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_0''(x) + V(x)\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [E_1\psi_1(x) + E_2\psi_2(x)] \approx E_0\psi_0(x). \quad (2.103)$$

In diesem Zusammenhang spricht man auch oft von asymptotischer Näherung, denn für den letzten Schritt gilt im Limes sehr hoher Barrieren Gleichheit. Multipliziert man (2.99) mit $\psi_0(x)$ und (2.103) mit $\psi_1(x)$ und subtrahiert anschließend beide Gleichungen voneinander, so erhält man einen Ausdruck für die Energieaufspaltung

$$[E_0 - E_1] \psi_0(x) \psi_1(x) = \frac{\hbar^2}{2m} [\psi_0(x) \psi_1''(x) - \psi_1(x) \psi_0''(x)] , \quad (2.104)$$

der nach Integration von 0 bis ∞ mit einmaliger partieller Integration in

$$E_0 - E_1 \approx \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}m} [\psi_1(0) \psi_0'(0) - \psi_0(0) \psi_1'(0)] \quad (2.105)$$

übergeht. Auch an dieser Stelle sei die asymptotische Äquivalenz (also für sehr hohe Barrieren) von (2.105) betont. Da der Grundzustand $\psi_1(x)$ gerade ist, verschwindet

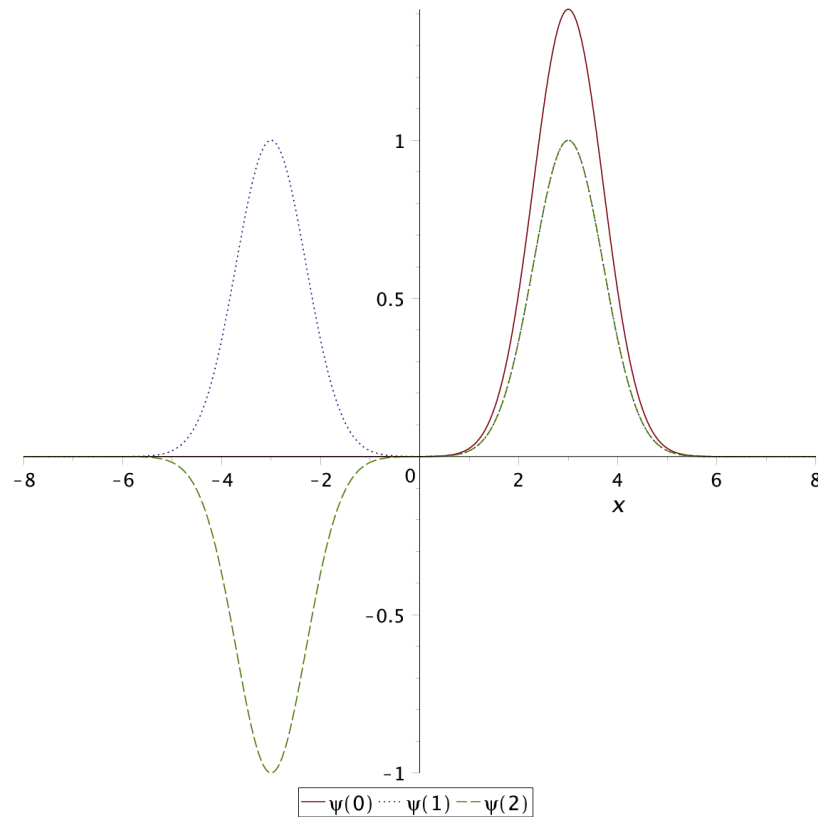


Abbildung 2.7: Die gerade Grundzustandswellenfunktion ψ_1 , ungerade Wellenfunktion des ersten angeregten Zustands ψ_2 und Linearkombination $\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + \psi_2)$ des in der rechten Mulde lokalisierten Zustands.

der zweite Term und wegen

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) + \psi_0(-x)] \quad \Rightarrow \quad \psi_1(0) = \sqrt{2} \psi_0(0) \quad (2.106)$$

kann die Aufspaltung direkt in Relation zu ψ_0 gesetzt werden. $E_0 - E_1$ berechnet sich damit zu

$$\begin{aligned}
E_0 - E_1 &= \frac{\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0) \\
&= \frac{\hbar^2}{m} \frac{|p(0)|}{\hbar} [\psi_0(0)]^2 \\
&= \frac{\hbar |p(0)|}{m} \frac{m\omega}{2\sqrt{\pi} e |p(0)|} \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_0^{\tilde{a}(E)} dx' |p(x')| \right] \\
&= \frac{\hbar\omega}{2\sqrt{\pi} e} \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_0^{\tilde{a}(E)} dx' |p(x')| \right].
\end{aligned} \tag{2.107}$$

Analog erhält man

$$E_2 - E_0 = \frac{\hbar\omega}{2\sqrt{\pi} e} \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_0^{\tilde{a}(E)} dx' |p(x')| \right], \tag{2.108}$$

womit die WKB-Energieaufspaltung

$$\Delta E \equiv E_2 - E_1 = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{\pi} e} \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_0^{\tilde{a}(E)} dx' |p(x')| \right] \tag{2.109}$$

bestimmt wäre. Eine Bemerkung zum Wert von \tilde{a} sei hier vielleicht noch angebracht. In harmonischer Näherung ist die Grundzustandsenergie ungefähr $E_1 \approx E_2 \approx \frac{\hbar\omega}{2}$. Der Umkehrpunkt ist daher gegeben durch

$$\begin{aligned}
V(\tilde{a}) &= E \approx \frac{\hbar\omega}{2} \\
\Leftrightarrow \tilde{a}(E) &= V^{-1} \left(\frac{\hbar\omega}{2} \right).
\end{aligned} \tag{2.110}$$

Da \tilde{a} in der unmittelbaren Umgebung des Minimums liegt, kann auch $V(x)$ in harmonischer Näherung betrachtet werden. Dies liefert

$$\tilde{a} = a - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \tag{2.111}$$

Nach einer auf A.K. Garg [6] zurückgehenden Arbeit, lässt sich (2.109) auch in einer einfacher zu handhabenden Form schreiben, da (2.109) in vielen Fällen, wie auch in diesem Speziellen, auf elliptische Funktionen führt und ein direkter Vergleich mit der Instanton-Methode weniger offensichtlich ist. Allerdings lässt sich das Integral auch nicht ohne Weiteres in eine Taylorreihe nach dem Parameter \tilde{a} um a entwickeln, da sämtliche Ableitungen $I^{(n)}(\tilde{a})$ für $n \geq 2$ nicht existieren. $I(\tilde{a})$ ist dabei das Integral

im Exponenten. Zu beachten dabei ist, dass sowohl der Integrand als auch die obere Grenze von dem Parameter abhängen.

$$\Delta E = 2\hbar\omega\sqrt{\frac{m\omega a^2}{\pi\hbar}} e^{\mathcal{X}} e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{kl}]+\mathcal{O}(\hbar)} \quad (2.112)$$

a ist dabei wie in (2.52) das tatsächliche Minimum und \mathcal{X} steht hier für den Ausdruck

$$\mathcal{X} \equiv \int_0^a \left[\frac{m\omega}{\sqrt{2mV(x)}} - \frac{1}{a-x} \right] dx. \quad (2.113)$$

2.3.1 WKB-Näherung für das RAZAVY-Potential

Die wesentliche zu berechnende Größe ist \mathcal{X} .

Mit ω und $V(x)$ wie in (2.50) resp. (2.47) schreibt sich \mathcal{X} zunächst als

$$\begin{aligned} \mathcal{X} &= \int_0^a \left[\frac{2\beta\sqrt{1-s^2}}{1-s\cosh(2\beta x)} - \frac{1}{a-x} \right] dx \\ &= \left[2 \operatorname{artanh} \left(\sqrt{\frac{1+s}{1-s}} \tanh(x) \right) + \ln(\beta a - x) \right]_0^{\beta a} \\ &= \ln \left(\frac{\sqrt{1-s^2}}{s\beta a} \right) \end{aligned} \quad (2.114)$$

Hierbei sei vielleicht noch anzumerken, dass die obere Grenze als $\beta a - \epsilon$ mit anschließendem $\epsilon \rightarrow 0$ zu verstehen ist.

Damit erhält man das Ergebnis für die WKB-Energieaufspaltung

$$\begin{aligned} \Delta E &= 2\hbar\omega\sqrt{\frac{m\omega a^2}{\pi\hbar}} \frac{\sqrt{1-s^2}}{s\beta a} e^{-(n+1)[\operatorname{arcosh}(\frac{1}{s})-\sqrt{1-s^2}]+\mathcal{O}(\hbar)} \\ &= 2\hbar\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} \frac{\sqrt{1-s^2}}{s\beta} \omega^{\frac{3}{2}} \left(\frac{s}{1+\sqrt{1-s^2}} \right)^{n+1} e^{(n+1)\sqrt{1-s^2}+\mathcal{O}(\hbar)} \end{aligned} \quad (2.115)$$

$$= 2\hbar \underbrace{\frac{\beta^2\hbar}{2m} \frac{4\sqrt{2}(1-s^2)^{\frac{5}{4}}}{s\sqrt{\pi}}}_{\kappa} (n+1)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{s}{1+\sqrt{1-s^2}} \right)^{n+1} e^{(n+1)\sqrt{1-s^2}}. \quad (2.116)$$

Dieses Ergebnis soll wie bereits erwähnt später als Vergleich dienen.

3 Die semiklassischen Berechnungen

In den folgenden beiden Unterabschnitten soll ein konkretes Ergebnis für die Determinante im Fall des RAZAVY-Potentials angegeben werden. Zunächst soll dies mit der Gelfand-Yaglom-Methode geschehen, die einen analytischen Zugang bietet. Als zweites werden die Eigenwertprodukte mit Formel (2.69) direkt ausgewertet. Da bei der direkten Auswertung der Eigenwertprodukte nur Verhältnisse betrachtet werden können, wird für einen besseren Vergleich auch (2.84) wieder auf $D_{\text{ren}}^0(t)$ des harmonischen Oszillators normiert. Abschließend wird das Ergebnis der Energieaufspaltung angegeben.

3.1 Gelfand Yaglom

Gesucht ist also das Verhältnis der Eigenwertprodukte der Operatoren $-\partial_t^2 + \omega^2$ und $-\partial_t^2 + m^{-1}V''(t)$, wobei bei Letzterem der Nulleigenwert ausgelassen werden muss. Hierfür haben wir bereits (2.96)

$$\begin{aligned} \frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod'_n \lambda_n} &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{D_{\text{ren}}^0\left(\frac{T}{2}\right)}{D_{\text{ren}}\left(\frac{T}{2}\right)} \lambda_0(T) \\ &= \frac{2\omega A^2}{\mathcal{A}_{\text{kl}}} \end{aligned} \quad (3.1)$$

für $U(t) = m^{-1}V''(x_{\text{kl}}(t))$ wie in (2.51). Als Nächstes benötigen wir das asymptotische Verhalten von $\dot{x}_{\text{kl}}(t)$ (siehe (2.49)).

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \dot{x}_{\text{kl}}(t) &= \frac{\omega\sqrt{1-s^2}}{2\beta} \frac{1}{1+s \cosh \omega t} \\ &= \underbrace{\frac{\omega\sqrt{1-s^2}}{\beta s}}_A e^{-\omega|t|} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Mit $\mathcal{A}_{\text{kl}} = \int dt \dot{x}_{\text{kl}}^2(t)$ folgt aus (2.52) weiter

$$\mathcal{A}_{\text{kl}} = \frac{\hbar(n+1)}{m} \left(\text{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1-s^2} \right). \quad (3.3)$$

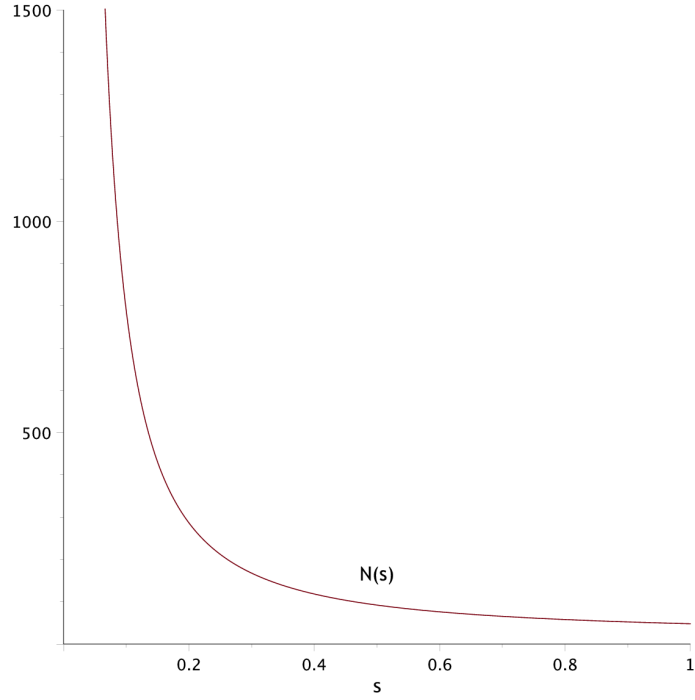


Abbildung 3.1: numerischer Wert $\mathcal{N}(s)$ des Verhältnisses der beiden Fluktuationsdeterminanten

(3.1) wird damit zu

$$\begin{aligned} \frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod'_n \lambda_n} &= 2\omega \frac{\omega^2(1-s^2)}{\beta^2 s^2} \frac{m}{\hbar(n+1)} \frac{1}{\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1-s^2}} \\ &= \frac{\omega^2}{4} \frac{16(1-s^2)^{\frac{3}{2}}}{s^2 \underbrace{\left[\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1-s^2}\right]}_{\mathcal{N}(s)}}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Der hier ausgeklammerte Proportionalitätsfaktor $\frac{\omega^2}{4}$ sollte im nächsten Abschnitt klarer werden. Er verknüpft die Eigenwerte der für numerische Zwecke dimensionslosen Differentialgleichung mit denen des Operators $-\partial_t^2 + m^{-1}V''(t)$. In Abbildung 3.1 und 3.2 ist der numerische Wert $\mathcal{N}(s)$ schematisch dargestellt.

3.2 Eigenwertmethode

Wie in Kapitel (2.2.1) bereits angedeutet, kann das Determinantenverhältnis auch direkt bei Kenntnis aller Eigenwerte berechnet werden. Gleichung (2.51) entnimmt man, dass $V''(x_{\text{kl}}(t))$ beschränkt ist. Oberhalb $m\omega^2$ ist das Spektrum daher kontinuierlich. Abhängig von s existieren M gebundene Zustände. Das gesuchte Determinanten-

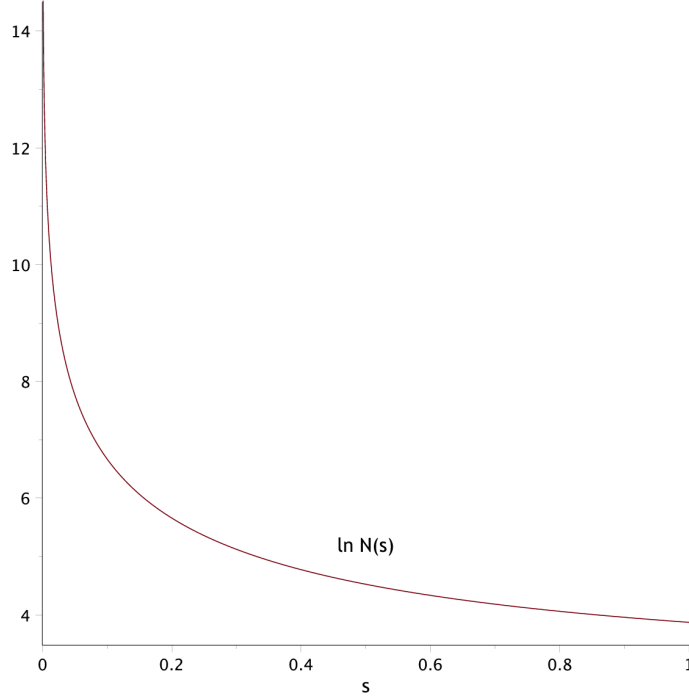


Abbildung 3.2: numerischer Wert $\ln \mathcal{N}(s)$ des Verhältnisses der beiden Fluktuationsdeterminanten in logarithmischer Skala

verhältnis kann daher mit (2.68) und (2.69) in der Form

$$\frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod_n' \lambda_n} = \lambda_0 \left(\prod_{n=0}^{M-1} \lambda_n \right)^{-1} \frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod_n \lambda_n} \Big|_{\text{kont}} \quad (3.5)$$

geschrieben werden. Für die Bestimmung der diskreten Eigenwerte und der notwendigen Phasenverschiebungen ist nun die Differentialgleichung

$$-y''(t) + \frac{\omega^2}{4} \left[4 - \frac{12}{1 + s \cosh(\omega t)} + \frac{8(1 - s^2)}{(1 + s \cosh(\omega t))^2} \right] y(t) = \lambda y(t) \quad (3.6)$$

zu lösen. Für numerische Berechnungen muss diese erst auf eine dimensionslose Form gebracht werden. Wir setzen $\omega t = 2\tau$.

$$-y''(\tau) + \left[4 - \frac{12}{1 + s \cosh(2\tau)} + \frac{8(1 - s^2)}{(1 + s \cosh(2\tau))^2} \right] y(\tau) = \lambda' y(\tau) \quad (3.7)$$

Dabei haben wir $\lambda = \frac{\omega^2}{4} \lambda'$ definiert. Zunächst bemerken wir, dass (3.5) bis auf den Faktor $\frac{\omega^2}{4}$ mit der numerischen Version $\lambda \rightarrow \lambda'$ übereinstimmt. Wir beschränken unsere weiteren Überlegungen daher auf diesen Fall und nach einer Rückbenennung in λ ist der Zusammenhang zu obigem $\mathcal{N}(s)$ offenkundig.

Als nächstes geht (3.7) mit einer Substitution der abhängigen Variablen

$$y(\tau) = \frac{u(\tau)}{1 + s \cosh(2\tau)} \quad (3.8)$$

in die DGL

$$u''(\tau) - \frac{4s \sinh(2\tau)}{1 + s \cosh(2\tau)} u'(\tau) + \lambda u(\tau) = 0 \quad (3.9)$$

bzw.

$$u''(\tau) - \frac{8s \tanh(\tau)}{(1 + s) - (1 - s) \tanh^2(\tau)} u'(\tau) + \lambda u(\tau) = 0 \quad (3.10)$$

über. Hier transformiert man die unabhängige Variable

$$z(\tau) = \tanh^2(\tau) \quad (3.11)$$

$$\Rightarrow \tilde{u}''(z) + \frac{3(1-s)z^2 - (10s+4)z + 1 + s}{2z(1-z)(1+s-(1-s)z)} \tilde{u}'(z) + \frac{\lambda}{4z(1-z)^2} \tilde{u}(z) = 0 \quad (3.12)$$

und führt im Anschluss eine weitere Substitution

$$\tilde{u}(z) = (1-z)^{\eta(\lambda)} \cdot v(z) \quad (3.13)$$

mit $\eta = -1 + \sqrt{1 - \frac{\lambda}{4}} = -1 + \frac{\kappa}{2}$ durch. Die allgemeine Lösung $y(\tau)$ schreibt sich mit $v(z(\tau))$ dann als

$$y(\tau) = \frac{\cosh^2(\tau)}{1 + s \cosh(2\tau)} \cosh(\tau)^{-\kappa} v(z(\tau)) . \quad (3.14)$$

Im weiteren wird es nun darum gehen eine Lösung für $v(z)$ zu finden.

Im Falle $s = 1$ geht (3.7) in ein in der Literatur schon ausführlich behandeltes Potential über, das Rosen-Morse-Potential oder auch modifiziertes Pöschl-Teller Potential [4]

$$-y''(\tau) + \left[\omega^2 - \frac{l(l+1)}{\cosh^2(\tau)} \right] y(\tau) = \lambda^{\mathcal{PT}} y(\tau) , \quad (3.15)$$

hier mit $\omega = 2$ und $l = 2$. Das Verhältnis (2.68) für (3.15) kann man der Literatur entnehmen [4].

$$\frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod_n \lambda_n^{\mathcal{PT}}} = \frac{\Gamma(\omega - l) \Gamma(\omega + l + 1)}{\Gamma(\omega) \Gamma(\omega + 1)} \quad (3.16)$$

$\Gamma(x)$ ist die Gamma-Funktion, die die Fakultätsfunktion $x!$ auf nicht ganzzahlige Werte verallgemeinert. In diesem Ausdruck ist der Eigenwert 0 jedoch noch nicht entfernt.

Für den Fall, dass der Grundzustand ein Fast-Nullmode ist, i.e. $\omega \approx l$, lautet der Eigenwert

$$\lambda_0^{\mathcal{PT}} = \omega^2 - l^2 \quad (3.17)$$

Dividiert man diesen Eigenwert aus (3.16) heraus, so erhält man den für $\omega \rightarrow l$ gültigen Ausdruck

$$\frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod'_n \lambda_n^{\mathcal{PT}}} = (\omega + l) \frac{\Gamma(\omega - l + 1)\Gamma(\omega + l + 1)}{\Gamma(\omega)\Gamma(\omega + 1)}. \quad (3.18)$$

Für den allgemeinen Fall gelangt man nach Division von Gleichung (3.12) durch $1 - s \neq 0$ und der anschließenden obigen Substitution (3.13) zur sogenannten Heunschen DGL [8]

$$v''(z) + \left[\frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z-1} + \frac{\epsilon}{z-a} \right] v'(z) + \frac{\alpha\beta z - q}{z(z-1)(z-a)} v(z) = 0 \quad (3.19)$$

mit der Standardparametrisierung¹

$$\alpha = \eta = \frac{\kappa - 2}{2} \quad (3.20)$$

$$\beta = \eta + \frac{1}{2} = \frac{\kappa - 1}{2} \quad (3.21)$$

$$\gamma = \frac{1}{2} \quad (3.22)$$

$$\delta = 2\eta + 3 = \kappa + 1 \quad (3.23)$$

$$\epsilon = -2 \quad (3.24)$$

$$a = \frac{1+s}{1-s} \quad (3.25)$$

$$q = \eta \left(\eta + \frac{5}{2} \right) a = \frac{(\kappa - 2)(\kappa + 3)}{4} a. \quad (3.26)$$

Die sogenannten Exponenten sind nicht unabhängig, sondern es gilt die Fuchssche Relation, die hier die Form $\alpha + \beta + 1 = \gamma + \delta + \epsilon$ annimmt. Die Heunsche DGL ist im Wesentlichen die Verallgemeinerung der hypergeometrischen DGL. Sie hat 4 Singularitäten bei 0, 1, a und ∞ . Bezeichnet man mit $Hl(a, q; \alpha, \beta, \gamma, \delta; z)$ die lokale (Frobenius) Lösung auf dem Intervall $[0, 1]$ um die Singularität $z = 0$, so ist die gerade und ungerade Lösung von (3.7) gegeben durch [11]

$$y_g(\tau) = \frac{\cosh^2(\tau)}{1 + s \cosh(2\tau)} \cosh(\tau)^{-\kappa} Hl(a, q; \alpha, \beta, \gamma, \delta; \tanh^2(\tau)) \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} y_u(\tau) &= \frac{\cosh^2(\tau)}{1 + s \cosh(2\tau)} \cosh(\tau)^{-\kappa} \tanh(\tau) \\ &\quad \times Hl(a, q - (\gamma - 1)(\delta a + \epsilon); \alpha - \gamma + 1, \beta - \gamma + 1, 2 - \gamma, \delta; \tanh^2(\tau)) \end{aligned} \quad (3.28)$$

¹<http://dlmf.nist.gov/31.2>

mit $\kappa = \sqrt{4 - \lambda}$. Die Koeffizienten c_n der Reihenentwicklung von $Hl(a, q; \alpha, \beta, \gamma, \delta; z)$ erfüllen die 3-Term-Rekursion

$$f_n c_{n+1} + g_n c_n + h_n c_{n-1} = 0 \quad (c_{-1} = 0 \quad \& \quad c_0 = 1) \quad (3.29)$$

wobei

$$\begin{aligned} f_n &= a(n+1)(n+\gamma) \\ g_n &= -[q + n(n-1+\gamma)(1+a) + n(a\delta + \epsilon)] \\ h_n &= (n-1+\alpha)(n-1+\beta). \end{aligned}$$

3.2.1 Eigenwertbedingung

Die Eigenwertbedingung folgt nun aus der Tatsache, dass erlaubte Lösungsfunktionen quadratintegrabel sein müssen. Insbesondere muss $Hl(a, q; \alpha, \beta, \gamma, \delta; 1)$ existieren. Für $\lambda < 4$ hat $y_{g/u}$ dann das typische $e^{-\kappa\tau}$ Verhalten einer solchen Lösungsfunktion. Eine allgemeine Methode verwendet die Wronski Determinante, um genau die Werte für κ in den Koeffizienten zu finden, so dass das asymptotisch korrekte Verhalten gewährleistet ist. Sie beruht darauf, dass jede Lösung von (3.7) als Linearkombination zweier Fundamentallösungen geschrieben werden kann. Wählt man für das Lösungspaar von (3.19) die beiden Frobeniuslösungen um die Singularität $z = 1$, gegeben durch

$$\tilde{H}l_1(z) = Hl(1-a, -q + \alpha\beta; \alpha, \beta, \delta, \gamma; 1-z) \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}l_2(z) &= (1-z)^{1-\delta} Hl(1-a, -q + (\delta-1)\gamma a + (\alpha-\delta+1)(\beta-\delta+1); \\ &\quad \alpha-\delta+1, \beta-\delta+1, 2-\delta, \gamma; 1-z), \end{aligned} \quad (3.31)$$

so muss also gelten

$$y_{g/u}(\tau) = A \tilde{y}_1(\tau) + B \tilde{y}_2(\tau). \quad (3.32)$$

Die geschlängelten Lösungen \tilde{y}_i sind einfach in Analogie zu (3.27) und (3.28) gegeben durch

$$\tilde{y}_i(\tau) = \frac{\cosh^2(\tau)}{1 + s \cosh(2\tau)} \cosh(\tau)^{-\kappa} \tilde{H}l_i(z(\tau)). \quad (3.33)$$

Wegen $1 - \delta = -2\eta - 2 = -\kappa$

$$\Rightarrow \lim_{\tau \rightarrow \infty} \tilde{H}l_2(\tau) \propto \cosh^{2\kappa}(\tau) \quad (3.34)$$

muss nun aber \tilde{y}_2 als Lösung ausgeschlossen werden, da diese gänzlich die Normierbarkeit zerstören würde. Es muss also $B = 0$ gelten und damit $y_{g/u} \propto \tilde{y}_1$ sein. \tilde{y}_1 hat offenbar das korrekte Verhalten für $z(\tau) \rightarrow 1$.

