## 6. Übung

1. **Greenscher Operator und Zustandsdichteoperator:**

Der retardierte (avancierte) Greensche Operator $\hat{\mathcal{G}}^{(\pm)}(E)$ enthält alle relevante Information über das Energiespektrum $\{E_n\}$ des Hamilton-Operators $\hat{H}$, wie an seiner Spektraldarstellung $\hat{\mathcal{G}}^{(\pm)}(E) = \sum\limits_n \dfrac{|n\rangle\langle n|}{E - E_n \pm i\epsilon}$ ersichtlich wird.

a) Der Cauchysche Hauptwert $P\left(\dfrac{1}{z}\right) = \lim\limits_{\epsilon\to 0} \dfrac{z}{z^2+\epsilon^2}$ ist operativ über das Integral

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dz\, f(z)\, P\left(\frac{1}{z}\right) = \lim_{\epsilon\to 0}\left(\int\limits_{-\infty}^{-\epsilon} dz\, \frac{f(z)\, z}{z^2+\epsilon^2} + \int\limits_{+\epsilon}^{+\infty} dz\, \frac{f(z)\, z}{z^2+\epsilon^2}\right) \equiv \lim_{\epsilon\to 0}\left(\int\limits_{-\infty}^{-\epsilon} + \int\limits_{+\epsilon}^{+\infty}\right) dz\, \frac{f(z)}{z}$$

definiert. Zeigen Sie die Diracsche Identität: $\lim\limits_{\epsilon\to 0} \dfrac{1}{x \pm i\epsilon} = P\left(\dfrac{1}{x}\right) \mp i\pi\,\delta(x)$.

b) Leiten Sie ausgehend von der Spektraldarstellung des Greenschen Operators eine Identität zwischen dem (hermitschen) spektralen Zustandsdichteoperator $\hat{\eta}(E) = \sum\limits_n \delta(E - E_n)\, |n\rangle\langle n|$ und den Greenschen Operatoren $\hat{\mathcal{G}}^{(\pm)}(E)$ her.

2. **Pfadintegraldarstellung der zeitabhängigen Greenschen Funktion (Propagator):**

Die Lagrange-Funktion eines eindimensionalen System sei als die quadratische Form gegeben:

$$L(x(t), \dot{x}(t), t) = \frac{m}{2}\,\dot{x}^2(t) + b(t)\, x(t)\dot{x}(t) - \frac{c(t)}{2}\, x^2(t) - e(t)\, x(t)\,.$$

Der Pfadintegralausdruck für die zeitabhängige Greensche Funktion, welche die Propagation des Systems von einer Anfangskonfiguration $(x_a, t_a)$ in die Endkonfiguration $(x_b, t_b)$ beschreibt, lautet

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int\limits_{(x_a,t_a)}^{(x_b,t_b)} \mathcal{D}[x(t)]\, \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_a}^{t_b} dt\, L(x(t), \dot{x}(t))\right) \equiv \int\limits_{(x_a,t_a)}^{(x_b,t_b)} \mathcal{D}[x(t)]\, \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right)\,.$$

Nach Aufteilung der Wirkung $S[x_{kl} + y] = S[x_{kl}] + \tilde{S}[y]$ in den Beitrag $S_{kl} \equiv S[x_{kl}(t)]$ des klassischen Pfades $x_{kl}(t)$ und einen Anteil $\tilde{S}[y]$ aufgrund beliebiger Abweichungen $y(t)$ vom klassischen Pfad, faktorisiert der Propagator in der Form

$$\langle x_b|\, \hat{U}(t_b, t_a)\, |x_a\rangle = G(x_b, t_b; x_a, t_a) = e^{\frac{i}{\hbar} S_{kl}}\; \mathcal{F}(t_b, t_a)\,.$$

Damit reduziert sich die Berechnung der Pfadintegraldarstellung von $G$ auf die Berechnung der Wirkung $S_{kl}$ entlang des klassischen Pfades $x_{kl}(t)$ und einer Funktion $\mathcal{F}(t_b, t_a)$.

