Inleiding tot Padintegralen in de Kwantummechanica

Jacques Tempere

Departement Fysica,
Faculteit Wetenschappen,
Universiteit Antwerpen.

Inhoudsopgave

Inleiding **vii**

1 Paden in (kwantum)mechanica en optica **1**
1.1 Het principe van Extremale Actie 2
1.2 Optica en het principe van Fermat 7
1.3 Postulaten voor de Kwantummechanica 12

2 Sommeren over paden **17**
2.1 De samenstellingsregel en de propagator 17
2.2 Time-slicing: paden onder stroboscooplicht 19
2.3 Som over alle time-sliced paden 21
2.4 Toepassing: het vrije deeltje 24
2.5 Diffractie van materiegolven 26

3 Expansie rond het klassieke pad **31**
3.1 Klassiek pad als zadelpunt 31
3.2 Integraal over de kwadratische fluctuaties 33
3.3 Hamilton-Jacobi vergelijking 36
3.4 De WKB formule 38
3.5 De harmonische oscillator 40
3.6 Propagatie van amplitudo's 42

4 Schrödinger's kwantummechanica **45**
4.1 Van padintegraal tot golfvergelijking 45
4.2 Het probleem met de vectorpotentiaal 47
4.3 Van Hamiltoniaan tot padintegraal 51
4.3.1 Tijdsevolutie-operator 51
4.3.2 De Trotter produkt formule 52
4.3.3 Propagator 53
4.4 Perturbatiereeksen en Feynmandiagrammen 55

5 Statistische fysica met padintegralen **59**
5.1 Spectraalvoorstelling van de propagator 59
5.2 Kwantumstatistische fysica 60
5.3 Dichtheidsmatrix als imaginaire-tijd propagator 62

5.4 Harmonische oscillator opnieuw als voorbeeld 64
5.5 Padintegraal voor de dichtheidsmatrix 66

6 Variatierekening met padintegralen 71
6.1 Variatierekening 71
6.2 Jensen-Feynman ongelijkheid 74
6.3 Jensen-Feynman variatiemethode 77
6.3.1 De actie van het echte systeem 77
6.3.2 De probeer-actie van het variationele modelsysteem . . . 78
6.3.3 Feynman-Hellmann theorema 79
6.3.4 Variationele bovengrens 80

A Appendix: dichtheidsmatrices 83

B Appendix: berekening van $\langle\langle \exp\{ikx(\tau_0)\}\rangle\rangle$ 87

Nawoord 89

Hoofdstuk 1

Paden in klassieke mechanica, optica en kwantummechanica

First, you must unlearn what you have learned – Yoda.

De meeste studenten fysica zijn na enkele jaren in hun opleiding gewoon om te werken met wetten die de vorm hebben van differentiaalvergelijkingen. Bijvoorbeeld de wet van Newton, die zegt dat naarmate een object beweegt, de krachten die er op inwerken de volgende stap in de baan van het object bepalen. Dergelijke wetten vertellen je hoe je vertrekkend vanuit je huidige plek, het volgend infinitesimaal stukje baan kan bepalen en zo die baan verder aflegt. Dit komt overeen met onze intuïtie over causaliteit en ons gevoel van voortschrijdende tijd.

Maar er is een krachtige alternatieve formulering om dezelfde fysica te beschrijven. Dit is een formulering die van het ganse pad uitgaat, van begin tot eind, en die iets stipuleert over de integraal langs het ganse pad. Zo'n wetten vertellen je iets over het pad in zijn geheel, in plaats van over een klein stukje van het pad. Dat is een heel ander filosofisch principe om naar de natuur te kijken, waar causaliteit niet meer domineert. In dit hoofdstuk gaan we de klassieke mechanica en de optica in deze filosofie bekijken. Dan gaan we naar de kwantummechanica, waarbij je gerust al je vorige kwantummechanica mag vergeten – we gaan van nul beginnen en postulaten opstellen. Het aantonen dat deze postulaten nog steeds compatibel zijn met de kwantummechanica zoals je'm geleerd hebt, stellen we uit naar een later hoofdstuk.