Im Weiteren hilft nun folgender Satz:

Zwei beliebige Lösungen $x_1(\tau) \neq 0$ und $x_2(\tau) \neq 0$ derselben Differentialgleichung 2. Ordnung sind genau dann linear abhängig, wenn für ein beliebiges $\tau_0 \in \mathcal{I}$

$$W[x_1, x_2]_{\tau_0} = x_1(\tau_0)x_2'(\tau_0) - x_1'(\tau_0)x_2(\tau_0) = 0 \quad (3.35)$$

gilt. [10] \mathcal{I} ist dabei ein geeignetes Intervall.

Die beiden Lösungen der Differentialgleichung sind hier $y_{g/u}$ und \tilde{y}_1 . Es wird also die Wronski-Determinante $W[y_{g/u}, \tilde{y}_1]_{\tau_0}$ gebildet und jene Werte $\kappa(\lambda_i)$ gesucht, für die diese verschwindet. Da die Heun-Funktionen in Maple implementiert sind, wurden dort für gegebene s -Werte die Nullstellen von (3.35) numerisch berechnet. Als konkreten Wert für z_0 habe ich in Maple $\frac{1}{2}$ gewählt. Die Nullstellen sind gerade die Eigenwerte der symmetrischen/antisymmetrischen Eigenfunktionen. Für die Beispielwerte $s = 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{10}$ und $\frac{1}{1000000}$ sind die numerischen Werte mit absolutem Fehler $\Delta\lambda$ nachfolgend tabelliert.

λ_0	0
λ_1	3
$\prod_n \lambda_n$	3

Tabelle 3.1: Eigenwerte zu $s = 1$ (analytisch lösbar)

		$10^6 \Delta\lambda$
λ_0	0	—
λ_1	2.40473175	7.63
λ_2	3.85814780	12.17
$\prod_n \lambda_n$	9.277810511	

Tabelle 3.2: Eigenwerte zu $s = \frac{1}{2}$

		$10^6 \Delta\lambda$
λ_0	0	—
λ_1	1.20001602	3.81
λ_2	2.78264399	10.68
λ_3	3.87742107	18.58
$\prod_n \lambda_n$	12.947551772	

Tabelle 3.3: Eigenwerte zu $s = \frac{1}{10}$

3.2.2 Phasenverschiebungen

Das gleiche Verfahren kann auch dazu benutzt werden um die Phasen zu bestimmen. Für $\lambda > 4$ setzen wir $\kappa = ik$. Wie zuvor können die geraden/ungeraden Eigenfunktio-

		$10^6 \Delta \lambda$
λ_0	0	—
λ_1	0.05367879	0.23
λ_2	0.21041278	0.94
λ_3	0.46025985	1.81
λ_4	0.79217463	3.38
λ_5	1.19565218	3.06
λ_6	1.66023889	5.35
λ_7	2.17412342	8.93
λ_8	2.72174570	6.97
λ_9	3, 27818304	9.75
λ_{10}	3.78834295	11.01
$\prod_n \lambda_n$	0.60074341	

Tabelle 3.4: Eigenwerte zu $s = \frac{1}{1000000}$

nen als Linearkombination der Lösungen \tilde{y}_1 und \tilde{y}_2 geschrieben werden. (vgl. (3.32))

$$\begin{aligned}
y_{g/u}(\tau) &= A \tilde{y}_1(\tau) + B \tilde{y}_2(\tau) \\
&= \frac{\cosh^2(\tau)}{1 + s \cdot \cosh(2\tau)} \\
&\quad \times \left[A \cdot \cosh(\tau)^{-ik} Hl(1 - a, -q + \alpha\beta; \alpha, \beta, \delta, \gamma; 1 - \tanh^2(\tau)) \right. \\
&\quad \left. + B \cdot \cosh(\tau)^{+ik} Hl(1 - a, -q + (\delta - 1)\gamma a + (\alpha - \delta + 1)(\beta - \delta + 1); \right. \\
&\quad \left. \beta - \delta + 1, \alpha - \delta + 1, 2 - \delta, \gamma; 1 - \tanh^2(\tau)) \right] \quad (3.36)
\end{aligned}$$

Im Unterschied zum Fall $\lambda < 4$ muss jetzt aber \tilde{y}_2 nicht mehr verworfen werden. Da $y_{g/u}$ nun gerade/ungerade und reell ist und \tilde{y}_1 und \tilde{y}_2 jetzt konjugiert komplex zueinander sind, müssen die Koeffizienten die Relation $A = B^*$ erfüllen. Schreibt man $B_g = r_g e^{i\tilde{\delta}_g}$ bzw. $B_u = -ir_u e^{i\tilde{\delta}_u}$, so ist (3.36) also von der Form

$$y_{g/u}(\tau) = \begin{cases} r_g \left(e^{-i\tilde{\delta}_g} \tilde{y}_1(\tau) + e^{i\tilde{\delta}_g} \tilde{y}_1^*(\tau) \right) \\ ir_u \left(e^{-i\tilde{\delta}_u} \tilde{y}_1(\tau) - e^{i\tilde{\delta}_u} \tilde{y}_1^*(\tau) \right) \end{cases} \quad (3.37)$$

Asymptotisch verhält sich dieser Ausdruck dann wie

$$y_{g/u}(\tau) \propto \begin{cases} \cos \left(k |\tau| + \tilde{\delta}_g - k \ln 2 \right) \\ \sin \left(k |\tau| + \tilde{\delta}_u - k \ln 2 \right) \end{cases} \quad (3.38)$$

Die gesuchten Phasenverschiebungen sind damit

$$\delta_{g/u} = \tilde{\delta}_{g/u} - k \ln 2. \quad (3.39)$$

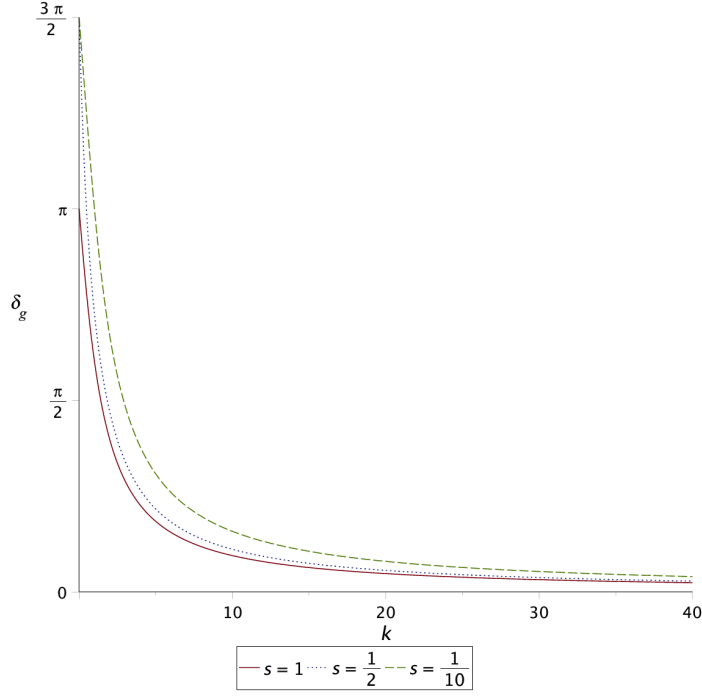


Abbildung 3.3: gerade Phasenverschiebungen

Auf der anderen Seite kann mit Hilfe der Wronski-Determinante, angewandt auf $y_{g/u}$ und $A\tilde{y}_1(\tau) + B\tilde{y}_2(\tau)$, $y_{g/u}$ auch ganz allgemein dargestellt werden als

$$\begin{aligned} y_{g/u}(\tau) &= i\tilde{A} \left[W[y_{g/u}, \tilde{y}_2]_{\tau_0} \tilde{y}_1(\tau) - W[y_{g/u}, \tilde{y}_1]_{\tau_0} \tilde{y}_2(\tau) \right] \\ &= i\tilde{A} \left[W^*[y_{g/u}, \tilde{y}_1]_{\tau_0} \tilde{y}_1(\tau) - W[y_{g/u}, \tilde{y}_1]_{\tau_0} \tilde{y}_1^*(\tau) \right] \end{aligned} \quad (3.40)$$

mit einer reellen Konstanten \tilde{A} , damit die rechte Seite reell ist.

Dabei wurde u.a. $W[y_{g/u}, \tilde{y}_2]_{\tau_0} = (W[y_g, \tilde{y}_1]_{\tau_0})^*$ benutzt. Ein Vergleich mit (3.37) zeigt nun, dass $W[y_{g/u}, \tilde{y}_1]_{\tau_0}$ und $e^{i\tilde{\delta}_{g/u}}$ folgendermaßen zusammenhängen:

$$W[y_g, \tilde{y}_1]_{\tau_0} = \pm i\tilde{r}_g e^{i\tilde{\delta}_g} \quad (3.41)$$

$$W[y_u, \tilde{y}_1]_{\tau_0} = \pm \tilde{r}_u e^{i\tilde{\delta}_u}. \quad (3.42)$$

Die Wronski-Determinanten können nun numerisch implementiert werden. Dies geschieht auch wieder mittels der bereits in Maple integrierten Heun-Funktionen separat für die geraden und ungeraden Phasenverschiebungen. Das Ergebnis für δ_g ist in Abbildung 3.3 zu sehen und für δ_u in 3.4.

Hat man die Phasen erst einmal, kann auch schon der Kontinuumsbeitrag zur Fluktuationsdeterminante berechnet werden. Zur einfacheren numerischen Handhabung wurde

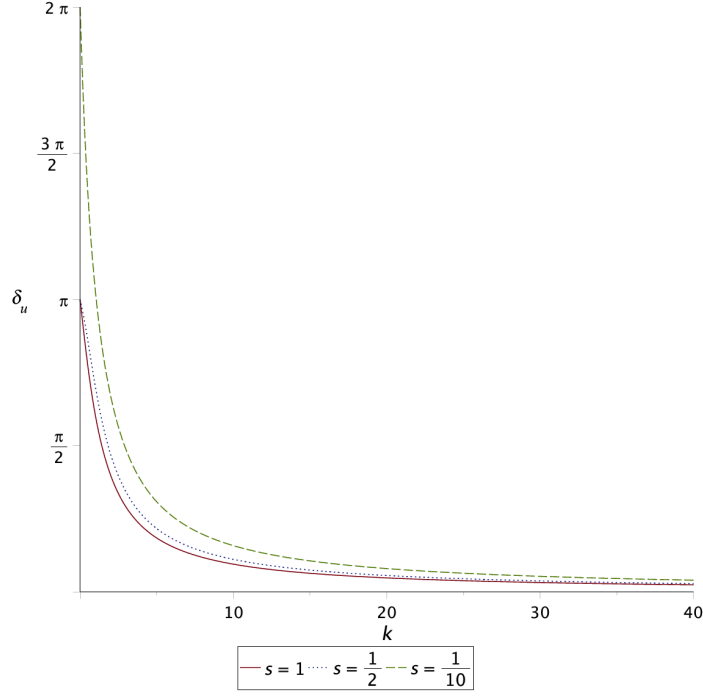


Abbildung 3.4: ungerade Phasenverschiebungen

(2.76) einmal partiell integriert und der Vorfaktor in den Exponenten gezogen.

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod_n \lambda_n} \right|_{\text{kont}} &= \exp \left[\frac{1}{2} \ln 4 - \frac{\delta_g(k) + \delta_u(k)}{\pi} \ln(k^2 + 4) \right] \Big|_0^\infty \\
 &\quad + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \frac{\delta_g(k) + \delta_u(k)}{k^2 + 4} 2k \Big] \\
 &= \exp \left[M \ln 4 + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \frac{\delta_g(k) + \delta_u(k)}{k^2 + 4} 2k \right] \quad (3.43)
 \end{aligned}$$

M ist die Anzahl der gebundenen Zustände (Levinson-Theorem).

Die Ergebnisse der numerischen Integration sind mit absolutem Fehler Δ , der numerisch ermittelt wurde, in Tabelle 3.5 logarithmisch aufgeführt. Im Rahmen der nu-

	$\ln \left(\left. \frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod_n \lambda_n} \right _{\text{kont}} \right)$	Δ
$s = 1$	$\ln(9 \cdot 16)$	—
$s = \frac{1}{2}$	6.7513979	0.001
$s = \frac{1}{10}$	9.2322395	0.001
$s = \frac{1}{1000000}$	27.2019858	0.1

Tabelle 3.5: Kontinuumsbeitrag zur Fluktuationsdeterminante für verschiedene s
 merischen Genauigkeit konnten allerdings nur k -Werte abhängig von s kleiner einer

gegebenen Schranke bestimmt werden. Auf Kosten von Rechenleistung konnte diese Grenze weiter nach oben verschoben werden. Bei einer 32-Bit Darstellung in Maple konnte die Integration für $s = \frac{1}{2}$ bis etwa $k = 80$ durchgeführt werden. Bei $s = \frac{1}{10}$ war dies nur noch bis $k = 40$ möglich. Für das verbleibende Intervall musste daher auf die Bornsche Näherung der Streulösungen zurückgegriffen werden. Die (eindimensionale) Lippmann-Schwinger Gleichung für die dimensionslose Form

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + U(\tau)\right) y(\tau) = k^2 y(\tau) \quad (3.44)$$

lautet

$$y_k(\tau) = e^{ik\tau} - \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{ik|\tau-\tau'|} U(\tau') y_k(\tau') . \quad (3.45)$$

Nach einmaliger Iteration erhält man für die Asymptotik in der Bornschen Näherung

$$y_k^{\text{asym}}(\tau) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{ik\tau} \left(1 - \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' U(\tau')\right) . \quad (3.46)$$

An dieser Darstellung kann man das Verhalten der Phase für große k direkt ablesen.

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (\delta_g + \delta_u)(k) = \arctan \left(-\frac{1}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' U(\tau') \right) \quad (3.47)$$

Für $U(\tau)$ wurde

$$U(\tau) = -\frac{12}{1 + s \cosh(2\tau)} + \frac{8(1 - s^2)}{(1 + s \cosh(2\tau))^2} \quad (3.48)$$

verwendet. Der Parameter $k = \sqrt{\lambda - 4}$ hat also die gleiche Bedeutung wie der bei der Lösung der Differentialgleichung auftretende.

Für sehr kleine s sei vielleicht noch zu erwähnen, dass die numerische Bestimmung des Kontinuumbeitrags zu starken Problemen geführt hat, weshalb die exakten Phasen in obigen Abbildungen auch nicht dargestellt werden konnten. Exemplarisch soll hierfür der Wert $s = \frac{1}{1000000}$ dienen. Für Werte in dieser Größenordnung lassen sich die Phasen nicht mehr ohne Weiteres bestimmen, da die numerischen Ungenauigkeiten exponentiell zunehmen. Eine Möglichkeit diesem Problem zu begegnen, ist die Annäherung des Potentials an einen Topf. Betrachtet man Abbildung 2.5, so fällt einem für zunehmend kleinere s -Werte die Annäherung des Potentials an einen Topf auf. Man könnte daher versuchen hier die Phasen des Topfes zu verwenden. Es ist allerdings zu beachten, dass ein Topf der Breite $L = 2a$ und Tiefe 4 (0 bis 4) keine Nullmode hat. Dies macht sich wegen Levinsons Theorem in den Streuphasen bemerkbar. Daher muss man ein Potential verwenden, welches bis auf die Nullmode exakt die gleichen Energieeigenwerte besitzt. Ein solches Potential V_+'' nennt man auch supersymmetrisches Partnerpotential zu unserem Potential V'' . In [8] oder [9] ist eine Methode angegeben dieses zu

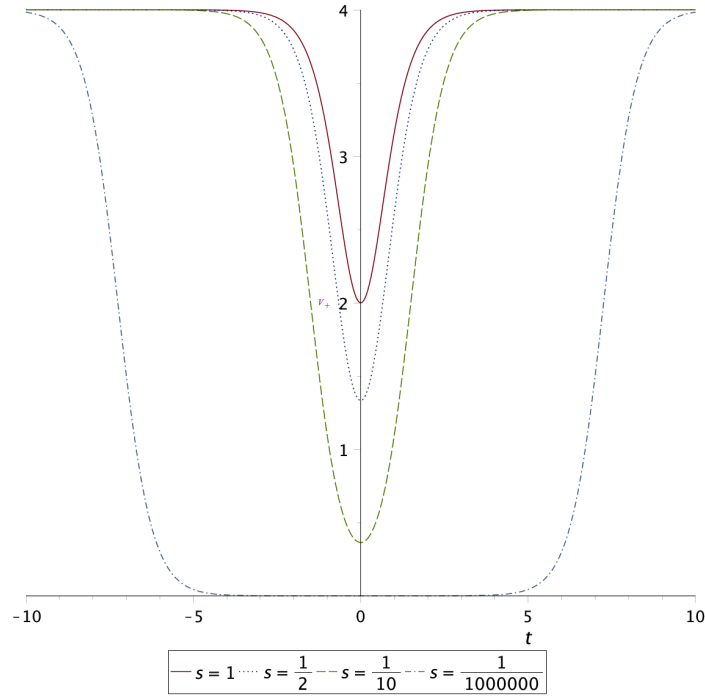


Abbildung 3.5: Superpotential $V_+''(\tau)$ für die unterschiedlichen s -Werte

bestimmen. Hier soll es allerdings für die weiteren Zwecke nur angegeben werden. Das supersymmetrische Partnerpotential zu (2.51) ist

$$V_+''(\tau) = 4 - \frac{4}{1 + s \cosh(2\tau)}, \quad (3.49)$$

wobei wie in (3.7) das Dimensionslose verwendet wurde. In 3.5 ist dies für die unterschiedlichen s abgebildet.

Der entscheidende Schritt ist nun folgende Beobachtung:

$$\begin{aligned}
 \frac{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + 4 \right)}{\text{Det}' \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(\tau) \right)} &= \frac{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + 4 \right)}{\text{Det}' \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V_1''(\tau) \right)} \frac{\text{Det}' \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V_1''(\tau) \right)}{\text{Det}' \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(\tau) \right)} \\
 &= \underbrace{\frac{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + 4 \right)}{\text{Det}' \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V_1''(\tau) \right)}}_{48 \text{ (nach 3.18)}} \frac{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V_{1,+}''(\tau) \right)}{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V_+''(\tau) \right)} \\
 &= 48 \cdot \underbrace{\frac{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V_{1,+}''(\tau) \right)}{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + 4 \right)}}_{\frac{1}{3} \text{ (nach 3.16)}} \frac{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + 4 \right)}{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V_+''(\tau) \right)}
 \end{aligned}$$

$$= 16 \cdot \frac{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + 4 \right)}{\text{Det} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''_+(\tau) \right)}. \quad (3.50)$$

Der Schritt von der 1. zur 2. Zeile kann z.B. mittels Gelfand-Yaglom überprüft werden. Der Index 1 deutet dabei den Wert der Determinante für $s = 1$ an. $V''_{1,+}(\tau)$ ist auch vom Pöschl-Teller Typ mit den Parametern $\omega = 2$ und $l = 1$. An dieser Stelle kann zur Bestimmung des Kontinuumsbeitrags nun der endliche Potentialtopf verwendet werden. Für a wählen wir den Punkt, an dem die Steigung extremal wird.

$$a = \frac{1}{2} \text{arcosh} \left(\frac{\sqrt{8s^2 + 1} + 1}{2s} \right) \quad (3.51)$$

Für $s = \frac{1}{1000000}$ bedeutet dies $a \approx 7.25433$. Die Summe der geraden und ungeraden Phasenverschiebungen $\delta(k) = \delta_g(k) + \delta_u(k)$ des endlichen Potentialstopfs sind bekannt. [10]

$$\delta(k) = -2ka + \arctan \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{k^2 + 4}}{k} + \frac{k}{\sqrt{k^2 + 4}} \right) \tan \left(2a\sqrt{k^2 + 4} \right) \right] \quad (3.52)$$

Die numerische Integration mittels Formel (2.76) unter Berücksichtigung des Faktors 16 aus (3.50) lieferte das Ergebnis in Tabelle 3.5 mit dem Fehler der Größenordnung $\Delta \approx 0.1$. Schließlich multiplizieren wir noch die diskreten Eigenwerte mit dem Kontinuumsbeitrag. Eine Gegenüberstellung mit den exakten Ergebnissen aus (3.4) kann man Tabelle 3.6 entnehmen.