a) Zeigen Sie, daß für das Wirkungsintegral $S[x]$ entlang eines beliebigen Pfades $x(t) = x_{kl}(t) + y(t)$, welcher die Randpunkte $x(t_a) = x_{kl}(t_a) = x_a$ und $x(t_b) = x_b = x_{kl}(t_b)$ verbindet, der Ausdruck

$$S[x] = S[x_{kl}] + \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{m}{2}\,\dot{y}^2(t) - \frac{\tilde{c}(t)}{2}\,y^2(t)\right] \equiv S[x_{kl}(t)] + \tilde{S}[y]$$

mit $\tilde{c}(t) = \dot{b}(t) + c(t)$ resultiert.

b) Berechnen Sie nun Sie das Pfadintegral

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(t_b, t_a) &= \int_{(0,t_a)}^{(0,t_b)} \mathcal{D}[y(t)] \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{m}{2}\,\dot{y}^2(t) - \frac{\tilde{c}(t)}{2}\,y^2(t)\right]\right\} \\
&= \lim_{N\to\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dy_N \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N}\left[\frac{m}{2\varepsilon}(y_{j+1}-y_j)^2 - \frac{\varepsilon\tilde{c}_j}{2}\,y_j^2\right]\right\} \\
&= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}} \int d^N y \exp\left(-\vec{y}^{\,T}\,\mathcal{A}\,\vec{y}\right)\,,
\end{aligned}$$

wobei $y_j = y(t_j)$ mit $t_j = t_a + j\,\frac{(t_b - t_a)}{N+1} = t_a + j\varepsilon$, $\vec{y}^{\,T} = (y_1, \cdots y_N)$ und $\tilde{c}_j = \tilde{c}(t_j)$.

Zur Lösungstrategie und Hinweise:

- Bestimmen Sie zunächst die $(N \times N)$-Matrix $\mathcal{A}$ mittels derer sich der Exponent als (*invariante*) quadratische Form $\vec{y}^{\,T}\,\mathcal{A}\,\vec{y}$ schreiben läßt. Überprüfen Sie dabei die Eigenschaft der Matrix: $\mathcal{A} = \mathcal{A}^T$ (bzw. für $\mathcal{A} = i\mathcal{B}$ mit $\mathcal{B}^+ = \mathcal{B}^T = \mathcal{B}$).
- Zeigen Sie nun, daß man für das $N$-fache Integral $\int d^N y\, e^{-\vec{y}^{\,T}\mathcal{A}\,\vec{y}} = \sqrt{\frac{\pi^N}{\det(\mathcal{A})}}$ erhält (Produkt von Gauß-Integralen). Somit für das Pfadintegral $\mathcal{F}(t_b, t_a)$ insgesamt resultiert:
$$\mathcal{F}(t_b, t_a) = \lim_{N\to\infty}\left[\frac{m}{2\pi i\hbar}\,\frac{1}{f(t_b, t_a)}\right]^{\frac{1}{2}}\,, \quad f(t_b, t_a) = \varepsilon\left(\frac{2i\hbar}{m}\right)^N \det(\mathcal{A}) = \varepsilon\det(\mathcal{A}')\,.$$
- Es gilt nun die $(N\times N)$-Determinate $\det(\mathcal{A}') \equiv d_N$ auszuwerten. Dies geschieht mit Hilfe eines üblichen Tricks: Man betrachte $(j \times j)$-Untermatrizen von $\mathcal{A}'$ mit Unterdeterminaten $d_j$. Zeigen Sie, daß die Entwicklung der (Unter-)Determinate $d_{j+1}$ der $(j+1)\times(j+1)$-Untermatrix von $\mathcal{A}'$ nach Minoren auf die Rekursion führt:
$$d_{j+1} = \left(2 - \frac{\varepsilon^2}{m}\tilde{c}_{j+1}\right) d_j - d_{j-1}\,, \quad j = 1, \ldots, N-1\,,$$
wobei $d_1 = 2 - \frac{\varepsilon^2\tilde{c}_1}{2}$ und vereinbarungsgemäß $d_0 = 1$ gilt.
- Deuten Sie die obige Rekursion für die Minoren als eine Differenzengleichung, die im Grenzfall $N \to \infty$ bzw. $\varepsilon \to 0$, in eine Differentialgleichung für die Funktion $f(t, t_a) = \varepsilon d_j$ abhängig von der kontinuierlichen Zeitvariablen $t = t_a + j\varepsilon$ übergeht.
Wie lautet die Differentialgleichung und welche Anfangsbedingungen $f(t_a, t_a)$ und $\left.\frac{\partial f(t,t_a)}{\partial t}\right|_{t=t_a}$ ergeben sich?