1.1 Klassieke mechanica en het principe van extremale actie

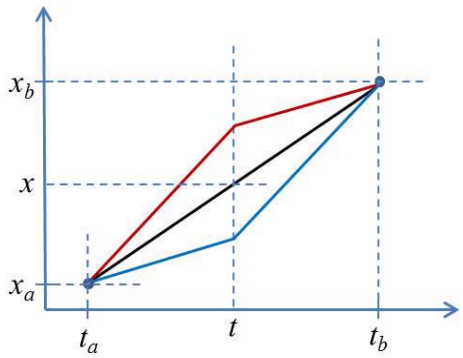
De klassieke mechanica heeft als doel om de baan van een (of meer) massadeeltje(s) uit te rekenen. Stel dat een docent een krijtje gooit naar een dagdromende student. Dat krijtje volgt een welbepaald traject om in een bepaalde tijd de dagdromer bij de les te halen. Nu proberen we in onze verbeelding eens een ander pad, een zot pad met allerlei bochten en kronkels, waarbij het magische krijtje nog wel in dezelfde tijd van de docent naar de dagdromer gaat. Welnu, daarbij blijkt het volgende te gelden:

> Als je de kinetische energie van het krijtje uitrekent op elk ogenblik langs het pad en je trekt er de potentiële energie van af, en je integreert dat langs het ganse pad, dan zal het getal dat je bekomt altijd **groter** zijn dan het getal bekomen voor het juiste, echt gevolgde traject.

De bewegingswetten van de klassieke mechanica kunnen uit bovenstaand principe afgeleid worden, niet enkel voor krijtjes in de les, maar natuurlijk voor massadeeltjes allerhande. Het getal dat we uitrekenen, en dat zijn extremum bereikt is voor het echte traject, is de **actie** $S[x(t)]$. Het is een functionaal, want het heeft een functie $x(t)$ (die het pad beschrijft) als input. De actiefunctional geeft een reëel getal terug, met dimensie van energie maal tijd, (J·s), of equivalent impuls maal plaats ((kg m/s) · m):

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \right] dt. \tag{1.1}$$

Hierin beperken we ons even tot een dimensie (we kijken naar bewegingen op en neer bijvoorbeeld, en niet naar opzij). Verder is m de massa van het deeltje, en $V(x)$ de potentiële energie op plaats x. Proberen we dit even uit voor het geval zonder potentiaal, $V = 0$. Stel dat je van je kot (op x_a) naar de aula (op x_b) wil gaan. Je vertrektijd is t_a, en je wil op t_b aankomen.



Je kan een gelijkmatige snelheid aanhouden (zwarte lijn), of je kan eerst versnellen en dan trager gaan (rode curve), of je kan het eerst rustig aan doen, en dan spurten (blauwe curve). Wat zou een massadeeltje doen waar geen krachten ($V = 0$) op inwerken, met andere woorden voor welk pad is

$$S_0 = \frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 dt \tag{1.2}$$

minimaal ? We weten het antwoord eigenlijk al: dat met een uniforme snelheid; voor snelheden die niet uniform zijn is de gemiddelde van v^2 groter omdat het kwadraat een convexe functie is. Even expliciteren: van tijd t_a tot t is de snelheid $v_1 = (x - x_a)/(t - t_a)$ en van tijd t tot t_2 is de snelheid $v_2 = (x_b - x)/(t_b - t)$, zodat

$$\begin{aligned} S_0 &= \frac{m}{2}\left(\int_{t_a}^{t} v_1^2 dt' + \int_{t}^{t_b} v_2^2 dt'\right) \\ &= \frac{m}{2}\left[\frac{(x-x_a)^2}{t-t_a} + \frac{(x_b-x)^2}{t_b-t}\right]. \end{aligned} \tag{1.3}$$

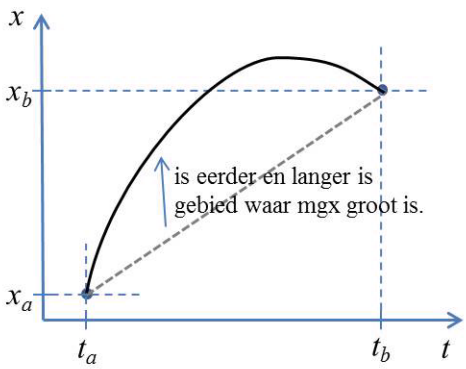
De x waarvoor dit minimaal is, vinden we via

$$\frac{\partial S_0}{\partial x} = 0 \Leftrightarrow \frac{x - x_a}{t - t_a} + \frac{x_b - x}{t - t_b} = 0 \Leftrightarrow v_2 = v_1, \tag{1.4}$$