	Eigenwertprodukte	Δ	Gelfand-Yaglom
$s = 1$	$\ln 48$	—	$\ln 48$
$s = \frac{1}{2}$	4.523772289	0.001	4.52380
$s = \frac{1}{10}$	6.671332737	0.001	6.67042
$s = \frac{1}{1000000}$	27.7115731	0.1	27.8003

Tabelle 3.6: numerischer Wert der Fluktuationsdeterminante $\ln \left(\frac{\prod_n \lambda_n^0}{\prod_n \lambda_n} \right)$ im Vergleich

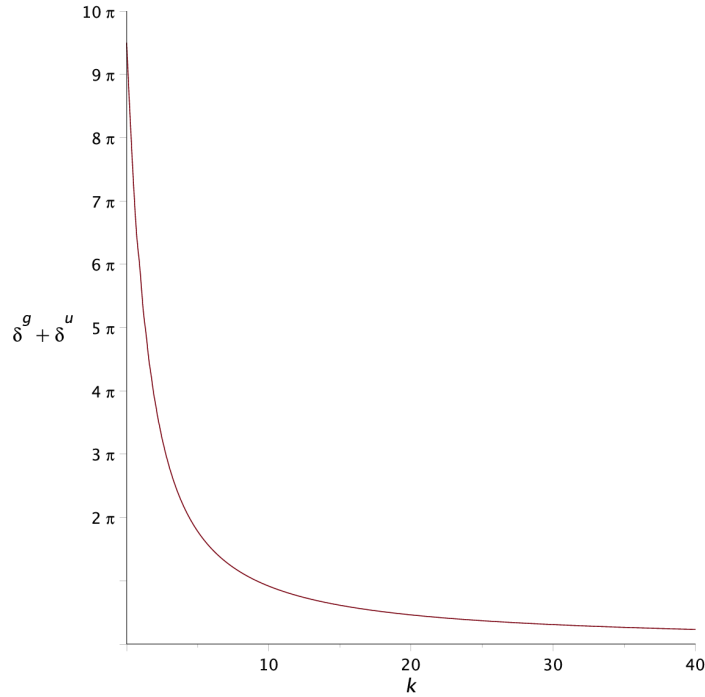


Abbildung 3.6: Mittels Potentialtopf genäherte Phase $(\delta_g + \delta_u)$ für $s = \frac{1}{1000000}$

3.3 Energieaufspaltung

Für die gesuchte Energieaufspaltung braucht man nach (2.45) nur noch (2.97) mit A aus (3.2).

$$\begin{aligned}
 \Delta E &= 2\hbar\mathcal{K} e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{kl}]} \\
 &= 2\hbar \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{\omega\sqrt{1-s^2}}{\beta s} e^{-(n+1)[\operatorname{arccosh}(\frac{1}{s}) - \sqrt{1-s^2}]} \\
 &= 2\hbar \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} \frac{\sqrt{1-s^2}}{\beta s} \omega^{\frac{3}{2}} \left(\frac{s}{1 + \sqrt{1-s^2}} \right)^{n+1} e^{(n+1)\sqrt{1-s^2}} \\
 &= 2\hbar \underbrace{\frac{\beta^2\hbar}{2m} \frac{4\sqrt{2}(1-s^2)^{\frac{5}{4}}}{s\sqrt{\pi}}}_{\mathcal{K}} (n+1)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{s}{1 + \sqrt{1-s^2}} \right)^{n+1} e^{(n+1)\sqrt{1-s^2}} \quad (3.53)
 \end{aligned}$$

Ein Vergleich mit (2.116) zeigt die Äquivalenz der WKB- und Pfadintegralnäherung. Wie aber schaut es im direkten Vergleich mit den exakten Ergebnissen aus. In [1] wurde für das quasi-exakt lösbare Potential die Schrödingergleichung aufgestellt und für verschiedene n in Abhängigkeit vom Parameter s eine endliche Anzahl der niedrigsten Energieeigenwerte bestimmt. Da das Potential für $s \rightarrow 1$ offensichtlich seinen Doppelmuldencharakter verliert, wird die hier erhaltene Näherungslösung für große s höchstwahrscheinlich zusammenbrechen. Daher betrachten wir vornehmlich den Grenzfall $s \rightarrow 0$. Hierfür sind in [1] die Fälle $n = 1$ bis 5 aufgelistet. Die Bestimmung der

Eigenwerte führt über ein charakteristisches Polynom zunehmenden Grades. Bei $n = 4$ und 5 betrug der Grad bereits 3 . Für diese Fälle ist es noch möglich mittels der Cardanischen Formeln die exakten Ergebnisse anzugeben. Allgemein beträgt der Grad des Polynoms allerdings $\frac{n+1}{2}$ für ungerade n und $\frac{n+2}{2}$ für gerade n . Bei weit höheren Werten für n sind also auch hier leider nur noch numerische Lösungen möglich. Für einen symbolischen Ausdruck wie er in Tabelle (3.7) angegeben ist, liegt das numerisch handhabbare für Desktop-PCs in etwa bei $n \approx 300$. Wünschenswert wäre es also, eine Methode zu finden auch diesen asymptotischen Bereich möglichst exakt abzudecken. Genau das leistet die Pfadintegral- bzw. WKB-Methode. Beide fallen in den Bereich der asymptotischen Analyse, d.h. beide stellen eine asymptotische Näherung dar. Für das unten definierte Verhältnis σ_n der beiden Korrekturfaktoren bedeutet dies

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sigma_n = 1. \quad (3.54)$$

Dies macht es so lukrativ, diese Methode so genau zu untersuchen, um zu überprüfen, wie es um die Güte der Näherung für solche n überhaupt steht und wie das Konvergenzverhalten aussieht. Die berechneten Ergebnisse der Energieaufspaltungen für kleine s in den Fällen $n = 1$ bis 7 , 21 , 61 , 101 , 121 , 141 , 161 und 201 sind in 3.7 tabelliert. In allen Fällen konnte ein exakter rationaler Ausdruck angegeben werden. Ab $n = 21$ wurden aber zugunsten der Übersichtlichkeit die numerischen Werte angegeben, da die exakten Ausdrücke zuviel Platz einnehmen.

$$\Delta E = \frac{\beta^2 \hbar^2}{2m} \Delta \epsilon \quad (3.55)$$

ist dabei der Zusammenhang der numerischen Größe ϵ zur Energie E für die in [1] das charakteristische Polynom aufgestellt wurde. Die Fälle $n = 1$ bis 5 wurden dort auch schon abgehandelt und die exakten Ergebnisse angegeben. Lösungen für höhere n wurden von mir in Maple [13] implementiert und in führender Ordnung, d.h. $s \rightarrow 0$, ausgegeben. Mittels der exakten Werte wurde in [1] auch schon eine Abschätzung für den Faktor \mathcal{K} durch Umstellung von Gleichung (3.53)

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_\varrho(s) &= \frac{\Delta E^{\text{exakt}}}{2\hbar} \left(\frac{1 + \sqrt{1-s^2}}{s} \right)^{n+1} e^{-(n+1)\sqrt{1-s^2}} \\ &= \frac{\beta^2 \hbar}{2m} \frac{\Delta \epsilon^{\text{exakt}}}{2} \left(\frac{1 + \sqrt{1-s^2}}{s} \right)^{n+1} e^{-(n+1)\sqrt{1-s^2}} \\ &= \frac{\beta^2 \hbar}{2m} \varrho_n(s) \end{aligned} \quad (3.56)$$

getroffen. Den exakten Wert \mathcal{K} entnimmt man direkt (3.53).

$$\mathcal{K}(s) = \frac{\beta^2 \hbar}{2m} \frac{4\sqrt{2}(1-s^2)^{\frac{5}{4}}}{s\sqrt{\pi}} (n+1)^{\frac{3}{2}} \quad (3.57)$$

$$= \frac{\beta^2 \hbar}{2m} \kappa_n(s) \quad (3.58)$$

Um diese beiden Größen besser zu vergleichen, definieren wir nun das Verhältnis

$$\sigma_n = \frac{\kappa_n(s)}{\varrho_n(s)} = \frac{\Delta E}{\Delta E^{\text{exakt}}} = \frac{2\kappa_n(s)}{\Delta \epsilon_n^{\text{exakt}}} \left(\frac{s}{1 + \sqrt{1 - s^2}} \right)^{n+1} e^{(n+1)\sqrt{1-s^2}}. \quad (3.59)$$

In Tabelle 3.8 ist für die verschiedenen n der Wert tabelliert. Wie bereits erwähnt wird mit zunehmendem n die Näherung immer besser.

	$\Delta\epsilon_n^{\text{exakt}}$	$\varrho_n(s)$	$\kappa_n(s)$
$n = 1$	$8 s$	$\frac{16}{e^2} \frac{1}{s}$	$\frac{16}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{s}$
$n = 2$	$36 s^2 + \mathcal{O}(s^4)$	$\frac{16 \cdot 9}{e^3} \frac{1}{s}$	$\frac{12\sqrt{6}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{s}$
$n = 3$	$96 s^3 + \mathcal{O}(s^5)$	$\frac{256 \cdot 3}{e^4} \frac{1}{s}$	$\frac{32\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{s}$
$n = 4$	$\frac{625}{3} s^4 + \mathcal{O}(s^6)$	$\frac{16 \cdot 625}{3 \cdot e^5} \frac{1}{s}$	$\frac{20\sqrt{10}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{s}$
$n = 5$	$405 s^5 + \mathcal{O}(s^7)$	$\frac{160 \cdot 81}{e^6} \frac{1}{s}$	$\frac{48\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{s}$
$n = 6$	$\frac{117649}{160} s^6 + \mathcal{O}(s^8)$	$\frac{2 \cdot 7^6}{5 \cdot e^7} \frac{1}{s}$	$\frac{28\sqrt{14}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{s}$
$n = 7$	$\frac{57344}{45} s^7 + \mathcal{O}(s^9)$	$\frac{2^{20} \cdot 7}{45 \cdot e^8} \frac{1}{s}$	$\frac{128}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{s}$
$n = 21$	$5.110 \cdot 10^5 s^{21} + \mathcal{O}(s^{23})$	$298.939 \frac{1}{s}$	$329.332 \frac{1}{s}$
$n = 61$	$5.512 \cdot 10^{11} s^{61} + \mathcal{O}(s^{63})$	$1506.191 \frac{1}{s}$	$1558.072 \frac{1}{s}$
$n = 101$	$2.524 \cdot 10^{17} s^{101} + \mathcal{O}(s^{103})$	$3220.979 \frac{1}{s}$	$3287.761 \frac{1}{s}$
$n = 121$	$1.533 \cdot 10^{20} s^{121} + \mathcal{O}(s^{123})$	$4227.603 \frac{1}{s}$	$4300.706 \frac{1}{s}$
$n = 141$	$8.925 \cdot 10^{22} s^{141} + \mathcal{O}(s^{143})$	$5321.563 \frac{1}{s}$	$5400.483 \frac{1}{s}$
$n = 161$	$5.041 \cdot 10^{25} s^{161} + \mathcal{O}(s^{163})$	$6496.372 \frac{1}{s}$	$6580.707 \frac{1}{s}$
$n = 201$	$1.507 \cdot 10^{31} s^{201} + \mathcal{O}(s^{203})$	$9068.539 \frac{1}{s}$	$9162.777 \frac{1}{s}$

Tabelle 3.7: Grundzustandsenergieaufspaltung des Razavypotentials (2.47) für die Fälle $n = 1$ bis 7, 21, 61, 101, 121, 141, 161 und 201 im Grenzfall $s \rightarrow 0$ nach der exakten Lösung der Schrödinger-Gleichung. $\varrho_n(s)$ ist die Abschätzung des Korrekturfaktors und $\kappa_n(s)$ der exakte Korrekturfaktor

	σ_n
$n = 1$	4.169
$n = 2$	2.313
$n = 3$	1.815
$n = 4$	1.589
$n = 5$	1.460
$n = 6$	1.377
$n = 7$	1.320
$n = 21$	1.102
$n = 61$	1.034
$n = 101$	1.021
$n = 121$	1.017
$n = 141$	1.015
$n = 161$	1.013
$n = 201$	1.010

Tabelle 3.8: Das Verhältnis σ_n des exakten Werts κ_n zur Abschätzung ϱ_n im Limes $s \rightarrow 0$

4 Korrekturen höherer Ordnung

Bei der Berechnung der Energieaufspaltung, insbesondere bei der Auswertung des Pfadintegrals, wurde von der Sattelpunktsnäherung Gebrauch gemacht. Bei dieser wurde die Wirkung im Exponenten bis zur quadratischen Ordnung um das Minimum $x_{\text{kl}}(t)$ entwickelt, wodurch die entstandenen gaußschen Integrale exakt gelöst werden konnten. Diese sogenannte semiklassische Näherung liefert gute Ergebnisse für kleine Kopplungskonstanten $g = \frac{1}{n+1}$. Falls einem das noch nicht genug ist, muss man die Entwicklung von $\mathcal{S}_E[x]$ noch höher treiben. Details hierzu inklusive Beispielrechnungen zum anharmonischen Oszillator sind in [4] zu finden.

4.1 Korrelations-Funktionen

Mittels Funktionalableitung erhält man die Reihenentwicklung ab der 3. Ordnung

$$\mathcal{V}_{\text{ww}} \equiv \sum_{k=3}^{\infty} \frac{1}{k!} \int dt V^{(k)}(x_{\text{kl}}(t)) y^k(t), \quad (4.1)$$

wobei wir diese mit \mathcal{V}_{ww} abgekürzt haben, was impliziert, dass wir die höheren Ordnungsbeiträge als Wechselwirkung betrachten. Offenbar fällt der kinetische Term weg, denn dieser ist quadratisch in $x(t)$. Auch haben wir wieder den Variationspfad mit $y(t) = x(t) - x_{\text{kl}}(t)$ bezeichnet. Im Weiteren, wenn nicht anders angegeben, wird dann allerdings auch wieder die Bezeichnung $x(t)$ verwendet. Das komplette Pfadintegral erhält man dann aus (2.8) analog zu (2.20)

$$\mathcal{K}_E \left(\pm a, \frac{T}{2}; a, -\frac{T}{2} \right) = e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}]} \int \mathcal{D}x \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) - \frac{1}{\hbar} \mathcal{V}_{\text{ww}} \right] \quad (4.2)$$

mit $\hat{\mathcal{M}} \equiv -\frac{\partial^2}{\partial t^2} + m^{-1}V''(x_{\text{kl}})$. Eine exakte Lösung dieses Integrals ist allerdings in zweierlei Hinsicht ausgeschlossen. Zum einen sind die Integrale nicht in geschlossener Form darstellbar und zum anderen, selbst wenn man nur die nächste höhere Ordnung $x^3(t)$ mitnehmen würde, wäre das Integral streng divergent, denn $x^3(t)$ ist ungerade und divergiert an der unteren Grenze, obwohl das Pfadintegral für $V(x)$ wohldefiniert ist. Dies ist wiederum eine Folge der naiven Reihenentwicklung. Tatsächlich ist es allerdings möglich den Integrand $e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{V}_{\text{ww}}}$ in eine Reihe zu entwickeln

$$e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{V}_{\text{ww}}} \approx 1 - \frac{1}{\hbar} \mathcal{V}_{\text{ww}} + \frac{1}{2\hbar^2} \mathcal{V}_{\text{ww}}^2 + \mathcal{O}(\mathcal{V}_{\text{ww}}^3) \quad (4.3)$$

und brauchbare Ergebnisse zu erzielen. Hierbei handelt es sich übrigens auch wieder um eine asymptotische Reihe. Beschränkt man sich auf die in \mathcal{V}_{ww} linearen und quadratischen Terme, so werden genug Terme für die nächst höhere Ordnung erfasst, die sogenannte 2-Loop-Ordnung. (4.2) nimmt dann folgende Gestalt an

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_E \left(\pm a, \frac{T}{2}; a, -\frac{T}{2} \right) &= e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}]} \left\{ \mathcal{F}(T) - \frac{1}{\hbar} \sum_{k=3}^{\infty} \frac{1}{k!} \int dt V^{(k)}(x_{\text{kl}}(t)) \right. \\ &\times \int \mathcal{D}x x^k(t) \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) \right] + \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{k,k'=3}^{\infty} \frac{1}{k! k'} \\ &\times \int dt V^{(k)}(x_{\text{kl}}(t)) \int dt' V^{(k')}(x_{\text{kl}}(t')) \int \mathcal{D}x x^k(t) x^{k'}(t') \\ &\times \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) \right] \Bigg\}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Der erste Term ist offenbar gerade das Pfadintegral ohne Wechselwirkung - der Fluktuationsfaktor - während die Hinteren die Korrekturen hierzu darstellen. Wie wir bereits wissen, mussten wir bei der Normalmodenentwicklung der Variationspfade die c_0 -Integration auf die Variable t_c transformieren. Anschaulich erfolgt damit auch keine Integration in Richtung der Nullmode mehr. Es wird also nur über alle Pfade integriert, die orthogonal zur Nullmode sind. Diesen Funktionenraum bezeichnen wir mit \mathcal{H}^\perp . Bei der Transformation selbst trat die Jacobiante (2.32) auf, womit sich obiges Integrationsmaß $\mathcal{D}x$ als

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}x &= \int dt_c \int \mathcal{D}'c \left| \frac{\partial c_0}{\partial t_c} \right| \\ &= \int dt_c \int \mathcal{D}'x \left| \frac{\partial c_0}{\partial t_c} \right| \end{aligned} \quad (4.5)$$

schreibt. Auch hier deutet der Strich an, dass die Integration vollständig in \mathcal{H}^\perp ausgeführt wird. Die Jacobi-Determinante können wir nun ein wenig umschreiben

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial c_0}{\partial t_c} \right| &= \sqrt{\mathcal{A}_{\text{kl}}} \left[1 + \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} c_n r_n \right] \\ &= \sqrt{\mathcal{A}_{\text{kl}}} \left[1 + \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_{-\infty}^{\infty} dt y_0(t) \dot{y}_n(t) \right] \\ &= \sqrt{\mathcal{A}_{\text{kl}}} \left[1 - \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \dot{y}_0(t) \sum_{n=0}^{\infty} c_n y_n(t) \right] \\ &= \sqrt{\mathcal{A}_{\text{kl}}} \left[1 - \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \dot{y}_0(t) x(t) \right], \end{aligned} \quad (4.6)$$

mit den Variationspfaden $x(t)$. Im vorletzten Schritt wurde einmal partiell integriert und ausgenutzt, dass das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} dt \dot{y}_0 y_0$ verschwindet. Setzen wir dies in das

Pfadintegral in (4.4) ein und ziehen den numerischen Faktor $\sqrt{\mathcal{A}_{\text{kl}}} \int dt_c$ in das Integrationsmaß $\mathcal{D}'x$ hinein, so erhält man für den zweiten Term

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}'x \left[1 - \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \int dt' \dot{y}_0(t') x(t') \right] x^k(t) \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) \right] \\ &= \int \mathcal{D}'x x^k(t) \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) \right] - \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \int dt' \dot{y}_0(t') \\ & \quad \times \int \mathcal{D}'x x(t') x^k(t) \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) \right] \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$= \mathcal{F}(T) \left\{ \langle x^k(t) \rangle - \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \int dt' \dot{y}_0(t') \langle x(t') x^k(t) \rangle \right\} \quad (4.8)$$

und für den Dritten

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}'x \left[1 - \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \int dt'' \dot{y}_0(t'') x(t'') \right] x^k(t) x^{k'}(t') \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) \right] \\ &= \int \mathcal{D}'x x^k(t) x^{k'}(t') \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) \right] - \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \int dt'' \dot{y}_0(t'') \\ & \quad \times \int \mathcal{D}'x x(t'') x^k(t) x^{k'}(t') \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$= \mathcal{F}(T) \left\{ \langle x^k(t) x^{k'}(t') \rangle - \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \int dt'' \dot{y}_0(t'') \langle x(t'') x^k(t) x^{k'}(t') \rangle \right\}. \quad (4.10)$$

Dabei haben wir die Korrelations-Funktion

$$\langle x(t_1) \dots x(t_n) \rangle = \frac{1}{\mathcal{F}(T)} \int \mathcal{D}'x x(t_1) \dots x(t_n) \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) \right] \quad (4.11)$$

gleich mitdefiniert. Sie ist im Wesentlichen das Analogon zum n -ten Moment in der Statistischen Physik. Für die Übergangsamplitude (4.4) erhält man in dieser Notation dann

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_E &= e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_E[x_{\text{kl}}]} \mathcal{F}(T) \left\{ 1 - \frac{1}{\hbar} \sum_{k=3}^{\infty} \frac{1}{k!} \int dt V^{(k)}(x_{\text{kl}}(t)) \left[\langle x^k(t) \rangle - \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \right. \right. \\ & \quad \times \left. \int dt' \dot{y}_0(t') \langle x(t') x^k(t) \rangle \right] + \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{k,k'=3}^{\infty} \frac{1}{k! k'!} \int dt V^{(k)}(x_{\text{kl}}(t)) \\ & \quad \times \int dt' V^{(k')}(x_{\text{kl}}(t')) \left[\langle x^k(t) x^{k'}(t') \rangle - \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \int dt'' \dot{y}_0(t'') \right. \\ & \quad \times \left. \langle x(t'') x^k(t) x^{k'}(t') \rangle \right] \left. \right\}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

4.2 Pfadintegral mit Quellterm und Greensfunktion

Für den wohl einfachsten Weg die Momente zu berechnen, führt man einen zusätzlichen Quellterm in dem gaußschen Pfadintegral

$$\mathcal{F}_j(T) \equiv \int \mathcal{D}'x \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) + \int dt j(t)x(t) \right] \quad (4.13)$$

ein. Mit der obigen Konvention den numerischen Faktor $\sqrt{\mathcal{A}_{\text{kl}}} \int dt_c$ in $\mathcal{D}'x$ reinzuziehen gilt offensichtlich $\mathcal{F}_j(T)|_{j=0} = \mathcal{F}(T)$, denn im ursprünglichen Fluktuationsfaktor verschwinden die in c_n linearen Terme der Jacobiante bei der Ausintegration.

Mit Hilfe der Variationsableitung erhält man dann

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta j(t_1)} \mathcal{F}_j(T) \Big|_{j=0} &= \int \mathcal{D}'x x(t_1) \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) + \int dt j(t)x(t) \right] \Big|_{j=0} \\ &= \mathcal{F}(T) \langle x(t_1) \rangle. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Auf die gleiche Weise erhält man für mehrfache Ableitungen

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta j(t_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta j(t_n)} \mathcal{F}_j(T) \Big|_{j=0} &= \int \mathcal{D}'x x(t_1) \cdots x(t_n) \\ &\quad \times \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \int dt x(t) \hat{\mathcal{M}} x(t) + \int dt j(t)x(t) \right] \Big|_{j=0} \\ &= \mathcal{F}(T) \langle x(t_1) \cdots x(t_n) \rangle. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Ist es nun möglich $\mathcal{F}_j(T)$ exakt zu berechnen, so kennt man auch die Momente. Dies soll nun geschehen. Dafür entwickelt man den Exponenten erneut um sein Minimum $x(j, t)$. Da der Quellterm von der Ordnung 1 ist und sonst auch keine Terme von der Ordnung > 2 auftreten, ist diese Entwicklung exakt und entspricht lediglich einer Umsortierung der Terme. Außerdem fällt der Quellterm bei der zweiten Ableitung weg, womit die quadratische Ordnung nach der Entwicklung die gleiche Gestalt hat wie vorher und bei korrekter Wahl der Randbedingungen für $x(j, t)$ (s.u.) das Pfadintegral wieder zum Fluktuationsfaktor $\mathcal{F}(T)$ führt. Die wesentliche zu berechnende Größe ist daher die erste Variationsableitung, die hier für ein allgemeines $U(t)$ anstelle $m^{-1}V''(x_{\text{kl}})$ berechnet wird

$$\begin{aligned} &\int dt \frac{\delta}{\delta x(t_1)} \left\{ -\frac{m}{2\hbar} [-x(t)\ddot{x}(t) + U(t)x(t)^2] + j(t)x(t) \right\} \\ &= \int dt \delta(t - t_1) \left\{ -\frac{m}{\hbar} [-\ddot{x}(t) + U(t)x(t)] + j(t) \right\} \\ &= \left\{ -\frac{m}{\hbar} [-\ddot{x}(t_1) + U(t_1)x(t_1)] + j(t_1) \right\}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

An der Stelle $x(t) = x(j, t)$ muss diese verschwinden, woraus sich die inhomogene Differentialgleichung

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + U(t) \right) x(j, t) = \frac{\hbar j(t)}{m} \quad (4.17)$$

ergibt. Eine partikuläre Lösung $x_p(j, t)$ erhält man über die Greensfunktion $G(t, t')$, die die Gleichung

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + U(t)\right) G(t, t') = \delta(t - t') \quad (4.18)$$

erfüllt. Setzt man nun

$$x_p(j, t) = \int dt' G(t, t') \frac{\hbar j(t')}{m}, \quad (4.19)$$

so sieht man unmittelbar, dass diese Funktion (4.17) löst. An die Greensfunktion sind jedoch mehrere Bedingungen geknüpft. Erstens verschwinden die neuen Variationspfade nur dann an den Rändern, $x(-\frac{T}{2}) = x(\frac{T}{2}) = 0$, wenn das auch die Lösungen $x(j, t)$ tun und zweitens folgt aus der Spektraldarstellung dieser Greensfunktion

$$G(t, t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y_n^T(t) y_n^T(t')}{\lambda_n}, \quad (4.20)$$

dass sie symmetrisch in t und t' ist. $y_n^T(t)$ sind die Eigenfunktionen zu $-\partial_t^2 + U(t)$ und endlichem T . Das zweite Problem ist nun, wie sich später herausstellen wird, kaum ein Problem, denn hat man erstmal ein $G(t, t')$, so lässt sich dies leicht symmetrisieren. Zum Verschwinden an den Rändern bemerken wir, dass man zur partikulären Lösung noch eine beliebige Linearkombination der homogenen Lösungen addieren kann. Die freien Konstanten können dann dazu benutzt werden, die erforderlichen Randbedingungen zu erfüllen.

Im Weiteren wird die so gefundene Lösung $x(j, t)$ für $U(t) = m^{-1}V''(x_{\text{kl}})$ in die nullte Ordnung der Entwicklung eingesetzt

$$\int -\frac{m}{2\hbar} x(j, t) \hat{\mathcal{M}} x(j, t) + j(t)x(j, t) dt \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \int j(t)x(j, t) dt \\ &= \frac{\hbar}{2m} \int dt \int j(t)G(t, t')j(t') dt', \end{aligned} \quad (4.22)$$

womit

$$\mathcal{F}_j(T) = \mathcal{F}(T) \exp \left[\frac{\hbar}{2m} \int dt \int j(t)G(t, t')j(t') dt' \right] \quad (4.23)$$

bestimmt wäre. In dieser Formel fehlt allerdings noch ein entscheidender Punkt. Schon bevor der Exponent im Pfadintegral mit Quellterm um sein Minimum entwickelt wird, erfolgt die Integration über alle Pfade in \mathcal{H}^\perp orthogonal zur Nullmode. Anhand der Spektraldarstellung der Greensfunktion (4.20) erkennt man aber, dass das Minimum $x(j, t)$ im nullten Ordnungsbeitrag der Wirkung (4.23) entgegen der Voraussetzung, Nullmodenkomponenten erzeugt. Wenn wir nun also den Exponenten von $\mathcal{F}_j(T)$ in

(4.13) erneut um sein Extremum entwickeln, suchen wir diesmal nicht das absolute Minimum, sondern das unter der Nebenbedingung vollständig in \mathcal{H}^\perp zu liegen. In der Reihenentwicklung des Minimums

$$x^\perp(j, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n y_n^T(t) \quad (4.24)$$

nach den Eigenfunktionen $y_n^T(t)$ darf also kein Term proportional zur Nullmode, d.h. $a_0 y_0^T(t)$, auftreten. Eine Möglichkeit dies zu erreichen bietet das Gram-Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren, indem wir den Nullmodenbeitrag vom absoluten Minimum herausprojizieren und von diesem abziehen

$$x^\perp(j, t) = x(j, t) - y_0^T(t) \int dt'' x(j, t'') y_0^T(t''). \quad (4.25)$$

Setzt man für $x(j, t)$ nun die Lösungsfunktion ein

$$\begin{aligned} x^\perp(j, t) &= \int dt' G(t, t') \frac{\hbar j(t')}{m} - y_0^T(t) \int dt'' \int dt' G(t'', t') \frac{\hbar j(t')}{m} y_0^T(t'') \\ &= \int dt' \frac{\hbar j(t')}{m} \underbrace{\left\{ G(t, t') - y_0^T(t) \int dt'' G(t'', t') y_0^T(t'') \right\}}_{G'(t, t')} \end{aligned} \quad (4.26)$$

und für $G(t, t')$ die Spektraldarstellung aus (4.20)

$$\begin{aligned} G'(t, t') &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y_n^T(t) y_n^T(t')}{\lambda_n} - y_0^T(t) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y_n^T(t')}{\lambda_n} \underbrace{\int dt'' y_n^T(t'') y_0^T(t'')}_{=\delta_{n0}} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y_n^T(t) y_n^T(t')}{\lambda_n} - \frac{y_0^T(t) y_0^T(t')}{\lambda_0} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{y_n^T(t) y_n^T(t')}{\lambda_n}, \end{aligned} \quad (4.27)$$

so erkennt man explizit, dass auch $G'(t, t')$ vollständig in \mathcal{H}^\perp liegt. Insbesondere ist diese Funktion im Limes $T \rightarrow \infty$ wohldefiniert. In (4.23) muss man also, mit Blick auf (4.21) und (4.26) statt (4.19), $G(t, t')$ durch $G'(t, t')$ ersetzen und erhält für die n -Punkt-Funktionen so

$$\langle x(t_1) \dots x(t_n) \rangle = \frac{\delta}{\delta j(t_1)} \dots \frac{\delta}{\delta j(t_n)} \exp \left[\frac{\hbar}{2m} \int dt \int j(t) G'(t, t') j(t') dt' \right] \Big|_{j=0}. \quad (4.28)$$

Die Anwendung von $\hat{\mathcal{M}}$ auf $G'(t, t')$ führt übrigens auf die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + U(t) \right) G'(t, t') &= \delta(t - t') - y_0^T(t) y_0^T(t') \\ &\stackrel{T \rightarrow \infty}{=} \delta(t - t') - y_0(t) y_0(t') \end{aligned} \quad (4.29)$$

und die Anwendung auf $x^\perp(j, t)$ liefert die Erkenntnis

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + U(t) \right) x^\perp(j, t) &= \frac{\hbar j(t)}{m} - y_0^T(t) \int y_0^T(t') \frac{\hbar j(t')}{m} dt' \\ &= \frac{\hbar j^\perp(t)}{m}, \end{aligned} \quad (4.30)$$

dass man das gleiche Ergebnis direkt erhalten hätte, wenn man bei der Wahl einer Quelle schon darauf geachtet hätte, dass sie vollständig in \mathcal{H}^\perp liegt, denn dann würde durch das Skalarprodukt $\int j^\perp(t)x(t) dt$ in (4.13) automatisch kein Nullmodenterm überleben. Im Weiteren ist mit $j(t)$ immer eben solche gemeint.

4.3 Wickscher Entwicklungssatz

Die n -Punkt-Funktionen erhält man mit (4.28) schlicht durch n -malige Anwendung der Variationsableitungen auf die Erzeugendenfunktion. Für die ersten drei Ableitungen findet man z.B. schnell

$$\begin{aligned} &\frac{\delta}{\delta j(t_1)} \exp \left[\frac{\hbar}{2m} \int dt \int j(t) G'(t, t') j(t') dt' \right] \Big|_{j=0} \\ &= \frac{\hbar}{m} \int G'(t_1, t) j(t) dt \cdot \exp \left[\frac{\hbar}{2m} \int dt \int j(t) G'(t, t') j(t') dt' \right] \Big|_{j=0} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} &\frac{\delta}{\delta j(t_1)} \frac{\delta}{\delta j(t_2)} \exp \left[\frac{\hbar}{2m} \int dt \int j(t) G'(t, t') j(t') dt' \right] \Big|_{j=0} \\ &= \frac{\delta}{\delta j(t_1)} \left\{ \frac{\hbar}{m} \int G'(t_2, t) j(t) dt \cdot \exp \left[\frac{\hbar}{2m} \int dt \int j(t) G'(t, t') j(t') dt' \right] \right\} \Big|_{j=0} \\ &= \left\{ \frac{\hbar}{m} G'(t_2, t_1) + \prod_{i=1}^2 \frac{\hbar}{m} \int G'(t_i, t) j(t) dt \right\} \exp \left[\frac{\hbar}{2m} \int \dots \right] \Big|_{j=0} \\ &= \frac{\hbar}{m} G'(t_1, t_2) \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} &\frac{\delta}{\delta j(t_1)} \frac{\delta}{\delta j(t_2)} \frac{\delta}{\delta j(t_3)} \exp \left[\frac{\hbar}{2m} \int dt \int j(t) G'(t, t') j(t') dt' \right] \Big|_{j=0} \\ &= \frac{\delta}{\delta j(t_1)} \left\{ \frac{\hbar}{m} G'(t_2, t_3) + \prod_{i=2}^3 \frac{\hbar}{m} \int G'(t_i, t) j(t) dt \right\} \exp \left[\frac{\hbar}{2m} \int \dots \right] \Big|_{j=0} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left\{ \frac{\hbar^2}{m^2} \int \left[G'(t_2, t_1) G'(t_3, t) + G'(t_3, t_1) G'(t_2, t) + G'(t_2, t_3) G'(t_1, t) \right] j(t) dt \right. \\
&\quad \left. + \prod_{i=1}^3 \frac{\hbar}{m} \int G'(t_i, t) j(t) dt \right\} \exp \left[\frac{\hbar}{2m} \int \dots \right] \Big|_{j=0} \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Anhand dessen lässt sich das Bildungsgesetz zumindest schon erahnen. Nochmaliges Anwenden der Variationsableitung an der Stelle $j = 0$ würde nur den ersten Term in der geschweiften Klammer übrig lassen, da alle anderen danach mindestens noch ein $j(t)$ beinhalten und damit verschwinden

$$\begin{aligned}
&\frac{\delta}{\delta j(t_1)} \frac{\delta}{\delta j(t_2)} \frac{\delta}{\delta j(t_3)} \frac{\delta}{\delta j(t_4)} \exp \left[\frac{\hbar}{2m} \int dt \int j(t) G'(t, t') j(t') dt' \right] \Big|_{j=0} \\
&= \frac{\hbar^2}{m^2} \left[G'(t_1, t_2) G'(t_3, t_4) + G'(t_1, t_3) G'(t_2, t_4) + G'(t_2, t_3) G'(t_1, t_4) \right].
\end{aligned} \tag{4.34}$$

Zuerst stellen wir fest, dass die n -Punkt-Funktionen für **ungerade** n verschwinden. Dies folgt aus der Tatsache, dass der Exponent „quadratisch“ in $j(t)$ ist und bei einer ungeradzahligem Anzahl an Ableitungen in jedem Term mindestens ein Faktor $j(t)$ übrig bleibt. Für n **gerade** erhält man Produkte von Greensfunktionen mit allen möglichen Kombinationen der Argumente, die einen unterschiedlichen Ausdruck liefern. So hat man bei $G'(t_1, t_2) G'(t_3, t_4)$ beispielsweise die Möglichkeit t_2 und t_3 zu tauschen $\Rightarrow G'(t_1, t_3) G'(t_2, t_4)$. Dies bewirkt auf Grund der Symmetrie der Greensfunktion dasselbe Ergebnis als würde man t_1 und t_4 tauschen. Eine andere erlaubte Möglichkeit ist $t_2 \leftrightarrow t_4 \Rightarrow G'(t_1, t_4) G'(t_3, t_2)$ äquivalent zu $t_1 \leftrightarrow t_3$. Andere Kombinationen gibt es hierbei nicht, denn aus denselben Symmetriegründen führt eine Vertauschung der Argumente in ein und derselben Greensfunktion nicht zu einem neuen Beitrag. Beginnend hiermit lassen sich iterativ die Anzahl an Permutationen bestimmen. Im Ausdruck $G'(t_1, t_2) G'(t_3, t_4) G'(t_5, t_6)$ hat man für festes t_1 und t_2 die drei obigen Möglichkeiten die Argumente der beiden rechten Greensfunktionen zu vertauschen. Weitere drei Permutationen erhält man für die hinteren beiden Greensfunktionen wenn man zuvor t_2 mit t_3 tauscht. Dies kann man so weiter führen mit $t_2 \leftrightarrow t_4$, $t_2 \leftrightarrow t_5$ und $t_2 \leftrightarrow t_6$. Insgesamt erhält man also $5 \cdot 3 = 15$ erlaubte Kombinationen, womit die zugehörige 6-Punkt-Funktion 15 Summanden der Gestalt $G'(t_{P(1)}, t_{P(2)}) G'(t_{P(3)}, t_{P(4)}) G'(t_{P(5)}, t_{P(6)})$ enthält. Der Index P steht für eine erlaubte Permutation der Argumente. Allgemein gibt es für gerades n genau $(n-1)!!$ Permutationen und das Ergebnis der n -Punkt-Funktionen kann in dem sogenannten Wickschen Entwicklungssatz festgehalten werden

$$\langle x(t_1) \dots x(t_n) \rangle = \left(\frac{\hbar}{m} \right)^{\frac{n}{2}} \sum_{\mathcal{P}} \underbrace{G'(t_{P(1)}, t_{P(2)}) \dots G'(t_{P(n-1)}, t_{P(n)})}_{\frac{n}{2} \text{ Faktoren}} \tag{4.35}$$

$$= \sum_{\mathcal{P}} \langle x(t_{P(1)}) x(t_{P(2)}) \rangle \dots \langle x(t_{P(n-1)}) x(t_{P(n)}) \rangle, \tag{4.36}$$

wobei das Ergebnis für die 2-Punkt-Funktion (4.32) verwendet wurde. [4]

4.4 Korrektur in 2-Loop-Ordnung

Wie die WKB-Theorie stellt die Pfadintegralnäherung effektiv eine Entwicklung der Wirkung im Exponenten nach Potenzen von \hbar dar

$$\mathcal{S}_E[x] = \sum_{n=0}^{\infty} (i\hbar)^n \mathcal{S}_E^{(n)}[x]. \quad (4.37)$$

So gesehen kann die klassische Mechanik als $\hbar \rightarrow 0$ Grenzfall der Quantenmechanik aufgefasst werden. In der WKB-Theorie liefert die Schrödinger-Gleichung in diesem Grenzfall beispielsweise dieselben Ergebnisse wie die Hamilton-Jacobi-Differentialgleichung der klassischen Mechanik (z.B. Teilchenzahlerhaltung/Kontinuitätsgleichung). Dieselbe Theorie liefert übrigens auch eine tiefgreifendere Begründung für das Korrespondenzprinzip.

Ohne auf diesen Sachverhalt nun genauer einzugehen (der interessierte Leser möge z.B. in [4] oder bzgl. WKB-Theorie in [5] nachschlagen) erscheint es wohl plausibel bei der Entwicklung der Wechselwirkung die Terme nach Potenzen von \hbar zu sortieren. Betrachten wir den gesamten Exponenten inklusive Vorfaktor $1/\hbar$, so ist die klassische Wirkung ein Term der Ordnung \hbar^{-1} , während der Fluktuationsfaktor zur nullten Ordnung zählt. Für die weiteren Berechnungen müssen wir in (4.12) die Summanden nach \hbar ordnen. Dem obigen Ergebnis (4.35) entnimmt man, dass eine n -Punkt-Funktion von der Ordnung $\hbar^{n/2}$ ist. Von den Momenten $\langle x^k(t) \rangle$ des ersten Terms der Reihenentwicklung in (4.12) benötigt man deshalb nur den $k = 4$ Term.

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_1 &= -\frac{1}{4! \hbar} \int dt V^{(4)}(x_{\text{kl}}(t)) \langle x^4(t) \rangle \\ &= -\frac{3\hbar}{4! m^2} \int dt V^{(4)}(x_{\text{kl}}(t)) G'^2(t, t). \end{aligned} \quad (4.38)$$

Der Faktor 3 kommt von den $(4 - 1)!!$ Summanden bei unterschiedlichen Argumenten t_i . Im zweiten Term der ersten eckigen Klammer braucht man noch $k = 3$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_2 &= \frac{\mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2}}{3! \hbar} \int dt V^{(3)}(x_{\text{kl}}(t)) \int dt' \dot{y}_0(t') \langle x(t') x^3(t) \rangle \\ &= \frac{3\hbar}{3! m^2} \mathcal{A}_{\text{kl}}^{-1/2} \int dt V^{(3)}(x_{\text{kl}}(t)) \int dt' \dot{y}_0(t') G'(t, t') G'(t, t). \end{aligned} \quad (4.39)$$

Weitere Terme des in \mathcal{V}_{ww} linearen Terms werden nicht benötigt, denn der nächste nicht verschwindende Term wäre mit der 6-Punkt-Funktion von der Ordnung $\hbar^{3-1} = \hbar^2$. In

der zweiten eckigen Klammer liefert nur der erste Summand einen Beitrag

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_3 &= \frac{1}{2\hbar^2 3! 3!} \int dt V^{(3)}(x_{\text{kl}}(t)) \int dt' V^{(3)}(x_{\text{kl}}(t')) \langle x^3(t) x^3(t') \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m^3 3! 3!} \int dt V^{(3)}(x_{\text{kl}}(t)) \int dt' V^{(3)}(x_{\text{kl}}(t')) \left[9 G'(t, t) G'(t, t') G'(t', t') \right. \\ &\quad \left. + 6 G'^3(t, t') \right],\end{aligned}\tag{4.40}$$

denn alle anderen sind mindestens von der Ordnung $\hbar^{4-2} = \hbar^2$. Auf diese Weise wird auch klar, weshalb in (4.3) keine kubischen Terme berücksichtigt werden müssen. Die niedrigste Kombination der Monome $x^k(t)$ führt zu einer 9-Punkt-Funktion und verschwindet daher. Die als nächstes auftretenden 10-Punkt-Funktionen liefern dann ebenfalls einen Term der Ordnung $\hbar^{5-3} = \hbar^2$.

Effektiv führt dieses Verfahren somit zu einem modifizierten Faktor

$$\tilde{\mathcal{K}} = (1 + \mathcal{J}_1 + \mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_3) \mathcal{K}.\tag{4.41}$$

4.5 Allgemeine Darstellung der Greensfunktion $G'(t, t')$

In diesem Abschnitt soll nun ein allgemeiner Ausdruck für $G'(t, t')$ gefunden werden. Dazu lösen wir die Gleichung (4.29) und sorgen anschließend dafür, dass die Lösung vollständig in \mathcal{H}^\perp liegt. Für endliche T benötigen wir zunächst eine allgemeine Darstellung der Greensfunktion die (4.18) löst

$$G(t, t') = \frac{\Theta(t - t') \Delta(t_b, t) \Delta(t', t_a) + \Theta(t' - t) \Delta(t_b, t') \Delta(t, t_a)}{\Delta(t_a, t_b)}\tag{4.42}$$

$$\begin{aligned}&= \Delta\left(-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}\right)^{-1} \mathcal{W}^{-2} \left\{ \frac{\Delta\left(-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}\right) \mathcal{W}^2}{2} [\Theta(t - t') \Delta(t, t') \right. \\ &\quad \left. + \Theta(t' - t) \Delta(t', t)] + y_{02}^2\left(\frac{T}{2}\right) y_{01}(t) y_{01}(t') - y_{01}^2\left(\frac{T}{2}\right) y_{02}(t) y_{02}(t') \right\}\end{aligned}\tag{4.43}$$

und an den Rändern verschwindet. Die Herleitung dieser Lösung ist nicht schwer, der Kürze halber soll aber auf [4] Kapitel 3 verwiesen werden. In dieser Notation ist $t_a = -T/2$, $t_b = +T/2$ und

$$\Delta(t, t') = \frac{y_{01}(t) y_{02}(t') - y_{01}(t') y_{02}(t)}{y_{01}(t') \dot{y}_{02}(t') - \dot{y}_{01}(t') y_{02}(t')}\tag{4.44}$$

$$= \frac{1}{\mathcal{W}} (y_{01}(t) y_{02}(t') - y_{01}(t') y_{02}(t)),\tag{4.45}$$

wobei $y_{01}(t)$ und $y_{02}(t)$ die beiden linear unabhängigen homogenen Lösungen zu $-\partial_t^2 + U(t)$ sind. Beim Schritt von (4.42) auf (4.43) wurde o.B.d.A. angenommen, dass $y_{01}(t)$

gerade ist, d.h. proportional zur Nullmode $y_0(t)$ ist und $y_{02}(t)$ ungerade ist. Ansonsten sind diese Funktionen nur bis auf Konstanten definiert. Eine Lösung zu (4.29) kann dann mit $G(t, t')$ konstruiert werden

$$G'(t, t') = G(t, t') - \underbrace{\int_{-T/2}^{T/2} G(t, t'') y_0(t') y_0(t'') dt''}_{G'_0(t, t')} . \quad (4.46)$$

(4.46) löst zwar (4.29) bzgl. der Variable t ist aber noch nicht symmetrisch in t und t' . Insbesondere reproduziert die Anwendung von $\hat{\mathcal{M}}$ bzgl. t' nicht (4.29) sondern (4.18). Der erste naive Ansatz zur Symmetrisierung wäre

$$G'(t, t') = G(t, t') - G'_0(t, t') - G'_0(t', t) . \quad (4.47)$$

Die so definierte Funktion ist symmetrisch, allerdings nicht vollständig in \mathcal{H}^\perp . Dies sieht man, indem man das Skalarprodukt mit $y_0(t)$ oder $y_0(t')$ bildet

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} G'(t, t') y_0(t') dt' &= \int_{-T/2}^{T/2} G(t, t') y_0(t') dt' \\ &\quad - \int_{-T/2}^{T/2} G(t, t'') y_0(t'') dt'' \int_{-T/2}^{T/2} y_0^2(t') dt' \\ &\quad - y_0(t) \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} G(t', t'') y_0(t') y_0(t'') dt'' dt' \\ &= \int_{-T/2}^{T/2} G(t, t'') y_0(t'') dt'' \underbrace{\left\{ 1 - \int_{-T/2}^{T/2} y_0^2(t') dt' \right\}}_{\approx c \lambda_0(T)} \\ &\quad - y_0(t) \underbrace{\int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} G(t', t'') y_0(t') y_0(t'') dt'' dt'}_{\mathcal{C}} . \end{aligned} \quad (4.48)$$

c ist eine unwesentliche Konstante. An dieser Stelle greifen wir nun auf die Ergebnisse in 2.2.3 zurück. In führender Ordnung in T verhält sich die Nullmode wie

$$y_0^T(t) \approx y_0(t) + \lambda_0(T) \tilde{y}_0(t) , \quad (4.49)$$

wobei $\tilde{y}_0(t)$ hier als Abkürzung für den zweiten Term in (2.89) ohne den Faktor λ steht und $\lambda_0(T) \propto e^{-\omega T}$ ist. Für das Integral vor dem Klammerausdruck in der ersten Zeile erhalten wir unter Verwendung der Spektraldarstellung (4.20)

$$\int_{-T/2}^{T/2} G(t, t'') y_0(t'') dt'' = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y_n^T(t)}{\lambda_n(T)} \int_{-T/2}^{T/2} y_n^T(t'') y_0(t'') dt'' . \quad (4.50)$$

Für $n \geq 1$ verschwinden die Integrale im Limes $T \rightarrow \infty$ sämtlich. Der einzige Term der einen (divergenten) Beitrag liefert ist $n = 0$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\lambda_0(T)} \int_{-T/2}^{T/2} y_0^T(t'') y_0(t'') dt'' &= \frac{1}{\lambda_0(T)} \int_{-T/2}^{T/2} [y_0(t'') + \lambda_0(T) \tilde{y}_0(t'')] y_0(t'') dt'' \\
&= \frac{1}{\lambda_0(T)} \int_{-T/2}^{T/2} y_0^2(t'') dt'' + \int_{-T/2}^{T/2} \tilde{y}_0(t'') y_0(t'') dt'' \\
&\approx \frac{1}{\lambda_0(T)} - c + \underbrace{\int_{-T/2}^{T/2} \tilde{y}_0(t'') y_0(t'') dt''}_{\equiv I_0} . \tag{4.51}
\end{aligned}$$

Der erste Term in (4.48) liefert somit

$$c \lambda_0(T) \int_{-T/2}^{T/2} G(t, t'') y_0(t'') dt'' \approx c y_0(t) . \tag{4.52}$$

Für die Konstante \mathcal{C} im zweiten Term ergibt sich aus (4.50) mit (4.51)

$$\mathcal{C} \approx \frac{1}{\lambda_0(T)} [1 - \lambda_0(T) (c - I_0)]^2 . \tag{4.53}$$

Insgesamt hat die Projektion auf den Raum der Nullmode

$$\int_{-T/2}^{T/2} G'(t, t') y_0(t') dt' \approx (c - \mathcal{C}) y_0(t) \tag{4.54}$$

also einen nicht verschwindenden Beitrag. Fügt man jedoch den Term $+\mathcal{C} y_0(t) y_0(t')$ hinzu

$$G'(t, t') = G(t, t') - G'_0(t, t') - G'_0(t', t) + \mathcal{C} y_0(t) y_0(t') \tag{4.55}$$

$$\begin{aligned}
&\approx \sum_{n=1}^{\infty} \frac{y_n^T(t) y_n^T(t')}{\lambda_n(T)} + \frac{y_0^T(t) y_0^T(t')}{\lambda_0(T)} - \frac{y_0^T(t) y_0(t')}{\lambda_0(T)} [1 - \lambda_0(T)(c - I_0)] \\
&\quad - \frac{y_0(t) y_0^T(t')}{\lambda_0(T)} [1 - \lambda_0(T)(c - I_0)] + \frac{y_0(t) y_0(t')}{\lambda_0(T)} [1 - \lambda_0(T)(c - I_0)]^2 \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{y_n^T(t) y_n^T(t')}{\lambda_n(T)} + \frac{y_0(t) y_0(t')}{\lambda_0(T)} \{1 - [1 - \lambda_0(T)(c - I_0)]\}^2 \\
&\quad + y_0(t) \tilde{y}_0(t') + \tilde{y}_0(t) y_0(t') - \tilde{y}_0(t) y_0(t') [1 - \lambda_0(T)(c - I_0)] \\
&\quad - y_0(t) \tilde{y}_0(t') [1 - \lambda_0(T)(c - I_0)] + \lambda_0(T) \tilde{y}_0(t) \tilde{y}_0(t') \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{y_n^T(t) y_n^T(t')}{\lambda_n(T)} + \mathcal{O}(\lambda_0(T)) , \tag{4.56}
\end{aligned}$$

so erhält man eine Greensfunktion $G'(t, t')$ die die erforderlichen Bedingungen erfüllt und im Limes $T \rightarrow \infty$ wohldefiniert ist.