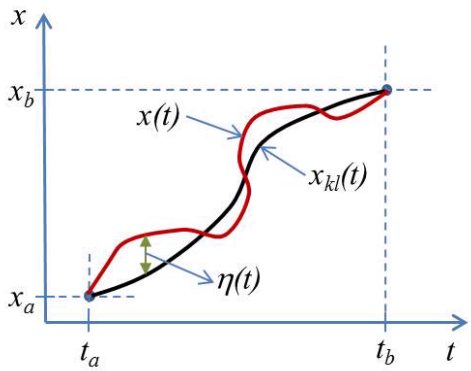
waardoor het traject een rechte is

$$x(t) = x_a + (x_b - x_a)\frac{t - t_a}{t_b - t_a}. \tag{1.5}$$

Wat als we er een potentiaal bij voegen, bijvoorbeeld gravitatie: $V(x) = mgx$? Dit zal een negatieve bijdrage aan de actie geven als x groot is. Als we dus een beetje sneller gaan naar het gebied waar de potentiaal groot is, en daar langer vertoeven, dan is dat beter. Het is wel ten koste van de extra kinetische energie, en we moeten de twee termen zien te balanceren. Het resultaat is een baan die er als volgt uit ziet:



Hoe vinden we in het algemeen het klassieke traject $x_{kl}(t)$ dat de actiefunctionaal minimaal maakt ? Het voorbeeld van het vrije deeltje maakt het ons te simpel met een eenvoudige afgeleide; de actie is geen functie van 1 getal maar van een ganse functie. We komen in het vakgebied van de **variatierekening** (in plaats van het rekenen met een simpele afgeleide). Voor een extremum van een gewone functie weten we het volgende: als we een stapje weg gaan uit het extremum, dan zal de functie ten hoogste veranderen met de tweede orde in de stapgrootte (de eerste orde, de eerste afgeleide, is nul).



Voor functionalen geldt eenzelfde principe: veranderen we zoals in bovenstaande figuur het klassieke traject $x_{kl}(t)$ een klein beetje, naar

$$x(t) = x_{kl}(t) + \eta(t), \tag{1.6}$$

dan mag de actie $S[x(t)]$ slechts veranderen in tweede orde in η, de eerste orde verandering moet wegvallen. We formuleren dit als volgt:

$$\boxed{\text{Langs het klassieke traject } x_{kl}(t) \text{ is de variatie van de actie } \delta S = 0}$$

De variatie δS is het verschil tussen $S[x(t)]$ en $S[x_{kl}(t)]$ tot op eerste orde in $\eta(t) = x(t) - x_{kl}(t)$. Heel de klassieke mechanica zit vervat in de bovenstaande beknopte formulering! Als je klassieke mechanica tot één formule of één recept wil samenvatten, is dat $\delta S = 0$. Laten we deze variatie van de actie uitrekenen voor de algemene vorm (1.1):

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{dx_{kl}}{dt} + \frac{d\eta}{dt} \right)^2 - V(x_{kl} + \eta) \right] dt. \tag{1.7}$$

Uitwerken van het kwadraat en uitvoeren van een Taylorexpansie op de potentiaal geeft:

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{dx_{kl}}{dt} \right)^2 - V(x_{kl}) \right] dt + \int_{t_a}^{t_b} \left[m \frac{dx_{kl}}{dt} \frac{d\eta}{dt} - V'(x_{kl})\eta \right] dt + \mathcal{O}(\eta^2). \tag{1.8}$$

De termen van orde η^2 en $\dot{\eta}^2$ (en hoger) hebben we opzijgezet in $\mathcal{O}(\eta^2)$. De eerste integraal is niets anders dan $S[x_{kl}(t)]$, zodat we vinden dat de variatie van de actie langs het klassieke pad gegeven is door:

$$\delta S = \int_{t_a}^{t_b} \left[m \frac{dx_{kl}}{dt} \frac{d\eta}{dt} - V'(x_{kl})\eta \right] dt. \tag{1.9}$$