Als Nächstes definieren wir zur Abkürzung das Normierungsintegral

$$\mathcal{N}^{-2} = \int_{-\infty}^{\infty} dt y_{01}^2(t) \quad (4.57)$$

das aus Konvergenzgründen gleich vervollständigt wurde, als auch

$$\Delta\left(-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}\right) = \frac{2}{\mathcal{W}} y_{01}\left(\frac{T}{2}\right) y_{02}\left(\frac{T}{2}\right) \equiv \frac{2\mathcal{C}}{\mathcal{W}}. \quad (4.58)$$

Mit diesen Abkürzungen und der Ersetzung $y_0(t) = \mathcal{N} y_{01}(t)$ erhält man für $G'_0(t, t')$ mit

$$\begin{aligned} \Delta\left(\frac{T}{2}, t\right) \Delta\left(t', -\frac{T}{2}\right) = \frac{1}{\mathcal{W}^2} & \left\{ y_{01}\left(\frac{T}{2}\right) y_{02}\left(\frac{T}{2}\right) (y_{01}(t) y_{02}(t') - y_{01}(t') y_{02}(t)) \right. \\ & \left. + y_{02}^2\left(\frac{T}{2}\right) y_{01}(t) y_{01}(t') - y_{01}^2\left(\frac{T}{2}\right) y_{02}(t) y_{02}(t') \right\} \end{aligned} \quad (4.59)$$

in (4.42) den länglichen Ausdruck

$$G'_0(t, t') = \frac{\mathcal{N}^2}{2\mathcal{C}\mathcal{W}} \left\{ y_{01}\left(\frac{T}{2}\right) y_{02}\left(\frac{T}{2}\right) \int_{-T/2}^t dt'' y_{01}(t) y_{02}(t'') y_{01}(t') y_{01}(t'') \right. \quad (4.60)$$

$$\left. - y_{01}\left(\frac{T}{2}\right) y_{02}\left(\frac{T}{2}\right) \int_{-T/2}^t dt'' y_{01}^2(t'') y_{02}(t) y_{01}(t') \right. \quad (4.61)$$

$$\left. + y_{02}^2\left(\frac{T}{2}\right) \int_{-T/2}^t dt'' y_{01}(t) y_{01}(t') y_{01}^2(t'') \right. \quad (4.62)$$

$$\left. - y_{01}^2\left(\frac{T}{2}\right) \int_{-T/2}^t dt'' y_{02}(t) y_{02}(t'') y_{01}(t') y_{01}(t'') \right. \quad (4.63)$$

$$\left. + y_{01}\left(\frac{T}{2}\right) y_{02}\left(\frac{T}{2}\right) \int_t^{\frac{T}{2}} dt'' y_{01}^2(t'') y_{02}(t) y_{01}(t') \right. \quad (4.64)$$

$$\left. - y_{01}\left(\frac{T}{2}\right) y_{02}\left(\frac{T}{2}\right) \int_t^{\frac{T}{2}} dt'' y_{01}(t) y_{02}(t'') y_{01}(t') y_{01}(t'') \right. \quad (4.65)$$

$$\left. + y_{02}^2\left(\frac{T}{2}\right) \int_t^{\frac{T}{2}} dt'' y_{01}^2(t'') y_{01}(t) y_{01}(t') \right. \quad (4.66)$$

$$\left. - y_{01}^2\left(\frac{T}{2}\right) \int_t^{\frac{T}{2}} dt'' y_{02}(t) y_{02}(t'') y_{01}(t') y_{01}(t'') \right\}. \quad (4.67)$$

Diesen Ausdruck kann man noch signifikant vereinfachen indem man z.B. (4.62) und (4.66) zusammenfasst zu $\int_{-T/2}^{T/2} dt'' y_{01}^2(t'') = \mathcal{N}^{-2}$ für $T \rightarrow \infty$ oder (4.60) drauf addiert

und wieder abzieht und den subtrahierten Term mit (4.65) zu $\int_{-T/2}^{T/2} dt'' y_{01}(t'') y_{02}(t'')$ zusammenfasst. Da $y_{01}(t)$ gerade und $y_{02}(t)$ ungerade ist, verschwindet das Integral und wird im Weiteren gar nicht mehr angeschrieben. Auch definieren wir der Kürze halber die unvollständigen Integrale

$$\mathcal{I}_1(t) \equiv \int_{-\infty}^t dt'' y_{01}(t'')^2 \quad (4.68)$$

$$\mathcal{I}_2(t) \equiv \int_{-T/2}^t dt'' y_{01}(t'') y_{02}(t''), \quad (4.69)$$

wobei Ersteres auf Grund der Konvergenz gleich an der unteren Grenze vervollständigt wurde. Auf diese Weise vereinfacht sich der Ausdruck dann zu

$$\begin{aligned} G'_0(t, t') = \frac{\mathcal{N}^2}{2\mathcal{CW}} & \left\{ 2 y_{01} \left(\frac{T}{2} \right) y_{02} \left(\frac{T}{2} \right) y_{01}(t) y_{01}(t') \mathcal{I}_2(t) \right. \\ & - 2 y_{01} \left(\frac{T}{2} \right) y_{02} \left(\frac{T}{2} \right) y_{01}(t') y_{02}(t) \mathcal{I}_1(t) \\ & + y_{01} \left(\frac{T}{2} \right) y_{02} \left(\frac{T}{2} \right) y_{01}(t') y_{02}(t) \mathcal{N}^{-2} \\ & \left. + y_{02}^2 \left(\frac{T}{2} \right) y_{01}(t) y_{01}(t') \mathcal{N}^{-2} \right\} \end{aligned} \quad (4.70)$$

$$\begin{aligned} = \frac{1}{2\mathcal{CW}} & \left\{ 2\mathcal{CN}^2 \mathcal{I}_2(t) y_{01}(t) y_{01}(t') - \mathcal{C} \underbrace{(2\mathcal{N}^2 \mathcal{I}_1(t) - 1)}_{\mathcal{J}_1(t)} y_{01}(t') y_{02}(t) \right. \\ & \left. + y_{02}^2 \left(\frac{T}{2} \right) y_{01}(t) y_{01}(t') \right\}. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Der Ausdruck $\mathcal{J}_1(t)$ ist ungerade und geht für $t \rightarrow -\infty$ gegen -1 und wegen $\mathcal{I}_1(\infty) = \mathcal{N}^{-2}$ für $t \rightarrow \infty$ gegen $+1$.

Aus Konvergenzgründen führen wir eine weitere Modifikation am Integral $\mathcal{I}_2(t)$ durch. Dazu bemerken wir, dass der Integrand asymptotisch gegen $\pm\mathcal{C}$ geht. Insbesondere ist \mathcal{C} für $T \rightarrow \pm\infty$ eine Konstante. Wir können daher das Integral an der unteren Grenze vervollständigen, wenn wir diesen Wert dazu addieren und gleich wieder abziehen.

$$\mathcal{I}_2(t) = \int_{-T/2}^t dt'' (y_{01}(t'') y_{02}(t'') + \mathcal{C} - \mathcal{C}) \quad (4.72)$$

$$= \int_{-\infty}^t dt'' (y_{01}(t'') y_{02}(t'') + \mathcal{C}) - \int_{-T/2}^t dt'' \mathcal{C} \quad (4.73)$$

$$= \underbrace{\int_{-\infty}^t dt'' (y_{01}(t'') y_{02}(t'') + \mathcal{C})}_{\equiv \mathcal{J}_2(t)} - \mathcal{C} t - \mathcal{C} \frac{T}{2} \quad (4.74)$$

Erwähnenswert ist vielleicht, dass die Funktion $\mathcal{J}_2(t)$ gerade ist und sich asymptotisch wie $\pm \mathcal{C}t$ verhält. Kompakt lässt sich dann $G'_0(t, t')$ schreiben als

$$G'_0(t, t') = \frac{1}{2\mathcal{C}\mathcal{W}} \left\{ 2\mathcal{C}\mathcal{N}^2 \mathcal{J}_2(t) y_{01}(t) y_{01}(t') - \mathcal{C}^2 \mathcal{N}^2 T y_{01}(t) y_{01}(t') \right. \\ \left. - \mathcal{C} \mathcal{J}_1(t) y_{01}(t') y_{02}(t) + y_{02}^2 \left(\frac{T}{2} \right) y_{01}(t) y_{01}(t') \right\}, \quad (4.75)$$

mit den konvergenten Ausdrücken $\mathcal{J}_1(t)$ und $\mathcal{J}_2(t)$. Die Konstante \mathcal{C} berechnet sich dann einfach über

$$\mathcal{C} = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt' G'_0(t', t') \quad (4.76)$$

$$= \frac{1}{2\mathcal{C}\mathcal{W}} \left\{ 2\mathcal{C}\mathcal{N}^2 \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt' \mathcal{J}_2(t') y_{01}(t')^2 - \mathcal{C}^2 \mathcal{N}^2 T \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt' y_{01}(t')^2 \right. \\ \left. - \mathcal{C} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt' \mathcal{J}_1(t') y_{01}(t') y_{02}(t') + y_{02}^2 \left(\frac{T}{2} \right) \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt' y_{01}(t')^2 \right\}. \quad (4.77)$$

Die Integrale im zweiten und vierten Term liefern ein \mathcal{N}^{-2} . Auch das erste Integral ist konvergent für $T \rightarrow \infty$. Das Dritte benötigt noch ein wenig Zuwendung. Dazu bemerken wir, dass der Integrand gerade ist, denn $\mathcal{J}_1(t)$ ist ungerade, und asymptotisch gegen \mathcal{C} konvergiert. Die gleiche Prozedur wie schon zuvor spaltet die lineare Divergenz in T ab.

$$\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt' \mathcal{J}_1(t') y_{01}(t') y_{02}(t') = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt' (\mathcal{J}_1(t') y_{01}(t') y_{02}(t') - \mathcal{C} + \mathcal{C}) \quad (4.78)$$

$$= \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dt' (\mathcal{J}_1(t') y_{01}(t') y_{02}(t') - \mathcal{C})}_{\mathcal{Z}_1} + \mathcal{C}T \quad (4.79)$$

Auch definieren wir zur Abkürzung das konvergente Integral

$$\mathcal{Z}_2 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathcal{J}_2(t') y_{01}(t')^2 \quad (4.80)$$

womit \mathcal{C} bestimmt wäre.

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\mathcal{C}\mathcal{W}} \left\{ 2\mathcal{C}\mathcal{N}^2 \mathcal{Z}_2 - 2\mathcal{C}^2 T - \mathcal{C} \mathcal{Z}_1 + y_{02}^2 \left(\frac{T}{2} \right) \mathcal{N}^{-2} \right\} \quad (4.81)$$

Diesen Ausdruck für \mathcal{C} setzen wir nun zusammen mit (4.75) und (4.43) in (4.55) ein

$$\begin{aligned}
G'(t, t') = \frac{1}{2\mathcal{C}\mathcal{W}} & \left\{ \mathcal{C}\mathcal{W} [\Theta(t - t')\Delta(t, t') + \Theta(t' - t)\Delta(t', t)] \right. \\
& + y_{02}^2 \left(\frac{T}{2} \right) y_{01}(t)y_{01}(t') - y_{01}^2 \left(\frac{T}{2} \right) y_{02}(t)y_{02}(t') \\
& - 2\mathcal{C}\mathcal{N}^2 \mathcal{J}_2(t) y_{01}(t)y_{01}(t') + \mathcal{C}^2\mathcal{N}^2 T y_{01}(t)y_{01}(t') \\
& + \mathcal{C}\mathcal{J}_1(t) y_{01}(t')y_{02}(t) - y_{02}^2 \left(\frac{T}{2} \right) y_{01}(t)y_{01}(t') \\
& - 2\mathcal{C}\mathcal{N}^2 \mathcal{J}_2(t') y_{01}(t')y_{01}(t) + \mathcal{C}^2\mathcal{N}^2 T y_{01}(t')y_{01}(t) \\
& + \mathcal{C}\mathcal{J}_1(t') y_{01}(t)y_{02}(t') - y_{02}^2 \left(\frac{T}{2} \right) y_{01}(t')y_{01}(t) \\
& + 2\mathcal{C}\mathcal{N}^4 \mathcal{Z}_2 y_{01}(t)y_{01}(t') - 2\mathcal{C}^2\mathcal{N}^2 T y_{01}(t)y_{01}(t') \\
& \left. - \mathcal{C}\mathcal{N}^2 \mathcal{Z}_1 y_{01}(t)y_{01}(t') + y_{02}^2 \left(\frac{T}{2} \right) y_{01}(t)y_{01}(t') \right\} \quad (4.82)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& = \frac{1}{2\mathcal{W}} \left\{ \mathcal{W} [\Theta(t - t')\Delta(t, t') + \Theta(t' - t)\Delta(t', t)] \right. \\
& \quad - \frac{1}{\mathcal{C}} y_{01}^2 \left(\frac{T}{2} \right) y_{02}(t)y_{02}(t') + \mathcal{J}_1(t) y_{01}(t')y_{02}(t) + \mathcal{J}_1(t') y_{01}(t)y_{02}(t') \\
& \quad \left. + [2\mathcal{N}^2 \mathcal{Z}_2 - \mathcal{Z}_1 - 2\mathcal{J}_2(t) - 2\mathcal{J}_2(t')] \mathcal{N}^2 y_{01}(t)y_{01}(t') \right\}, \quad (4.83)
\end{aligned}$$

wobei wiederum $y_0(t) = \mathcal{N}y_{01}(t)$ im letzten Term in (4.55) benutzt wurde.
Der Übersicht halber hier nochmal die Abkürzungen:

$$\mathcal{I}_1(t) = \int_{-\infty}^t dt' y_{01}^2(t') \quad (4.84)$$

$$\mathcal{J}_1(t) = 2\mathcal{N}^2 \mathcal{I}_1(t) - 1 \quad \text{ungerade} \quad (4.85)$$

$$\mathcal{J}_2(t) = \int_{-\infty}^t dt' (y_{01}(t')y_{02}(t') + \mathcal{C}) - \mathcal{C}t \quad \text{gerade} \quad (4.86)$$

$$\mathcal{Z}_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dt' (\mathcal{J}_1(t') y_{01}(t')y_{02}(t') - \mathcal{C}) \quad (4.87)$$

$$\mathcal{Z}_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathcal{J}_2(t') y_{01}^2(t') \quad (4.88)$$

Im Grenzübergang $T \rightarrow \infty$ verschwindet der erste Term in der zweiten Zeile, so dass (4.83) endgültig

$$\begin{aligned} G'(t, t') = \frac{1}{2\mathcal{W}} \Big\{ & \mathcal{W} [\Theta(t - t') \Delta(t, t') + \Theta(t' - t) \Delta(t', t)] \\ & + \mathcal{J}_1(t) y_{01}(t') y_{02}(t) + \mathcal{J}_1(t') y_{01}(t) y_{02}(t') \\ & + [2\mathcal{N}^2 \mathcal{Z}_2 - \mathcal{Z}_1 - 2\mathcal{J}_2(t) - 2\mathcal{J}_2(t')] \mathcal{N}^2 y_{01}(t) y_{01}(t') \Big\} \end{aligned} \quad (4.89)$$

annimmt.

Als Nächstes betrachten wir die Greensfunktion $G'(t, t)$ mit zusammenfallenden Argumenten. (4.89) vereinfacht sich zu

$$G'(t, t) = \frac{1}{2\mathcal{W}} \Big\{ 2\mathcal{J}_1(t) y_{01}(t) y_{02}(t) + [2\mathcal{N}^2 \mathcal{Z}_2 - \mathcal{Z}_1 - 4\mathcal{J}_2(t)] \mathcal{N}^2 y_{01}^2(t) \Big\}. \quad (4.90)$$

4.5.1 Greensfunktion für das RAZAVY-Potential

Zunächst benötigen wir die beiden linear unabhängigen homogenen ($\lambda = 0$) Lösungen zu (3.6) bzw. (3.7). Da die Funktionen $y_{01}(t)$ und $y_{02}(t)$ nur bis auf multiplikative Konstanten bestimmt sind, wählen wir diese der Übersicht halber so, dass die Wronski-Determinante zu $\mathcal{W}_t = \frac{\omega}{2}$ wird. Auch führen wir wieder die dimensionslose Variable $\tau = \frac{\omega t}{2}$ ein. Bis auf den Wronski-Beitrag $\mathcal{W}_t = \frac{\omega}{2}$ vor der Klammer in (4.90) ist das Ergebnis unabhängig von der gewählten Parametrisierung. Für y_{01} wählen wir nun mit (2.53)

$$y_{01}(\tau) = \frac{1}{1 + s \cosh 2\tau}. \quad (4.91)$$

Eine zweite linear unabhängige Lösung findet man nun besonders einfach mit der Formel von D'Alembert

$$y_{02}(\tau) = y_{01}(\tau) \int \frac{1}{y_{01}^2(\tau)} d\tau \quad (4.92)$$

$$= \frac{\left(\frac{s^2}{2} + 1\right) \tau + s \sinh 2\tau + \frac{s^2}{4} \sinh 2\tau \cosh 2\tau}{1 + s \cosh 2\tau}. \quad (4.93)$$

Diese Lösung erfüllt bereits die gewünschte Eigenschaft $\mathcal{W}_\tau = 1$ und die Konstante \mathcal{C} beträgt

$$\mathcal{C} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} y_{01}(\tau) y_{02}(\tau) = \frac{1}{4}. \quad (4.94)$$

Die Integrale (4.84)-(4.88) sind zum Teil recht mühselig zu berechnen. Für das einfachste Integral (4.84) und daraus folgend \mathcal{N}^{-2} ergibt sich unter Verwendung der Kink-Lösung

$$\int \frac{1}{1 + s \cosh 2\tau} d\tau = \frac{\operatorname{artanh} \left[\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \tau \right]}{\sqrt{1-s^2}} \quad (4.95)$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \mathcal{I}_1(\tau) &= \int_{-\infty}^{\tau} \frac{1}{(1 + s \cosh 2\tau')^2} d\tau' \\
&= \int_{-\infty}^{\tau} \frac{1}{1 + s \cosh 2\tau'} - \frac{s \cosh 2\tau'}{(1 + s \cosh 2\tau')^2} d\tau' \\
&= \int_{-\infty}^{\tau} \frac{1}{1 + s \cosh 2\tau'} d\tau' + s \frac{\partial}{\partial s} \int_{-\infty}^{\tau} \frac{1}{1 + s \cosh 2\tau'} d\tau' \\
&= \left(1 + s \frac{\partial}{\partial s}\right) \frac{\operatorname{artanh} \left[\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \tau \right] + \operatorname{artanh} \left[\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \right]}{\sqrt{1-s^2}} \\
&= \frac{1}{(1-s^2)^{\frac{3}{2}}} \left\{ \operatorname{artanh} \left[\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \tau \right] + \operatorname{artanh} \left[\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \right] \right\} \\
&\quad - \frac{s e^{2\tau} + 1}{2(1-s^2)(1+s \cosh 2\tau)} \tag{4.96} \\
\mathcal{N}^{-2} = \mathcal{I}_1(\infty) &= \frac{1}{(1-s^2)^{\frac{3}{2}}} \left\{ 2 \operatorname{artanh} \left[\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \right] - \sqrt{1-s^2} \right\}.
\end{aligned}$$

Daraus berechnet sich (4.85) zu

$$\mathcal{J}_1(\tau) = \frac{2 \operatorname{artanh} \left[\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \tau \right] - \frac{\sqrt{1-s^2} s \sinh 2\tau}{1+s \cosh 2\tau}}{2 \operatorname{artanh} \left[\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \right] - \sqrt{1-s^2}}. \tag{4.97}$$

Zu (4.86) geben wir zunächst das unbestimmte Integral an:

$$\begin{aligned}
\underbrace{\int y_{01} y_{02} d\tau}_{\equiv I_2(\tau)} &= \int \frac{\left(\frac{s^2}{2} + 1\right) \tau + s \sinh 2\tau + \frac{s^2}{4} \sinh 2\tau \cosh 2\tau}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} d\tau \\
&= \underbrace{\left(\frac{s^2}{2} + 1\right) \int \frac{\tau}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} d\tau}_{I_{21}} + \underbrace{\int \frac{\left(s + \frac{s^2}{4} \cosh 2\tau\right) \sinh 2\tau}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} d\tau}_{I_{22}} \tag{4.98}
\end{aligned}$$

Das Integral I_{22} lässt sich mit der Substitution $z = \cosh 2\tau$ recht einfach integrieren

$$I_{22} = \frac{1}{8} \ln(1 + s \cosh 2\tau) - \frac{3}{8} \frac{1}{1 + s \cosh 2\tau}. \tag{4.99}$$

Für ersteres liefert die Integration in Maple

$$\begin{aligned}
I_{21} = & \frac{s^2 + 2}{2(1 - s^2)^{\frac{3}{2}}} \left\{ \frac{1}{4} \operatorname{Li}_2 \left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 - \sqrt{1 - s^2}} \right) - \frac{1}{4} \operatorname{Li}_2 \left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 + \sqrt{1 - s^2}} \right) \right. \\
& + \frac{\ln 2}{4} \sqrt{1 - s^2} + \frac{\sqrt{1 - s^2}}{4} \ln(1 + s \cosh 2\tau) - \frac{\sqrt{1 - s^2}}{2} \frac{s \tau \sinh 2\tau}{1 + s \cosh 2\tau} \\
& \left. + \tau \operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) - \frac{\tau}{2} \ln \left[\frac{e^{2\tau} + \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}}{e^{2\tau} + \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}} \right] \right\}. \quad (4.100)
\end{aligned}$$

$\operatorname{Li}_2(z)$ ist dabei der Dilogarithmus. Sehr nützlich ist es übrigens die Äquivalenz der Ausdrücke

$$\begin{aligned}
\operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) &= \ln \left(\frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1} \right) = -\ln \left(\frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1} \right) \\
&= \operatorname{artanh} \left(\sqrt{1 - s^2} \right) = 2 \operatorname{artanh} \left(\sqrt{\frac{1 - s}{1 + s}} \right) \quad (4.101)
\end{aligned}$$

$$\frac{1}{2} \operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) - \frac{1}{2} \ln \left[\frac{e^{2\tau} + \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}}{e^{2\tau} + \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}} \right] = \operatorname{artanh} \left[\sqrt{\frac{1 - s}{1 + s}} \tanh \tau \right] \quad (4.102)$$

auf dem Intervall $0 < s < 1$ zu kennen. (4.98) ergibt dann

$$\begin{aligned}
I_2(\tau) = & \frac{s^2 + 2}{2(1 - s^2)^{\frac{3}{2}}} \left\{ \frac{1}{4} \operatorname{Li}_2 \left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 - \sqrt{1 - s^2}} \right) - \frac{1}{4} \operatorname{Li}_2 \left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 + \sqrt{1 - s^2}} \right) \right. \\
& + \tau \operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) - \frac{\tau}{2} \ln \left[\frac{e^{2\tau} + \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}}{e^{2\tau} + \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}} \right] \left. \right\} + \frac{s^2 + 2}{1 - s^2} \frac{\ln 2}{8} \\
& + \frac{3}{8(1 - s^2)} \ln(1 + s \cosh 2\tau) - \frac{\frac{3}{8} + \frac{s^2 + 2}{4(1 - s^2)} s \tau \sinh 2\tau}{1 + s \cosh 2\tau}. \quad (4.103)
\end{aligned}$$

Im Limes $\tau \rightarrow -\infty$ folgt für diesen Ausdruck modulo $+ \mathcal{C}\tau$

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} \left(I_2(\tau) + \frac{\tau}{4} \right) = \frac{3}{8} \frac{\ln s}{1 - s^2} - \frac{\ln 2}{8} \quad (4.104)$$

und damit für $\mathcal{J}_2(\tau)$

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_2(\tau) &= \frac{s^2 + 2}{2(1 - s^2)^{\frac{3}{2}}} \left\{ \frac{1}{4} \text{Li}_2 \left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 - \sqrt{1 - s^2}} \right) - \frac{1}{4} \text{Li}_2 \left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 + \sqrt{1 - s^2}} \right) \right. \\ &\quad \left. + \tau \text{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) - \frac{\tau}{2} \ln \left[\frac{e^{2\tau} + \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}}{e^{2\tau} + \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}} \right] \right\} + \frac{3}{8} \frac{\ln \frac{2}{s}}{1 - s^2} \\ &\quad + \frac{3}{8(1 - s^2)} \ln(1 + s \cosh 2\tau) - \frac{\frac{3}{8} + \frac{s^2 + 2}{4(1 - s^2)} s \tau \sinh 2\tau}{1 + s \cosh 2\tau} .\end{aligned}\quad (4.105)$$