Dit moet nul zijn voor alle η. Maar, pas op, dit wil niet zeggen dat de voorfactor van η én die van $d\eta/dt$ allebei tegelijk nul moeten zijn, want $d\eta/dt$ en η zijn niet onafhankelijk van elkaar te kiezen. De methode die altijd weer terugkeert in variatierekening is gebaseerd op hetzelfde werkprincipe:

- Voer de expansie naar eerste orde in η (of afgeleiden ervan) uit.
- Herschik via partiële integratie de integraal zodanig dat alle afgeleiden van η er uit verdwijnen, zodat
- het integrand als $(...) \times \eta$ te schrijven is, en stel dan $(...) = 0$.

Hier hebben we maar 1 partiële integratie te doen om de variatierekening uit te voeren. Deze partiële integratie is

$$\int_{t_a}^{t_b} \frac{dx_{kl}}{dt} \left(\frac{d\eta}{dt} dt \right) = \left(\frac{dx_{kl}}{dt} \eta \right) \Bigg|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{d^2 x_{kl}}{dt^2} \right) \eta dt. \tag{1.10}$$

De rand-term (de eerste term in het rechterlid) valt weg vanwege de randvoorwaarden $\eta(t_a) = 0 = \eta(t_b)$. We beschouwen immers alle paden die vertrekken uit x_a op tijd t_a en aankomen in x_b op tijd t_b, waarbij we dus de eindpunten moeten vasthouden. Met deze partiële integratie vereenvoudigen we de variatie van de actie tot

$$\delta S = \int_{t_a}^{t_b} \left[-m \frac{d^2 x_{kl}}{dt^2} - V'(x_{kl}) \right] \eta(t) dt. \tag{1.11}$$

Dit is nul voor alle mogelijke $\eta(t)$ enkel en alleen indien

$$m \frac{d^2 x_{kl}}{dt^2} = -V'(x_{kl}). \tag{1.12}$$

En aangezien minus de eerste afgeleide van de potentiaal gelijk is aan de kracht, hebben we hier Newton's wet staan:

$$m\ddot{x}_{kl} = F. \tag{1.13}$$

We kunnen dus besluiten dat we een principe hebben, gebaseerd op beschouwingen over een integraal langs het ganse pad, dat equivalent is aan de klassieke mechanica zoals je het eerst kende.

Opmerking 1 – We zien dus dat het klassieke pad niet noodzakelijk een *minimum* moet zijn voor de actie, het volstaat dat het een extremum is. Toch wordt soms de historisch gegroeide naam "principe van minste actie" gebruikt in plaats van het meer correcte "principe van extremale actie".

Opmerking 2 – Het integrand van de actiefunctionaal ken je natuurlijk als de **Lagrangiaan** $L(x, \dot{x})$. Het is duidelijk dat we bovenstaand verhaal, gevoerd voor 1 deeltje in 1 dimensie, gemakkelijk veralgemenen naar N deeltjes in 3 dimensies. Wanneer we dan de variatierekening toepassen vinden we de $(3N)$ Euler-Lagrange bewegingsvergelijkingen

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j}\right) = \frac{\partial L}{\partial x_j}, \tag{1.14}$$

die de wet van Newton veralgemenen. Het bewijs hiervan laat ik als oefening.

Opmerking 3 – Het principe van minste actie werkt ook voor de *relativistische* mechanica, je moet enkel de juiste actiefunctionaal gebruiken. Een zinvolle suggestie is dat we een actiefunctionaal kiezen zodanig dat de "score" van een pad Lorentz-invariant is, en dus onafhankelijk van welke waarnemer de actie uitrekent. Een voorbeeld van zo'n invariant is de infinitesimale lengte