Besonders knifflig gestaltet sich die Auswertung der Konstanten \mathcal{Z}_1 und \mathcal{Z}_2 . Da wir aber ohnehin nur an der Kombination $\mathcal{Z} \equiv 2\mathcal{N}^2 \mathcal{Z}_2 - \mathcal{Z}_1$ interessiert sind, fassen wir den Integranden direkt zusammen

$$\mathcal{Z} = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \underbrace{\left\{ 2\mathcal{N}^2 \mathcal{J}_2(\tau) y_{01}^2(\tau) - \mathcal{J}_1(\tau) y_{01}(\tau) y_{02}(\tau) + \mathcal{C} \right\}}_{\equiv \ln(\mathcal{Z})} \quad (4.106)$$

$$\begin{aligned}2\mathcal{N}^2 \mathcal{J}_2 y_{01}^2 &= \frac{s^2 + 2}{\text{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) - \sqrt{1 - s^2}} \frac{1}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} \left\{ -\frac{\tau}{2} \ln \left[\frac{e^{2\tau} + \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}}{e^{2\tau} + \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}} \right] \right. \\ &\quad + \frac{1}{4} \text{Li}_2 \left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 - \sqrt{1 - s^2}} \right) - \frac{1}{4} \text{Li}_2 \left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 + \sqrt{1 - s^2}} \right) + \tau \text{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) \\ &\quad + \frac{3 \sqrt{1 - s^2} \ln \frac{2}{s}}{4(s^2 + 2)} + \frac{3 \sqrt{1 - s^2}}{4(s^2 + 2)} \ln(1 + s \cosh 2\tau) - \frac{\frac{3}{4} \frac{(1 - s^2)^{\frac{3}{2}}}{s^2 + 2}}{1 + s \cosh 2\tau} \\ &\quad \left. - \frac{\sqrt{1 - s^2}}{2} \frac{s \tau \sinh 2\tau}{1 + s \cosh 2\tau} \right\}\end{aligned}\quad (4.107)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_1 y_{01} y_{02} &= -\frac{s^2 + 2}{\text{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) - \sqrt{1 - s^2}} \frac{1}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} \left\{ -\frac{\tau}{2} \text{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) \right. \\ &\quad + \frac{\tau}{2} \ln \left[\frac{e^{2\tau} + \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}}{e^{2\tau} + \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}} \right] + \frac{\sqrt{1 - s^2}}{2} \frac{s \tau \sinh 2\tau}{1 + s \cosh 2\tau} \\ &\quad - (s^2 + 2)^{-1} \left(s + \frac{s^2}{4} \cosh 2\tau \right) \sinh 2\tau \cdot \text{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) \\ &\quad + (s^2 + 2)^{-1} \left(s + \frac{s^2}{4} \cosh 2\tau \right) \sinh 2\tau \cdot \ln \left[\frac{e^{2\tau} + \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}}{e^{2\tau} + \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}} \right] \\ &\quad \left. + \frac{s^2 \sqrt{1 - s^2} \sinh^2 2\tau (1 + \frac{s}{4} \cosh 2\tau)}{(s^2 + 2)(1 + s \cosh 2\tau)} \right\},\end{aligned}\quad (4.108)$$

wobei wieder von den Relationen (4.101) und (4.102) Gebrauch gemacht wurde. Insgesamt erhält man

$$\begin{aligned}
\ln(\mathcal{Z}) &= \frac{s^2 + 2}{\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1 - s^2}} \frac{1}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} \left\{ \frac{3}{4} \frac{\sqrt{1 - s^2}}{s^2 + 2} \ln(1 + s \cosh 2\tau) \right. \\
&\quad + \frac{1}{4} \operatorname{Li}_2\left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 - \sqrt{1 - s^2}}\right) - \frac{1}{4} \operatorname{Li}_2\left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 + \sqrt{1 - s^2}}\right) + \frac{\tau}{2} \operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) \\
&\quad + \frac{3}{4} \frac{\sqrt{1 - s^2}}{s^2 + 2} \ln \frac{2}{s} + \frac{\sqrt{1 - s^2}}{4(s^2 + 2)} \left[(1 + s \cosh 2\tau)^2 + (1 + s \cosh 2\tau) \right. \\
&\quad \left. \left. - (s^2 + 5) \right] - (s^2 + 2)^{-1} \left(s + \frac{s^2}{4} \cosh 2\tau \right) \sinh 2\tau \cdot \operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) \right. \\
&\quad + (s^2 + 2)^{-1} \left(s + \frac{s^2}{4} \cosh 2\tau \right) \sinh 2\tau \cdot \ln \left[\frac{e^{2\tau} + \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}}{e^{2\tau} + \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}} \right] \\
&\quad \left. + \frac{\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1 - s^2}}{4(s^2 + 2)} (1 + s \cosh 2\tau)^2 \right\} \quad (4.109)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{s^2 + 2}{\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1 - s^2}} \frac{1}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} \left\{ \underbrace{\frac{3}{4} \frac{\sqrt{1 - s^2}}{s^2 + 2} \ln(1 + s \cosh 2\tau)}_{T_1(\tau)} \right. \\
&\quad + \underbrace{\frac{1}{4} \operatorname{Li}_2\left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 - \sqrt{1 - s^2}}\right) - \frac{1}{4} \operatorname{Li}_2\left(\frac{-s e^{2\tau}}{1 + \sqrt{1 - s^2}}\right) + \frac{\tau}{2} \operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right)}_{T_2(\tau)} \\
&\quad + \underbrace{\frac{\sqrt{1 - s^2}}{4(s^2 + 2)} \left[3 \left(\ln \frac{2}{s} - 1 \right) - (s^2 + 2) \right]}_{T_3(\tau)} + \underbrace{\frac{\sqrt{1 - s^2}}{4(s^2 + 2)} (1 + s \cosh 2\tau)}_{T_4(\tau)} \\
&\quad - \underbrace{(s^2 + 2)^{-1} \left(s + \frac{s^2}{4} \cosh 2\tau \right) \sinh 2\tau \cdot \operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right)}_{T_{51}(\tau)} \\
&\quad + \underbrace{(s^2 + 2)^{-1} \left(s + \frac{s^2}{4} \cosh 2\tau \right) \sinh 2\tau \cdot \ln \left[\frac{e^{2\tau} + \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}}{e^{2\tau} + \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}} \right]}_{T_{52}(\tau)} \\
&\quad \left. + \underbrace{\frac{\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right)}{4(s^2 + 2)} (1 + s \cosh 2\tau)^2}_{T_{53}(\tau)} \right\}. \quad (4.110)
\end{aligned}$$

Die T_i , wobei $T_5 = T_{51} + T_{52} + T_{53}$, sind sämtlich gerade Funktionen und die Berechnung der Integrale werden wir jetzt einzeln nachvollziehen. Die einfachsten Beiträge

T_3 und T_4 haben wir im Wesentlichen mit (4.95) und (4.96) schon berechnet. Zwecks Übersichtlichkeit, insbesondere um bei den komplizierteren Integralen große Wurzel-
ausdrücke zu vermeiden, führen wir schon hier die neue Variable

$$a \equiv \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1} \quad (4.111)$$

$$\Rightarrow \quad s = \frac{2a}{a^2 + 1} \quad 0 \leq a \leq 1 \quad (4.112)$$

ein. Die beiden obigen Beiträge T_3 und T_4 ergeben dann

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{T_3(\tau)}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} d\tau &= \frac{[3(\ln \frac{2}{s} - 1) - (s^2 + 2)] [\operatorname{arcosh}(\frac{1}{s}) - \sqrt{1 - s^2}]}{4(s^2 + 2)(1 - s^2)} \\ &= \frac{3 \operatorname{arcosh}(\frac{1}{s}) \ln \frac{2}{s} - 3 \sqrt{1 - s^2} \ln \frac{2}{s} - 3 \operatorname{arcosh}(\frac{1}{s}) + 3 \sqrt{1 - s^2}}{4(s^2 + 2)(1 - s^2)} \\ &\quad - \frac{\operatorname{arcosh}(\frac{1}{s}) - \sqrt{1 - s^2}}{4(1 - s^2)} \end{aligned} \quad (4.113)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{3}{8} \frac{(a^2 + 1)^4}{(a^2 - 1)^2 (a^4 + 4a^2 + 1)} \left\{ \ln^2 a - \ln(a^2 + 1) \ln a + \frac{2}{a^2 + 1} \ln a \right. \\ &\quad \left. + \frac{a^2 - 1}{a^2 + 1} \ln(a^2 + 1) - \frac{a^2 - 1}{a^2 + 1} \right\} + \frac{(a^2 + 1)^2}{4(a^2 - 1)^2} \ln a - \frac{a^2 + 1}{4(a^2 - 1)} \end{aligned} \quad (4.114)$$

und

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{T_4(\tau)}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} d\tau &= \frac{\sqrt{1 - s^2}}{4(s^2 + 2)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1 + s \cosh 2\tau)} d\tau \\ &= \frac{\operatorname{arcosh}(\frac{1}{s})}{4(s^2 + 2)} \end{aligned} \quad (4.115)$$

$$= -\frac{1}{8} \frac{(a^2 + 1)^2}{a^4 + 4a^2 + 1} \ln a. \quad (4.116)$$

Um die einzelnen Terme nachher deutlicher zu identifizieren geben wir die wichtigsten Transformationen an:

$$s^2 + 2 = \frac{2(a^4 + 4a^2 + 1)}{(a^2 + 1)^2} \quad (4.117)$$

$$1 - s^2 = \frac{(1 - a^2)^2}{(1 + a^2)^2} \quad (4.118)$$

$$\ln \frac{2}{s} = \ln(a^2 + 1) - \ln a \quad (4.119)$$

$$\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) = -\ln a \quad (4.120)$$

Das Integral zu T_2 lösen wir mit Hilfe der allgemein bekannten Integraldarstellung für den Polylogarithmus

$$\text{Li}_x(z) = \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^\infty \frac{t^{x-1}}{\frac{e^t}{z} - 1} dt. \quad (4.121)$$

Dazu bemerken wir, dass der letzte Term in T_2 ungerade in τ ist und das Integral über diesen Term damit verschwindet. Es genügt also die ersten beiden Terme zu betrachten. In der Variable a nimmt T_2 die Form

$$T_2(\tau) = \frac{1}{4} \left\{ \text{Li}_2 \left(-\frac{e^{2\tau}}{a} \right) - \text{Li}_2(-a e^{2\tau}) \right\} \quad (4.122)$$

an, so dass wir unter Benutzung von (4.121) zunächst die Darstellung

$$\begin{aligned} T_2(\tau) &= \frac{1}{4} \int_0^\infty \left\{ -\frac{t e^{2\tau}}{e^t a + e^{2\tau}} + \frac{t a e^{2\tau}}{e^t + a e^{2\tau}} \right\} dt \\ &= \frac{a^2 - 1}{4} \int_0^\infty \frac{t e^t e^{2\tau}}{(e^t + a e^{2\tau})(e^t a + e^{2\tau})} dt. \end{aligned} \quad (4.123)$$

erhalten. Das Integral über T_2 kann dann als Doppelintegral geschrieben werden

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^\infty \frac{T_2(\tau)}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} d\tau &= \frac{a^2 - 1}{4} \int_0^\infty t e^t dt \\ &\quad \times \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{2\tau}}{(e^t + a e^{2\tau})(e^t a + e^{2\tau}) \left(1 + \frac{2a}{a^2+1} \cosh 2\tau\right)^2} d\tau \\ &= \frac{(a^2 - 1)(a^2 + 1)^2}{8} \int_0^\infty t e^t dt \\ &\quad \times \int_0^\infty \frac{z^2}{\underbrace{(e^t + az)(e^t a + z)(az^2 + a^2 z + z + a)^2}_{R_2(z)}} dz. \end{aligned} \quad (4.124)$$

Im letzten Schritt wurde $z = e^{2\tau}$ substituiert. Der Integrand kann nun in Partialbrüche zerlegt und dann einfach integriert werden. Zunächst liefert die Auswertung der Partialbruchzerlegung für $R_2(z)$

$$\begin{aligned} R_2(z) &= \frac{1}{(a^2 - 1)^3 (e^t - 1)^2} \left\{ \frac{2 e^{2t} - (a^2 + 1)^2 e^t + 2 a^4}{(e^t - a^2)^2 (z + a)} + \frac{a (a^2 - 1) (e^t - 1)}{(e^t - a^2) (z + a)^2} \right. \\ &\quad + \frac{e^t a (a^2 - 1)^2}{(e^t - a^2)^2 (e^t + za)} + \frac{\left(-2 e^{2t} a^4 - 2 + (a^2 + 1)^2 e^t\right) a}{(e^t a^2 - 1)^2 (za + 1)} \\ &\quad \left. + \frac{a (a^2 - 1) (e^t - 1)}{(e^t a^2 - 1) (za + 1)^2} - \frac{e^t (a^2 - 1)^2}{(e^t a^2 - 1)^2 (e^t a + z)} \right\} \end{aligned} \quad (4.125)$$

die Erkenntnis, dass die einzelnen Stammfunktionen einfach zu finden sind. Bei der praktischen Auswertung des Integrals musste allerdings ein Cut-Off Z_0 eingeführt werden, weil insbesondere die logarithmischen Terme nur in der Summe für $Z_0 \rightarrow \infty$ ein endliches Ergebnis liefern. Nach der Limesbildung erhält man dann

$$\begin{aligned} \int_0^\infty R_2(z) dz = & -\frac{(a^2+1)e^t(e^t+1)t}{(e^t-a^2)^2(e^ta^2-1)^2(e^t-1)} \\ & + \frac{(a^6-4a^4\ln a-a^2)(e^{2t}+1) + \{(2a^8+4a^6-4a^4+4a^2+2)\ln a - a^8+1\}e^t}{(e^t-a^2)^2(e^ta^2-1)^2(a^2-1)^3} \end{aligned} \quad (4.126)$$

Das t -Integral handhabt man ähnlich. Wir zerlegen das Ergebnis in Partialbrüche nach e^t und nach Multiplikation mit dem verbleibenden Faktor $\frac{(a^2-1)(a^2+1)^2}{8} t e^t$ in (4.124) folgt

$$\begin{aligned} f_2(t) \equiv & -\frac{(a^2+1)^3(a^2-1)e^{2t}(e^t+1)}{8(e^t-a^2)^2(e^ta^2-1)^2(e^t-1)} t^2 \\ & + \frac{(a^2+1)^2 e^t}{8(e^t-a^2)^2(e^ta^2-1)^2(a^2-1)^2} \left\{ (a^6-4a^4\ln a-a^2)(e^{2t}+1) \right. \\ & \left. + [2(a^8+2a^6-2a^4+2a^2+1)\ln a - a^8+1] e^t \right\} t \end{aligned} \quad (4.127)$$

$$\begin{aligned} = & \frac{1}{8} \frac{(a^2+1)^2}{(a^2-1)^2} \left\{ \frac{2a^2}{(a^2-1)(e^ta^2-1)} + \frac{1}{(e^ta^2-1)^2} - \frac{a^4}{(e^t-a^2)^2} \right. \\ & + \frac{2a^2}{(a^2-1)(e^t-a^2)} - \frac{2(a^2+1)}{(e^t-1)(a^2-1)} \left. \right\} t^2 \\ & + \frac{1}{8} \frac{(a^2+1)^2}{(a^2-1)^2} \left\{ \frac{4a^2\ln a - a^2+1}{(a^2-1)(e^ta^2-1)} + \frac{2\ln a}{(e^ta^2-1)^2} \right. \\ & \left. + \frac{2a^4\ln a}{(e^t-a^2)^2} + \frac{a^2(a^2-4\ln a-1)}{(a^2-1)(e^t-a^2)} \right\} t. \end{aligned} \quad (4.128)$$

Den letzten Ausdruck kann man nun mit (4.121) berechnen.

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f_2(t) dt = & -\frac{1}{6} \frac{(a^2+1)^3 \ln^3 a}{(a^2-1)^3} + \frac{(a^2+1)^2 \ln^2 a}{4(a^2-1)^2} - \left(\frac{(a^2+1)^2 \ln(1-a^2)}{2(a^2-1)^2} \right. \\ & \left. + \frac{1}{12} \frac{(a^2+1)^3 (\pi^2 + 6\text{Li}_2(a^2))}{(a^2-1)^3} \right) \ln a + \frac{(a^2+1)^2 (\pi^2 - 6\text{Li}_2(a^2))}{24(a^2-1)^2} \\ & - \frac{(a^2+1)^3 (\zeta(3) - \text{Li}_3(a^2))}{2(a^2-1)^3}. \end{aligned} \quad (4.129)$$

Auch in dem nächsten von uns betrachteten Beitrag T_5 genügt es die Terme T_{52} und T_{53} zu berücksichtigen, denn T_{51} ist ungerade. Der Integrand zu T_{53} ist eine Konstante und das Integral daher trivial aber divergent, weshalb wir beim Integral

$$\int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} \frac{T_{52}(\tau)}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} d\tau \quad (4.130)$$

zunächst einen Cut-Off $\tau_0/2$ einführen. Wir beginnen wieder mit der Ersetzung $s = \frac{2a}{a^2+1}$ und substituieren $z = e^{2\tau}$

$$\begin{aligned} \frac{T_{52}(\tau)}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} d\tau = & \underbrace{\frac{a(a^2+1)^2(4a^2z + a z^2 + a + 4z)(z^2-1)}{16(a^4 + 4a^2 + 1)z(z+a)^2(za+1)^2}}_{R_{52}(z)} \left\{ -2 \ln a \right. \\ & \left. + \ln(1+za) - \ln\left(1 + \frac{z}{a}\right) \right\} dz, \end{aligned} \quad (4.131)$$

woraufhin wir die rationale Funktion $R_{52}(z)$ wie zuvor in Partialbrüche zerlegen

$$\begin{aligned} R_{52}(z) = & \frac{(a^2+1)^2}{16(a^4 + 4a^2 + 1)} \left\{ -\frac{1}{z} - \frac{3(a^2+1)}{a(z + \frac{1}{a})^2(a^2-1)} + \frac{1}{z + \frac{1}{a}} \right. \\ & \left. + \frac{1}{z+a} + \frac{3a(a^2+1)}{(z+a)^2(a^2-1)} \right\}. \end{aligned} \quad (4.132)$$

Wie zuvor lässt sich die Integration für den ersten Logarithmus in der geschweiften Klammer in (4.131) einfach durchführen, da dieser konstant in z ist

$$\begin{aligned} \int R_{52}(z) dz = & \frac{(a^2+1)^2}{16(a^4 + 4a^2 + 1)} \left\{ -\ln z + \frac{3(a^2+1)}{a(z + \frac{1}{a})(a^2-1)} + \ln\left(z + \frac{1}{a}\right) \right. \\ & \left. + \ln(z+a) - \frac{3a(a^2+1)}{(z+a)(a^2-1)} \right\} \\ = & \frac{(a^2+1)^2}{16(a^4 + 4a^2 + 1)} \left\{ \ln\left(\frac{(z+a)(1+az)}{za}\right) - \frac{3(a^2+1)}{(z+a)(a + \frac{1}{z})} \right\}. \end{aligned} \quad (4.133)$$

(4.133) ist invariant unter der Transformation $z \rightarrow \frac{1}{z}$, weshalb der Term

$$-2 \ln a \int_{Z_0}^{1/Z_0} R_{52}(z) dz = 0 \quad (4.134)$$

verschwindet.

Die Integrale für den zweiten und dritten Term sind von der Gestalt

$$\int \frac{\ln(1+\alpha z)}{z+\beta} dz \quad (\alpha, \beta > 0) \quad (4.135)$$

$$\int \frac{\ln(1+\alpha z)}{(z+\beta)^2} dz \quad (\alpha, \beta > 0) \quad (4.136)$$

und lassen sich (bis auf einen konstanten Term) auf folgende Weise lösen.
Zunächst (4.135):

$$\begin{aligned}
\int \frac{\ln(1 + \alpha z)}{z + \beta} dz &= \int \frac{\ln(1 - \alpha\beta + \alpha(z + \beta))}{z + \beta} dz \\
&= \int \frac{\ln(1 - \alpha\beta)}{z + \beta} dz + \int \frac{\ln\left(1 + \frac{\alpha(z + \beta)}{1 - \alpha\beta}\right)}{z + \beta} dz \\
&= \ln(1 - \alpha\beta) \ln(z + \beta) - \text{Li}_2\left(-\frac{\alpha(z + \beta)}{1 - \alpha\beta}\right), \tag{4.137}
\end{aligned}$$

wobei letztes Integral mit der Substitution $u = -\frac{\alpha(z + \beta)}{1 - \alpha\beta} \Rightarrow dz = -\frac{1 - \alpha\beta}{\alpha} du$

$$\begin{aligned}
\int \frac{\ln\left(1 + \frac{\alpha(z + \beta)}{1 - \alpha\beta}\right)}{z + \beta} dz &= - \int \frac{-\ln(1 - u)}{u} du \\
&= - \int \frac{\text{Li}_1(u)}{u} du \\
&= -\text{Li}_2(u) \tag{4.138}
\end{aligned}$$

folgt. Für das andere Integral wird einmal partiell integriert

$$\int \frac{\ln(1 + \alpha z)}{(z + \beta)^2} dz = -\frac{\ln(1 + \alpha z)}{z + \beta} + \int \frac{1}{(z + \beta)\left(z + \frac{1}{\alpha}\right)} dz \tag{4.139}$$

und der dabei auftretende Integrand in Partialbrüche zerlegt

$$\frac{1}{(z + \beta)\left(z + \frac{1}{\alpha}\right)} = \frac{\alpha}{1 - \alpha\beta} \left\{ \frac{1}{z + \beta} - \frac{1}{z + \frac{1}{\alpha}} \right\}, \tag{4.140}$$

womit auch (4.136) schließlich berechnet wäre

$$\int \frac{\ln(1 + \alpha z)}{(z + \beta)^2} dz = -\frac{(1 + \alpha z) \ln(1 + \alpha z)}{(1 - \alpha\beta)(z + \beta)} + \frac{\alpha \ln[\alpha(z + \beta)]}{1 - \alpha\beta}. \tag{4.141}$$

Die eigentliche Arbeit, das Zusammenfassen aller Terme, überlassen wir aber dem Computer. Der Beitrag (4.131) liefert für $Z_0 \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}
\int_{Z_0}^{1/Z_0} R_{52}(z) \ln\left[\frac{1 + za}{1 + \frac{z}{a}}\right] dz &= -\frac{1}{8} \frac{(a^2 + 1)^2 \ln a}{a^4 + 4a^2 + 1} \ln Z_0 + \frac{1}{8} \frac{(a^2 + 1)^2}{a^4 + 4a^2 + 1} \left\{ \ln^2 a \right. \\
&\quad \left. + \text{Li}_2(1 - a^2) + \frac{3(a^2 + 1)^2}{(a^2 - 1)^2} \left[\ln a - \frac{a^2 - 1}{a^2 + 1} \right] \right\} \\
&\quad + \mathcal{O}(Z_0), \tag{4.142}
\end{aligned}$$

wobei bemerkt sei, dass an der unteren Grenze keine Konvergenzprobleme auftreten. Das Integral bzgl. T_{53} divergiert wie

$$\begin{aligned} \frac{\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right)}{4(s^2+2)} \int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} d\tau &= -\frac{1}{8} \frac{(a^2+1)^2 \ln a}{a^4+4a^2+1} \int_{Z_0}^{1/Z_0} \frac{1}{2z} dz \\ &= \frac{1}{8} \frac{(a^2+1)^2 \ln a}{a^4+4a^2+1} \ln Z_0 \end{aligned} \quad (4.143)$$

mit $Z_0 = e^{-\tau_0}$ und kompensiert damit genau den divergenten Beitrag von T_{52} . Insgesamt ergibt sich für T_5 also (in der Variable a)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{T_5(\tau)}{(1+s \cosh 2\tau)^2} d\tau &= \frac{1}{8} \frac{(a^2+1)^2}{a^4+4a^2+1} \left\{ \operatorname{Li}_2(1-a^2) + \ln^2 a \right. \\ &\quad \left. + \frac{3(a^2+1)^2}{(a^2-1)^2} \left[\ln a - \frac{a^2-1}{a^2+1} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.144)$$

Auch der letzte Beitrag T_1 lässt sich analytisch lösen, wenn auch hier nicht mit ganz unerheblichem Aufwand. Obwohl der Integrand im Prinzip integrabel ist, d.h. das Integral nicht divergiert, ließ sich nicht direkt eine Lösung finden. Allerdings kann man zunächst partiell integrieren, wodurch aber die Konvergenz der Teilbeiträge zerstört wird. Aus dem Grunde führen wir auch hier einen Cut-Off $\tau_0/2$ ein

$$\begin{aligned} \int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} \frac{T_1(\tau)}{(1+s \cosh 2\tau)^2} d\tau &= \frac{3}{4} \frac{\sqrt{1-s^2}}{s^2+2} \int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} \frac{\ln(1+s \cosh 2\tau)}{(1+s \cosh 2\tau)^2} d\tau \\ &= \frac{3}{4} \frac{\sqrt{1-s^2}}{s^2+2} \left\{ \underbrace{\mathcal{I}(\tau) \ln(1+s \cosh 2\tau) \Big|_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2}}_{T_{11}(\tau_0)} - \underbrace{\int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} \mathcal{I}(\tau) \frac{2s \sinh 2\tau}{1+s \cosh 2\tau} d\tau}_{T_{12}(\tau_0)} \right\}, \end{aligned} \quad (4.145)$$

wobei $\mathcal{I}(\tau)$ das unbestimmte Integral zu (4.96) ist

$$\mathcal{I} = \int \frac{1}{(1+s \cosh 2\tau)^2} d\tau = \frac{\operatorname{artanh}\left(\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \tau\right)}{(1-s^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{s \sinh 2\tau}{2(1-s^2)(1+s \cosh 2\tau)}. \quad (4.146)$$

Da $\mathcal{I}(\tau)$ ungerade ist, ist T_{11} asymptotisch einfach gegeben durch

$$\begin{aligned} T_{11}(\tau_0) &= 2\mathcal{I}(\infty) \left(\tau_0 - \ln \frac{2}{s} \right) + \mathcal{O}(\tau_0 e^{-\tau_0}) \\ &= \frac{\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1-s^2}}{(1-s^2)^{\frac{3}{2}}} \left(\tau_0 - \ln \frac{2}{s} \right) + \mathcal{O}(\tau_0 e^{-\tau_0}) \\ &= \frac{(a^2+1)^3}{(a^2-1)^3} \left(\ln a - \frac{a^2-1}{a^2+1} \right) \left(\tau_0 - \ln \frac{a^2+1}{a} \right) + \mathcal{O}(\tau_0 e^{-\tau_0}), \end{aligned} \quad (4.147)$$

mit $2\mathcal{I}(\infty) = \mathcal{N}^{-2}$.

$T_{12}(\tau_0)$ schreibt sich nun explizit

$$T_{12} = \underbrace{\frac{s}{(1-s^2)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} \frac{\sinh 2\tau}{1+s \cosh 2\tau} 2 \operatorname{artanh} \left(\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \tau \right) d\tau}_{T_{121}} - \underbrace{\frac{1}{1-s^2} \int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} \frac{s^2 \sinh^2 2\tau}{(1+s \cosh 2\tau)^2} d\tau}_{T_{122}}. \quad (4.148)$$

Den Integranden von T_{122} kann man noch etwas modifizieren

$$\begin{aligned} \ln(T_{122}) &= \frac{s^2 \sinh^2 2\tau}{(1+s \cosh 2\tau)^2} \\ &= \frac{s^2 \cosh^2 2\tau - s^2}{(1+s \cosh 2\tau)^2} \\ &= \frac{(1+s \cosh(2\tau))^2 - 2(1+s \cosh(2\tau)) + 1 - s^2}{(1+s \cosh 2\tau)^2} \\ &= 1 - \frac{2}{1+s \cosh 2\tau} + \frac{1-s^2}{(1+s \cosh 2\tau)^2}, \end{aligned} \quad (4.149)$$

so dass die Auswertung auf die Integrale aus (4.95) und (4.96) zurückgeführt wurde

$$\begin{aligned} T_{122} &= \frac{\tau_0}{1-s^2} - \frac{2 \operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right)}{(1-s^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{\operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) - \sqrt{1-s^2}}{(1-s^2)^{\frac{3}{2}}} \\ &= \frac{\tau_0}{1-s^2} - \frac{\operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) + \sqrt{1-s^2}}{(1-s^2)^{\frac{3}{2}}} \end{aligned} \quad (4.150)$$

$$= \frac{(a^2+1)^2}{(a^2-1)^2} \tau_0 - \frac{(a^2+1)^3}{(a^2-1)^3} \left(\ln a + \frac{a^2-1}{a^2+1} \right). \quad (4.151)$$

Konvergente Integrale wurden wie immer direkt vervollständigt. Für T_{121} benutzen wir wieder die Relation (4.102)

$$\begin{aligned} T_{121} &= \frac{s \operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right)}{(1-s^2)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} \frac{\sinh 2\tau}{1+s \cosh 2\tau} d\tau \\ &\quad - \frac{s}{(1-s^2)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} \frac{\sinh 2\tau}{1+s \cosh 2\tau} \ln \left[\frac{e^{2\tau} + \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}}{e^{2\tau} + \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}} \right] d\tau. \end{aligned} \quad (4.152)$$

Das erste Integral verschwindet, da der Integrand ungerade ist. Für das verbleibende Integral ist es zweckmäßig nun wieder die Variable a einzuführen und $z = e^{2\tau}$ zu

substituieren.

$$T_{121} = \frac{(a^2 + 1)^3}{2(a^2 - 1)^3} \int_{Z_0}^{1/Z_0} \underbrace{\frac{a(z^2 - 1)}{z(a+z)(1+az)}}_{R_{121}(z)} \left\{ -2 \ln a + \ln \left[\frac{1+az}{1+\frac{z}{a}} \right] \right\} dz \quad (4.153)$$

Die rationale Funktion zerlegen wir wieder in Partialbrüche

$$R_{121}(z) = -\frac{1}{z} + \frac{1}{z+a} + \frac{1}{z+\frac{1}{a}} \quad (4.154)$$

und erkennen nach der Integration

$$\begin{aligned} \int R_{121}(z) dz &= -\ln z + \ln(z+a) + \ln\left(z + \frac{1}{a}\right) \\ &= \ln\left(\frac{(z+a)(1+az)}{az}\right), \end{aligned} \quad (4.155)$$

dass der in \ln konstante Term in der geschweiften Klammer aus den gleichen Gründen ($z \rightarrow \frac{1}{z}$) verschwindet wie bei der Berechnung des Beitrages T_{52} in (4.131). Das somit letzte Integral kann unter Zuhilfenahme von (4.137) gelöst werden, mit dem Ergebnis

$$\begin{aligned} T_{121} &= \frac{(a^2 + 1)^3}{2(a^2 - 1)^3} \int_{Z_0}^{1/Z_0} R_{121}(z) \ln \left[\frac{1+az}{1+\frac{z}{a}} \right] \\ &= -\frac{(a^2 + 1)^3}{(a^2 - 1)^3} \ln a \cdot \ln Z_0 + \frac{(a^2 + 1)^3}{(a^2 - 1)^3} \left\{ \text{Li}_2(1 - a^2) + \ln^2 a \right\} + \mathcal{O}(Z_0) \\ &= \frac{(a^2 + 1)^3}{(a^2 - 1)^3} \ln a \cdot \tau_0 + \frac{(a^2 + 1)^3}{(a^2 - 1)^3} \left\{ \text{Li}_2(1 - a^2) + \ln^2 a \right\} + \mathcal{O}(e^{-\tau_0}). \end{aligned} \quad (4.156)$$

Zusammengefasst ergibt sich damit

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{T_1(\tau)}{(1 + s \cosh 2\tau)^2} d\tau &= -\frac{3(a^2 + 1)(a^2 - 1)}{8(a^4 + 4a^2 + 1)} \left\{ T_{11} - T_{12} \right\} \\ &= -\frac{3(a^2 + 1)(a^2 - 1)}{8(a^4 + 4a^2 + 1)} \left\{ T_{11} - T_{121} + T_{122} \right\} \\ &= -\frac{3(a^2 + 1)(a^2 - 1)}{8(a^4 + 4a^2 + 1)} \\ &\quad \times \underbrace{\left\{ \frac{(a^2 + 1)^2}{(a^2 - 1)^2} \left[\frac{(a^2 + 1)}{(a^2 - 1)} \left(\ln a - \frac{a^2 - 1}{a^2 + 1} \right) - \frac{(a^2 + 1)}{(a^2 - 1)} \ln a + 1 \right] \right\}}_{=0} \tau_0 \\ &\quad - \frac{(a^2 + 1)^3}{(a^2 - 1)^3} \left[\left(\ln a - \frac{a^2 - 1}{a^2 + 1} \right) \ln \frac{a^2 + 1}{a} + \left\{ \text{Li}_2(1 - a^2) + \ln^2 a \right\} \right. \\ &\quad \left. + \left(\ln a + \frac{a^2 - 1}{a^2 + 1} \right) \right] \Bigg\} + \mathcal{O}(\tau_0 e^{-\tau_0}) \end{aligned} \quad (4.157)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{3}{8} \frac{(a^2+1)^2}{a^4+4a^2+1} \frac{(a^2+1)^2}{(a^2-1)^2} \left\{ \text{Li}_2(1-a^2) + [1 + \ln(a^2+1)] \ln a \right. \\
&\quad \left. + [1 - \ln(a^2+1) + \ln a] \frac{a^2-1}{a^2+1} \right\}. \tag{4.158}
\end{aligned}$$

Bevor wir die Beiträge nun zusammenfügen, hier nochmal eine Übersicht:

$$\begin{aligned}
T_1 &= \frac{3}{8} \frac{(a^2+1)^2}{a^4+4a^2+1} \frac{(a^2+1)^2}{(a^2-1)^2} \left\{ \text{Li}_2(1-a^2) + [1 + \ln(a^2+1)] \ln a \right. \\
&\quad \left. + [1 - \ln(a^2+1) + \ln a] \frac{a^2-1}{a^2+1} \right\} \tag{4.159}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_2 &= -\frac{1}{6} \frac{(a^2+1)^3 \ln^3 a}{(a^2-1)^3} + \frac{(a^2+1)^2 \ln^2 a}{4(a^2-1)^2} - \left\{ \frac{(a^2+1)^2 \ln(1-a^2)}{2(a^2-1)^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{12} \frac{(a^2+1)^3 (\pi^2 + 6 \text{Li}_2(a^2))}{(a^2-1)^3} \right\} \ln a + \frac{(a^2+1)^2 (\pi^2 - 6 \text{Li}_2(a^2))}{24(a^2-1)^2} \\
&\quad - \frac{(a^2+1)^3 (\zeta(3) - \text{Li}_3(a^2))}{2(a^2-1)^3} \tag{4.160}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_3 &= \frac{3}{8} \frac{(a^2+1)^4}{(a^2-1)^2 (a^4+4a^2+1)} \left\{ \ln^2 a - \ln(a^2+1) \ln a + \frac{2}{a^2+1} \ln a \right. \\
&\quad \left. + \frac{a^2-1}{a^2+1} \ln(a^2+1) - \frac{a^2-1}{a^2+1} \right\} + \frac{(a^2+1)^2}{4(a^2-1)^2} \ln a - \frac{a^2+1}{4(a^2-1)} \tag{4.161}
\end{aligned}$$

$$T_4 = -\frac{1}{8} \frac{(a^2+1)^2}{a^4+4a^2+1} \ln a \tag{4.162}$$

$$\begin{aligned}
T_5 &= \frac{1}{8} \frac{(a^2+1)^2}{a^4+4a^2+1} \left\{ \text{Li}_2(1-a^2) + \ln^2 a + \frac{3(a^2+1)^2}{(a^2-1)^2} \left[\ln a - \frac{a^2-1}{a^2+1} \right] \right\} \\
&\tag{4.163}
\end{aligned}$$

Mit der Definition $\mathcal{T}(a) = T_1 + T_2 + T_3 + T_4 + T_5$ folgt schließlich

$$\begin{aligned}
\mathcal{T} &= \frac{(a^2+1)^2}{2(a^4+4a^2+1)} \frac{(a^2+1)^2}{(a^2-1)^2} \left\{ \frac{a^4+a^2+1}{(a^2+1)^2} \text{Li}_2(1-a^2) - \frac{1}{4} \frac{(a^2-1)^2}{(a^2+1)^2} \right. \\
&\quad \left. \times (1 - \ln a) \ln a + \frac{3(3 + \ln a)}{4} \ln a - \frac{3}{4} \frac{a^2-1}{a^2+1} \right\} \\
&\quad + \frac{(a^2+1)^3}{(a^2-1)^3} \left\{ \frac{1}{4} \frac{a^2-1}{a^2+1} [1 + \ln a - 2 \ln(1-a^2)] \ln a - \frac{\ln^3 a}{6} - \frac{1}{4} \frac{(a^2-1)^2}{(a^2+1)^2} \right\}
\end{aligned}$$

$$- \frac{\pi^2 + 6 \operatorname{Li}_2(a^2)}{12} \ln a + \frac{(a^2 - 1)}{(a^2 + 1)} \frac{[\pi^2 - 6 \operatorname{Li}_2(a^2)]}{24} - \frac{\zeta(3) - \operatorname{Li}_3(a^2)}{2} \Bigg\}. \quad (4.164)$$

Berücksichtigt man auch noch den Vorfaktor

$$\frac{s^2 + 2}{\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1 - s^2}} = - \frac{2(a^4 + 4a^2 + 1)}{(a^2 + 1)^2 \left(\ln a - \frac{a^2 - 1}{a^2 + 1}\right)}$$

in (4.110) und die auf Euler zurückgehende Identität

$$\frac{\pi^2}{6} - \operatorname{Li}_2(a^2) = \ln(a^2) \ln(1 - a^2) + \operatorname{Li}_2(1 - a^2), \quad (4.165)$$

so erhält man nach einigen Vereinfachungen endlich die gesuchte Größe

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & \frac{-1}{\left(\ln a - \frac{a^2 - 1}{a^2 + 1}\right)} \frac{(a^2 + 1)^2}{(a^2 - 1)^2} \left\{ \frac{3}{2} \operatorname{Li}_2(1 - a^2) + \frac{5}{4} \frac{a^4 + \frac{14}{5}a^2 + 1}{(a^2 + 1)^2} \left[\ln a^2 - \frac{a^2 - 1}{a^2 + 1} \right] \right. \\ & \left. + \frac{3}{2} \ln^2 a \right\} - \frac{2(a^4 + 4a^2 + 1)}{(a^2 + 1)^2 \left(\ln a - \frac{a^2 - 1}{a^2 + 1}\right)} \frac{(a^2 + 1)^3}{(a^2 - 1)^3} \left\{ - \frac{\ln^3 a}{6} - \frac{\zeta(3) - \operatorname{Li}_3(a^2)}{2} \right. \\ & \left. - \frac{\pi^2 + 6 \operatorname{Li}_2(a^2)}{12} \ln a \right\} \end{aligned} \quad (4.166)$$

$$\begin{aligned} = & \frac{1}{\left[\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1 - s^2}\right] (1 - s^2)} \left\{ \frac{3}{2} \operatorname{Li}_2 \left[2 \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1} \left(\frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1} \right) \right] \right. \\ & \left. - \frac{5 + s^2}{4} \left[2 \operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1 - s^2} \right] + \frac{3}{2} \operatorname{arcosh}^2\left(\frac{1}{s}\right) \right\} \\ & - \frac{s^2 + 2}{\left[\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1 - s^2}\right] (1 - s^2)^{\frac{3}{2}}} \left\{ - \frac{\zeta(3) - \operatorname{Li}_3 \left[\left(\frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1} \right)^2 \right]}{2} \right. \\ & \left. + \frac{\operatorname{arcosh}^3\left(\frac{1}{s}\right)}{6} + \frac{\pi^2 + 6 \operatorname{Li}_2 \left[\left(\frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1} \right)^2 \right]}{12} \operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.167)$$

Graphisch ist diese Funktion in 4.1 abgebildet. Für $s \rightarrow 1$ nimmt sie den Wert $\mathcal{Z}(1) = -\frac{1}{12}$ an. Die Greensfunktion für das RAZAVY-Potential lautet in dieser Darstellung

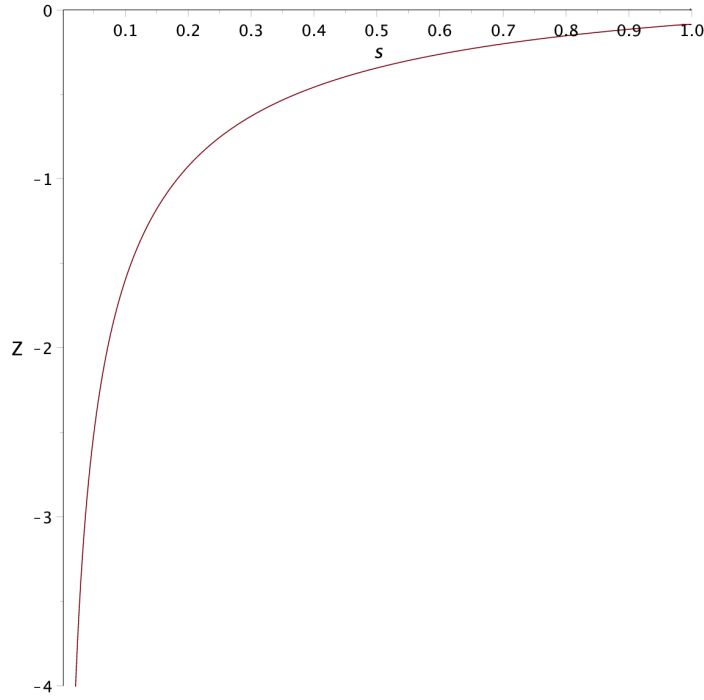


Abbildung 4.1: benötigte Konstante \mathcal{Z} in der Greensfunktion $G'(t, t')$

dann

$$\begin{aligned}
G'(t, t') = & \frac{1}{\omega} \frac{1}{(1 + s \cosh \omega t)(1 + s \cosh \omega t')} \left\{ [2 \Theta(t - t') - 1] \left[(s^2 + 2) \right. \right. \\
& \times \frac{\omega(t' - t)}{4} + s \sinh \omega t' \left(1 + \frac{s}{4} \cosh \omega t' \right) - s \sinh \omega t \left(1 + \frac{s}{4} \cosh \omega t \right) \Big] \\
& + \mathcal{J}_1(t) \left[\frac{(s^2 + 2) \omega t}{4} + s \sinh \omega t \left(1 + \frac{s}{4} \cosh \omega t \right) \right] \\
& + \mathcal{J}_1(t') \left[\frac{(s^2 + 2) \omega t'}{4} + s \sinh \omega t' \left(1 + \frac{s}{4} \cosh \omega t' \right) \right] \\
& \left. + [\mathcal{Z} - 2 \mathcal{J}_2(t) - 2 \mathcal{J}_2(t')] \frac{(1 - s^2)^{\frac{3}{2}}}{\operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) - \sqrt{1 - s^2}} \right\} \quad (4.168)
\end{aligned}$$

mit den beiden oben berechneten Funktionen

$$\mathcal{J}_1(t) = \frac{2 \operatorname{artanh} \left[\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \frac{\omega t}{2} \right] - \frac{\sqrt{1-s^2} s \sinh \omega t}{1+s \cosh \omega t}}{\operatorname{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) - \sqrt{1 - s^2}} \quad (4.169)$$

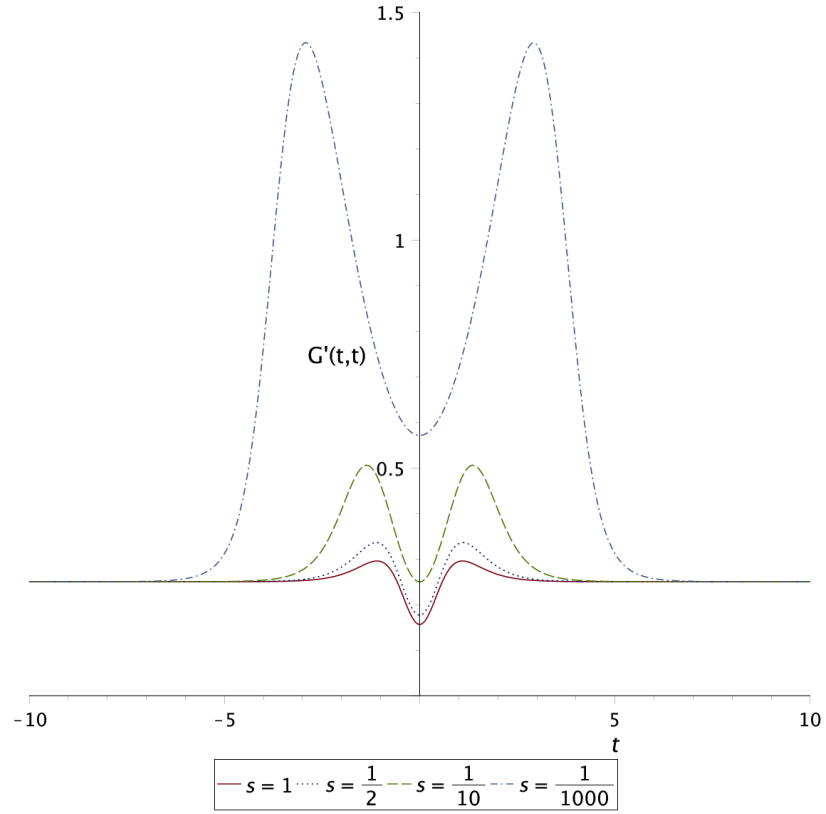


Abbildung 4.2: Greensfunktion $G'(t, t)$ zu gleichen Argumenten mit $\omega = 2$

und

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}_2(t) = & \frac{s^2 + 2}{2(1 - s^2)^{\frac{3}{2}}} \left\{ \frac{1}{4} \text{Li}_2 \left(\frac{-s e^{\omega t}}{1 - \sqrt{1 - s^2}} \right) - \frac{1}{4} \text{Li}_2 \left(\frac{-s e^{\omega t}}{1 + \sqrt{1 - s^2}} \right) \right. \\
 & + \frac{\omega t}{2} \text{arcosh} \left(\frac{1}{s} \right) - \frac{\omega t}{4} \ln \left[\frac{e^{\omega t} + \frac{1}{s} + \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}}{e^{\omega t} + \frac{1}{s} - \sqrt{\frac{1}{s^2} - 1}} \right] \left. \right\} + \frac{3}{8} \frac{\ln \frac{2}{s}}{1 - s^2} \\
 & + \frac{3}{8(1 - s^2)} \ln(1 + s \cosh \omega t) - \frac{\frac{3}{8} + \frac{s^2 + 2}{8(1 - s^2)} s \omega t \sinh \omega t}{1 + s \cosh \omega t}. \quad (4.170)
 \end{aligned}$$

Wenn man möchte kann man auch noch die Funktionen \mathcal{J}_i explizit einsetzen und erhält nach einigen Vereinfachungen

$$\begin{aligned}
 G'(t, t') = & \frac{1}{\omega} \frac{1}{(1 + s \cosh \omega t)(1 + s \cosh \omega t')} \left\{ [2 \Theta(t - t') - 1] \left[\frac{(s^2 + 2) \omega (t' - t)}{4} \right. \right. \\
 & \left. \left. + s \sinh \omega t' \left(1 + \frac{s}{4} \cosh \omega t' \right) - s \sinh \omega t \left(1 + \frac{s}{4} \cosh \omega t \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1-s^2}} \left[2 \operatorname{artanh}\left(\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \frac{\omega t}{2}\right) \left(1 + \frac{s}{4} \cosh \omega t\right) \right. \\
& \times s \sinh \omega t - \frac{\sqrt{1-s^2}}{4} \left[(1 + s \cosh \omega t)^2 + (1 + s \cosh \omega t) - (s^2 + 5) \right] \\
& - \frac{s^2 + 2}{4} \left[\operatorname{Li}_2\left(\frac{-s e^{\omega t}}{1 - \sqrt{1-s^2}}\right) - \operatorname{Li}_2\left(\frac{-s e^{\omega t}}{1 + \sqrt{1-s^2}}\right) + \omega t \operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) \right] \\
& \left. - \frac{3\sqrt{1-s^2}}{4} \ln\left(\frac{2}{s} + 2 \cosh \omega t\right) \right] \\
& + \frac{1}{\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1-s^2}} \left[2 \operatorname{artanh}\left(\sqrt{\frac{1-s}{1+s}} \tanh \frac{\omega t'}{2}\right) \left(1 + \frac{s}{4} \cosh \omega t'\right) \right. \\
& \times s \sinh \omega t' - \frac{\sqrt{1-s^2}}{4} \left[(1 + s \cosh \omega t')^2 + (1 + s \cosh \omega t') - (s^2 + 5) \right] \\
& - \frac{s^2 + 2}{4} \left[\operatorname{Li}_2\left(\frac{-s e^{\omega t'}}{1 - \sqrt{1-s^2}}\right) - \operatorname{Li}_2\left(\frac{-s e^{\omega t'}}{1 + \sqrt{1-s^2}}\right) + \omega t' \operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) \right] \\
& \left. - \frac{3\sqrt{1-s^2}}{4} \ln\left(\frac{2}{s} + 2 \cosh \omega t'\right) \right] \\
& \left. + \frac{(1-s^2)^{\frac{3}{2}} \mathcal{Z}}{\operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{s}\right) - \sqrt{1-s^2}} \right\}. \tag{4.171}
\end{aligned}$$

Im Plot der Greensfunktion $G'(t, t)$ für unterschiedliche Parameterwerte s erkennt man, dass diese asymptotisch gegen eine Konstante $(1/2\omega)$ geht. Dies bedeutet, dass die zu berechnenden Integrale divergieren und diese lineare Divergenz später vom Ergebnis abgezogen werden muss. Daher wird in den späteren Rechnungen zum Korrekturfaktor ein Cut-Off $(\pm T/2)$ eingeführt werden müssen. Der Ursprung der in T linearen Divergenz liegt in der Korrektur zum harmonischen Beitrag $e^{\frac{\omega T}{2}}$ in (2.18). Zur Aufspaltung trägt diese konstante Hintergrundenergie daher nicht bei. [4]

5 Zusammenfassung und Diskussion

Wir rekapitulieren noch einmal die wesentlichen Schritte die zu (3.53) geführt haben und diskutieren die Ergebnisse.

5.1 Zusammenfassung

Die Übergangsamplitude (2.3) kann mit Hilfe des Pfadintegrals (2.6) berechnet werden und wegen (2.16) in Bezug zu den Eigenenergien des RAZAVY-Potentials gestellt werden. Da das Pfadintegral zu diesem Potential allerdings nicht in geschlossener Form berechnet werden kann, diente die Sattelpunktmethode als semiklassische Näherung, bei der die Wirkung im Exponenten des Pfadintegrals um ihr Minimum entwickelt wurde (2.9) und zu der in (2.20) angegebenen Form für das Pfadintegral führte. Die Randbedingungen konnten nun so gewählt werden, dass für die Variationspfade ein Verschwinden an den Rändern gefordert wurde. Nun ist das Minimum der Wirkung aber gerade durch die klassische Lösung der Bewegungsgleichung gegeben, die man als Kink-Lösung bezeichnet (siehe Abbildung 2.4). Auf Grund der Zeittranslationsinvarianz der Bewegungsgleichung ist das Minimum allerdings gar nicht eindeutig bestimmt. Hinzu kommt, dass die Ableitung der Kinklösung ein exponentiell abklingendes Verhalten besitzt. In dem von uns betrachteten Limes $T \rightarrow \infty$ ist $\dot{x}_{\text{kl}}(t)$ daher eine (nicht normierte) Eigenfunktion, die an den Rändern verschwindet und deshalb wegen (2.10) der zugehörige Eigenwert 0 im Spektrum des Operators liegt.

Um das Pfadintegral zu berechnen, entwickelten wir die Variationspfade nach den Eigenfunktionen des Operators und transformierten das Integrationsmaß auf die Koeffizienten ($\mathcal{D}x \rightarrow \mathcal{D}c$). Die verbleibenden Integrale (2.22) gaußscher Natur konnten bis auf die sogenannte Nullmode ausgeführt werden und lieferten ein Produkt von Eigenwerten, das wir nach Überlegungen aus der Linearen Algebra mit der Determinante des Operators identifizierten. Ein Strich kennzeichnete den Umstand, dass wir den Eigenwert 0 unberücksichtigt lassen mussten.

In einem nächsten Schritt transformierten wir die c_0 -Integration in eine über die Zeittranslationsvariable. Ferner stellten wir fest, dass das vorläufige Ergebnis (2.35) nur die führende Ordnung der zugrundeliegenden Reihe darstellt. Dies veranlasste uns dazu, höhere Ordnungen durch sogenannte Multi-Instanton-Beiträge zu berechnen. Grundlage dieser Überlegung war die Annahme, dass innerhalb des großen Intervalls T nicht nur ein einziger Kink Platz hat, sondern auch Lösungen konstruiert werden können, bei denen das Teilchen der Masse m mehrfach zwischen den Werten $\pm a$ hin- und herläuft. Eine Berücksichtigung aller dieser Beiträge ergab schließlich die Lösung (2.18) und für

die Energieaufspaltung

$$\Delta E = 2\hbar\mathcal{K} e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{kl}]} . \quad (5.1)$$

Die verbleibende zu berechnende Größe R bzw. \mathcal{K} beinhaltet die soeben erwähnte Determinante, für deren Berechnung zwei Verfahren vorgestellt wurden: Die Gelfand-Yaglom-Methode und die direkte Berechnung der Eigenwertprodukte, wobei durch die Beschränktheit von $V''(x_{kl}(t))$ das Kontinuum separat berücksichtigt werden musste. Ersteres Verfahren musste allerdings zunächst noch modifiziert werden, um die lästige Nullmode los zu werden. Nach Coleman-Affleck erhielt man schließlich das einfache Ergebnis

$$\mathcal{K} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} A , \quad (5.2)$$

wobei A gegeben war durch Vergleich der abgeleiteten Kink-Lösung $\dot{x}_{kl}(t)$ mit $A e^{-\omega|t|}$ im asymptotischen Limes. Auch wurde mit (3.4) ein Ergebnis des Determinantenverhältnisses angegeben.

Die explizite Berechnung der Eigenwerte gestaltete sich ein wenig schwieriger. Mit (3.7) hatte man die zu lösende Eigenwertgleichung auf eine numerisch handhabbare Form gebracht. Die Lösung (3.14) beinhaltete jedoch die Heun-Funktionen, die in ihrer allgemeinen Form keine geschlossene Darstellung besitzen. Leider sind für diese nicht einmal die sogenannten „connection formulae“ bekannt, die eine Lösung um eine gegebene Singularität als Linearkombination zweier Fundamentallösungen um eine andere Singularität ausdrücken. Daher wurde die Wronski-Methode numerisch implementiert, um sowohl die diskreten Eigenwerte als auch die Phasenverschiebungen zu bestimmen (siehe Tabelle 3.1-3.4 und Abb. 3.3/3.4). Mit Tab. 3.6 sollte lediglich eine Gegenüberstellung beider Herangehensweisen stattfinden. Der Fehler für $s = \frac{1}{1000000}$ fällt nur deshalb so groß aus, da für seine Berechnung noch weitere Näherungen herangezogen wurden. Konkret fanden die Phasenverschiebungen des endlich hohen Potentialtopfes Verwendung, da die Numerik von maple in diesem s -Regime versagte und für solch kleine s -Werte das modifizierte Potential (Abb. 3.5) annähernd die Gestalt eines Kastenpotentials hat, insbesondere bei beiden aber auch die gleiche Anzahl an gebundenen Zuständen auftreten. Dies ist wichtig, da sich die Anzahl der bound-states in den Phasenverschiebungen bemerkbar machen.

Die Äquivalenz der vielleicht bekannteren WKB-Methode und der Pfadintegral-Methode wurde durch Vergleich von (2.116) mit (3.53) bestätigt.

5.2 Diskussion

Die exakten Energieaufspaltungen $\Delta\epsilon$ in Tabelle 3.7 implizieren ein $s \rightarrow 0$ Verhalten proportional zu s^n . Ein Vergleich mit (3.53) zeigt daher, dass für diesen Grenzfall die Pfadintegralformel das korrekte Verhalten beschreibt. Insbesondere kann die in [1] vorhergesagte $\frac{1}{s}$ -Abhängigkeit des Korrekturfaktors bestätigt werden. Für den anderen Fall $s \rightarrow 1$ wurde für die Energieaufspaltung ein Verhalten wie $n + 3$ postuliert,

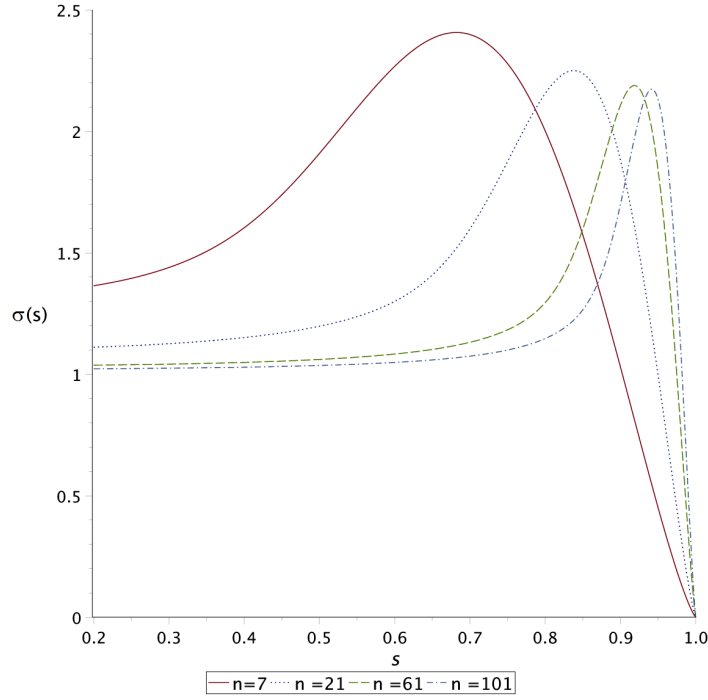


Abbildung 5.1: Verhältnis $\sigma_n(s)$ für $s \gg 0$ in den Fällen $n = 7, 21, 61, 101$

d.h. $E_1 - E_0$ nähert sich dem konstanten Wert $n + 3$. Hinsichtlich der Tatsache, dass für $s = 1$ die Barriere verschwindet, erscheint das Sprechen von einer Aufspaltung jedoch ein wenig optimistisch. Vielmehr werden sich die Energien mehr oder weniger äquidistant verteilen. In Anbetracht dessen erscheint die in (2.17) gemachte Näherung, zwei Terme zu berücksichtigen, deshalb hinfällig und in der Tat verschwindet in diesem Fall nach (3.53) die Energieaufspaltung ΔE auch. Die dabei erhaltene Grundzustandsenergie $E_0 \approx \frac{\hbar\omega}{2}$ entspricht der des harmonischen Oszillators. Das beobachtete $n + 3$ Verhalten kann daher nicht bestätigt werden.

Interessant wäre es allerdings zu überprüfen, wie weit die obige Näherung in den $s \neq 0$ Bereich hinausreicht. In Abbildung 5.1 sind für den Bereich $s \gg 0$ die Fälle $n = 7, 21, 61$ und 101 eingezeichnet. Für $s \rightarrow 0$ hatten wir die Verhältnisse bereits in Tabelle 3.8 angegeben. Offenbar dehnt sich mit zunehmendem n der Gültigkeitsbereich immer weiter aus, gefolgt von einem scharfen Peak, um dann für $s = 1$ rasch gegen 0 zu gehen. Immerhin hat man für $n = 201$ und $s = \frac{1}{2}$ noch immer nur einen Fehler von $\approx 1.79\%$. Für $s = \frac{2}{3}$ beläuft sich die Abweichung bereits auf $\approx 3.07\%$, zu vergleichen mit den $\approx 1\%$ im Falle $s \rightarrow 0$.

Erwähnenswert ist auch die Beobachtung, dass sich die genäherte Aufspaltung der Exakten von oben annähert. Die Ursache liegt darin, dass bei der semiklassischen Näherung der Exponent bei der Entwicklung nach dem quadratischen Term abgebrochen wurde. Dies ist legitim für große n , für kleine n jedoch wird das Integral durch diese Näherung vom Wert her überschätzt, sofern das Potential für $x \rightarrow \infty$ stärker als harmonisch divergiert, wie man an folgendem einfachen Beispiel sieht. Betrachten wir

das eindimensionale Integral

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-f_n(x)} \quad (5.3)$$

mit der Funktion $f_n(x) = (n+1)^2(x^2 + x^4)$. Offenbar divergiert $f_n(x)$ stärker als x^2 und müsste damit die Voraussetzungen erfüllen. Die Lösung des Integrals lautet

$$I_n^{\text{exakt}} = \frac{1}{2} \exp \left[\frac{(n+1)^2}{8} \right] K_{\frac{1}{4}} \left(\frac{(n+1)^2}{8} \right), \quad (5.4)$$

wobei $K_i(x)$ die modifizierte Besselfunktion 2. Art ist. Eine Taylorentwicklung der Funktion $f_n(x)$ bis zum quadratischen Term liefert $f_n(x) \approx (n+1)^2 x^2$ und das genäherte Integral

$$I_n^{\text{harm}} \approx \frac{\sqrt{\pi}}{n+1}. \quad (5.5)$$

Betrachtet man nun die Asymptotik von (5.4)

$$I_n^{\text{exakt}} = \frac{\sqrt{\pi}}{n} - \frac{\sqrt{\pi}}{n^2} + \mathcal{O} \left(\frac{1}{n^3} \right), \quad (5.6)$$

so bemerkt man, dass die führende Ordnung gerade (5.5) entspricht. Für sehr große n ist die Näherung also brauchbar. Ein Blick auf Abbildung 5.2 zeigt aber, dass für $n \rightarrow 0$ starke Diskrepanzen auftreten. Auch wird deutlich, dass der Wert des Integrals in harmonischer Näherung überschätzt wird. Anschaulich folgt dies aus der Überlegung, dass für sehr große n der Exponent bereits für kleine x - noch bevor sich der anharmonische Term bemerkbar macht - so groß geworden ist, dass der Integrand stark unterdrückt ist und im x^4 -dominanten Bereich nur noch exponentiell kleine Abweichungen hervorgerufen werden. Dies trifft auch auf alle anderen Funktionen zu, die asymptotisch stärker als x^2 divergieren.

Um nun das Konvergenzverhalten von σ_n genauer zu analysieren, wurde in Origin [14] eine Funktion an eine Reihe von Werten mit $n \geq 51$ gefittet. Die Wahl fiel auf $\frac{a}{n^b}$, wobei auch kompliziertere Fitfunktionen ausprobiert wurden. Eine Verbesserung gegenüber dieser einfachen Wahl ergab sich jedoch nicht. σ_n verhält sich somit vermutlich wie

$$\sigma_n^t \approx 1 + \frac{a}{n^b} \quad (5.7)$$

mit den Parametern $a = 2.152 \pm 0.003$ und $b = 1.006 \pm 0.004$, die nach der *least square method* bzw. *minimal χ^2 method* bestimmt wurden. χ^2 ist gegeben durch

$$\chi^2 = \sum_n g_n (\sigma_n - \sigma_n^t)^2 \quad (5.8)$$

mit einem Gewichtungsfaktor g_n . Der Plot der numerisch berechneten Werte σ_n und der theoretischen Vorhersage σ_n^t ist in 5.3 zu sehen. Obwohl der Wert $b = 1$ nicht im

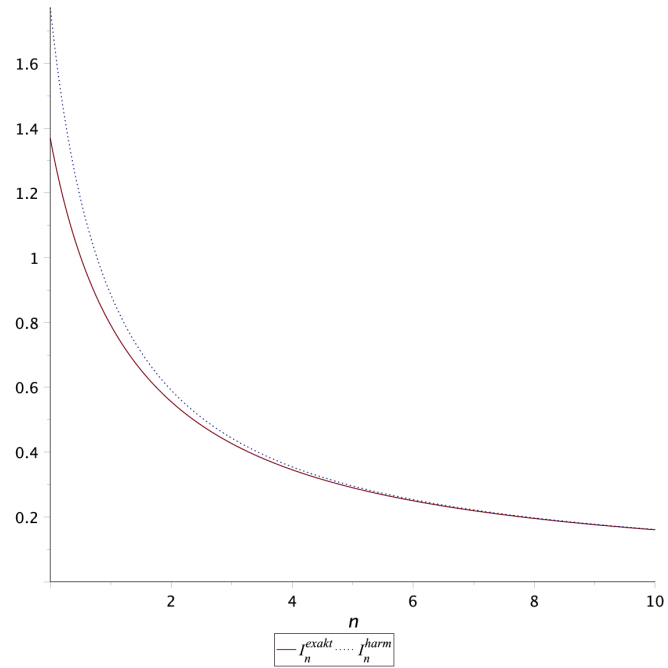


Abbildung 5.2: I_n^{exakt} und I_n^{harm} haben das gleiche asymptotische Verhalten. Für kleine n bricht die Näherung jedoch zusammen.

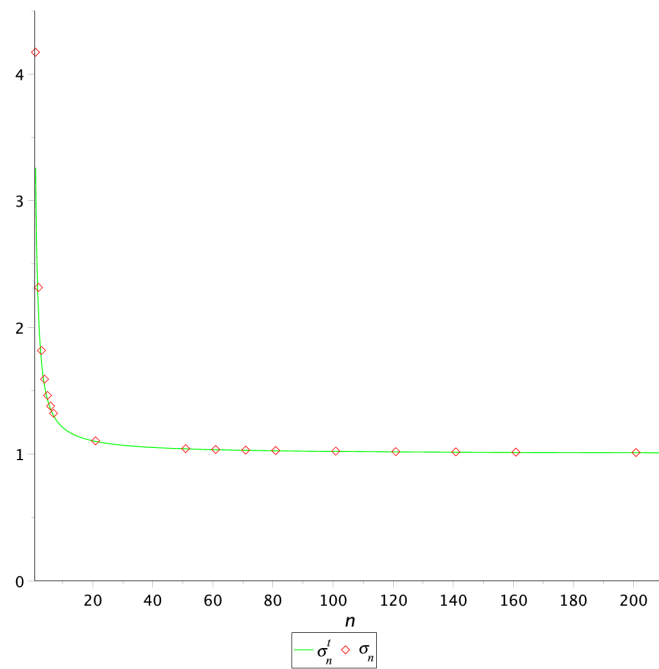


Abbildung 5.3: *least square Fit* σ_n^t an die numerisch berechneten Werte σ_n

Rahmen des Fehlers liegt, ist es doch sehr wahrscheinlich, dass dies der exakte Wert ist, denn der Wert 1.006 liegt für verhältnismäßig kleine n schon sehr nahe an 1. Für eine genauere Analyse müsste das Verhalten für weit größere n bekannt sein. Leider betrug die Rechenzeit für den Fall $n = 201$ schon knapp 2 Tage, so dass auf größere n verzichtet werden musste. Anhand der hier gemachten Bemerkungen erscheint es zumindest plausibel, die bereits erwähnte asymptotische Äquivalenz der Pfadintegralmethode gegenüber dem exakten Ergebnis zu prognostizieren.

Um dies schließlich für den Fall $s \rightarrow 0$ zu zeigen, bemerken wir, dass die Koeffizienten der Entwicklung von $\Delta\epsilon_n$ in Tabelle 3.7 durch ein wenig Nachdenken logisch fortgesetzt werden können. Zwar ist dies kein strenger Beweis, da man unendlich viele Folgen finden kann, die endlich viele Testwerte korrekt wiedergeben. Aber die Einfachheit der Folge und der Faktor $n+1$, der im RAZAVY-Potential auftaucht in Zusammenhang mit der korrekten Wiedergabe für große n - die bei der Aufstellung des Bildungsgesetzes nicht berücksichtigt wurden - lassen darauf schließen, dass es sich in der Tat um die richtige Folge handelt. Auf diese Weise erhält man dann

$$\Delta\epsilon_n^{\text{exakt}} = \frac{8n^2 (n+1)^n}{2^n n!} s^n + \mathcal{O}(s^{n+2}) \quad (5.9)$$

und damit

$$\varrho_n(s) = \frac{8n^2 (n+1)^n}{e^{n+1} n! s}. \quad (5.10)$$

Als nächstes betrachten wir das Verhältnis

$$\sigma_n = \frac{\kappa_n(s)}{\varrho_n(s)} = \frac{e^{n+1} (n+1)^{\frac{3}{2}} n!}{\sqrt{2\pi} n^2 (n+1)^n} \quad (5.11)$$

und benutzen an dieser Stelle die wohlbekannte Stirlingsche Formel [15]

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \exp \frac{1}{12n}, \quad (5.12)$$

womit sich (5.11) zu

$$\begin{aligned} \sigma_n &= \frac{e}{\left(1 + \frac{1}{n}\right)^n} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{\frac{3}{2}} \exp \frac{1}{12n} \\ &= 1 + \frac{25}{12n} + \frac{313}{288n^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^3}\right) \end{aligned} \quad (5.13)$$

vereinfacht. Der Wert $\frac{25}{12} = 2.08\bar{3}$ ist zu vergleichen mit $a = 2.152 \pm 0.003$, der über den Fit ermittelt wurde.

Insbesondere haben wir daher mit (3.53) eine Lösung für die Grundzustandsenergieaufspaltung des RAZAVY-Potentials gefunden, die für hinreichend große n einen nahezu exakten Ausdruck darstellt.

5.3 Ausblick

Das Hauptaugenmerk dieser Arbeit galt der Berechnung der Energieaufspaltung in **semiklassischer** Näherung. Mit Kapitel 4 haben wir aber das nötige Werkzeug bereitgestellt, um prinzipiell die Korrekturen nächst höherer Ordnung, d.h. den Korrekturfaktor in Gleichung (4.41), anzugehen. Anhand der Komplexität der auftretenden Greensfunktion erscheint dies allerdings, wenn denn eine analytische Lösung überhaupt in Frage kommt, mit durchaus viel Arbeit verbunden zu sein und die eigentliche Berechnung der Integrale würde vom Umfang her wohl einer eigenen Arbeit entsprechen. Als Vorgeschmack zeigt dies bereits die Rechnung zur Konstanten \mathcal{Z} . Die Integrale \mathcal{J}_1 , \mathcal{J}_2 und \mathcal{J}_3 sind jedoch noch von ganz anderem „Kaliber“. Hier trifft man statt den bereits begegneten Integralen $\int \mathcal{J}_1 y_{01} y_{02} dt$ und $\int \mathcal{J}_2 y_{01}^2 dt$ auf z.B. $\int V^{(4)}(x_{kl}) \mathcal{J}_1^2 y_{01}^2 y_{02}^2 dt$ oder $\int V^{(4)}(x_{kl}) \mathcal{J}_2^2 y_{01}^4 dt$, und mit Blick auf (4.170) wird einem das Ausmaß klar. Ist allerdings eine analytische Lösung nicht möglich, so verbleiben zum eigentlichen Zweck, die Güte der Pfadintegralnäherung am RAZAVY-Potential zu testen, nur noch numerische Methoden. Die Arbeit dessen hält sich dann vermutlich in Grenzen, da die bereits angegebene Lösung zu $G'(t, t')$ dann einfach in den Computer eingegeben werden kann, der zu festem s die Integrale \mathcal{J}_i in der Variable $\tau = \frac{\omega t}{2}$ löst und tabellarisch den Korrekturfaktor gegen s auflistet.

Quellenverzeichnis

- [1] W.C. POEL: ‘Energieaufspaltung im RAZAVY-Potenzial’ (Bachelorarbeit 2011) - Münster
- [2] M. RAZAVY: ‘An exactly soluble Schrödinger equation with a bistable potential’, *Am. J. Phys.* 48:285-288 (1980)
- [3] G. MÜNSTER: ‘Quantentheorie’, 2. Auflage, *de Gruyter* (2010)
- [4] H. KLEINERT: ‘Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets’, 5. Auflage, *World Scientific* (2009)
- [5] W. NOLTING: ‘Grundkurs Theoretische Physik 5/2, Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen’, 6. Auflage, *Springer* (2006)
- [6] A.K. GARG: ‘Tunnel splittings for one-dimensional potential wells revisited’, *Amer. J. Phys.* 68 430 (2000)
- [7] S. COLEMAN: ‘The Uses of Instantons - Aspects of Symmetry’, *Cambridge University Press* (1985)
- [8] M. MICHAEL: ‘Energieaufspaltung in quasiexakt lösbaren quantenmechanischen Doppelmuldenpotenzialen’ (BA 2011) - Münster
- [9] E. KAMKE: ‘Differentialgleichungen reeller Funktionen’, 4. Auflage, *Akademische Verlagsgesellschaft* (1962)
- [10] F. SCHWABL: ‘Quantenmechanik - Eine Einführung’, 7. Auflage, *Springer* (2007)
- [11] R.S. MAIER: ‘The 192 solutions of the Heun Equation’, *Math. Comp.* 76 811-843 (2007)
- [12] S.H. DONG, Z.Q. MA: ‘Levinson’s Theorem for the Schrödinger Equation in One Dimension’, *Int. J. Theor. Phys.* 39 469-481 (2000)
- [13] MAPLE 17: Maplesoft, a division of Waterloo Maple Inc., Waterloo, Ontario, 2013
- [14] ORIGIN 9: OriginLab Corp., Northampton, Massachusetts, 2012
- [15] H. ROBBINS: ‘A Remark of Stirling’s Formula’, *Amer. Math. Monthly* 62, 26-29 (1955)

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel und Quellen verwendet zu haben.

Münster, den 03. Februar 2014

Christopher Künstler

Ich erkläre mich außerdem mit einem Abgleich der Arbeit mit anderen Texten zwecks Auffindung von Übereinstimmungen sowie mit einer zu diesem Zweck vorzunehmenden Speicherung der Arbeit in eine Datenbank einverstanden.

Münster, den 03. Februar 2014

Christopher Künstler