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 \tag{1.15}$$

van een lijnelement in de Minkowski ruimte-tijd. Als actiefunctionaal voor een pad kunnen we als simpelste voorstel de lengte van het pad in ruimte-tijd kiezen:

$$S_0 = -m_0 c \int ds. \tag{1.16}$$

De voorfactor bevat de rustmassa m_0 en de lichtsnelheid c om er voor te zorgen dat de actie de juiste eenheden heeft. Deze formule is onafhankelijk van het gekozen referentiestelsel. Voor een gegeven referentiestelsel $\{x, y, z, t\}$ is

$$\begin{aligned} ds &= \sqrt{c^2(dt)^2 - (dx)^2 - (dy)^2 - (dz)^2} \\ &= \sqrt{c^2 - \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - \left(\frac{dy}{dt}\right)^2 - \left(\frac{dz}{dt}\right)^2}\, dt, \end{aligned} \tag{1.17}$$

zodanig dat

$$S_0 = -m_0 c^2 \int_{t_a}^{t_b} \sqrt{1 - v^2/c^2}\, dt. \tag{1.18}$$

Inderdaad, voor $v \ll c$ vinden we op een constante na de klassieke actie terug na Taylorexpansie van de wortel. Nemen we er nog de elektromagnetische interactie bij, dan is de relativistische actiefunctionaal

$$S = -m_0 c^2 \int_{t_a}^{t_b} \sqrt{1 - v^2/c^2}\, dt - q \int_{t_a}^{t_b} \left[\phi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(x, y, z, t)\right] dt, \tag{1.19}$$

waarin ϕ de scalaire potentiaal is en $\mathbf{A}$ de vectorpotentiaal. Als oefening is het leuk om aan te tonen dat hieruit voor $\mathbf{A} = 0$ volgt dat

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -q\boldsymbol{\nabla}\phi, \tag{1.20}$$

met

$$\mathbf{p} = \frac{m_0\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \tag{1.21}$$

Met deze actiefunctionaal kan je de relativisitische mechanica opnieuw heel eenvoudig uitdrukken door te stellen dat voor het gevolgde pad, $\delta S = 0$.

1.2 Optica en het principe van Fermat

De wetten van de optica zijn ontstaan via de traditionele weg: eerst was er observatie, bijvoorbeeld tabellen van brekingshoeken. Na een tijd merkte men hierin systematiek en ging men fenomenologische verbanden zoeken. Zo kwam Snellius tot zijn brekingswet $\sin\theta_1 = n_{12}\sin\theta_2$, waarin θ_1 en θ_2 de hoeken met de normaal zijn in medium 1 en medium 2. De constante n_{12} is verschillend voor elke combinatie van 2 media. Ten slotte ging men zoeken naar een dieper liggend principe, waaruit de fenomenologische wetten als natuurlijk voortvloeisel voortkomen. Voor de optica werd dit eerst geformuleerd door Fermat:

> Van alle mogelijke paden die het licht kan nemen van A naar B neemt het licht het pad dat in korste tijd van A naar B gaat.

Dit is opnieuw een principe dat handelt over ganse paden, en niet over infinitesimale stukjes paden – het past in de filosofie van dit hoofdstuk. We kunnen de looptijd om een pad $\ell(t)$ te doorlopen schrijven als

$$T = \int_A^B \frac{1}{v(\ell)} d\ell \tag{1.22}$$

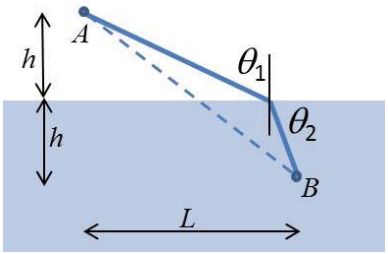
waarbij v de lichtsnelheid is langs het pad (tijd=afstand/snelheid integreren langs het pad). We kunnen het principe van Fermat dan schrijven als een variatieprincipe

$$\delta T = 0 \tag{1.23}$$

waarbij we weerom opmerken dat we hier niet enkel het korste pad hebben, maar elk extremum. Fermat was dus niet helemaal correct. De verbeterde versie van het principe van Fermat is dus:

> Als we een kleine verandering maken in het pad van de lichtstraal, dan is er geen eerste orde verandering in de looptijd, maar op z'n best verandert de looptijd als kwadratisch met de verandering in het pad.

Met dit principe kunnen we breking eenvoudig begrijpen door te stellen dat licht in elk medium een andere snelheid heeft. Het gaat trager in glas dan in lucht. Beschouw dan de volgende situatie:



Je staat op punt A, aan de oever van een rivier, en je ziet op punt B in de rivier je lief in nood. Je wil er zo snel mogelijk naartoe, en je zou geneigd zijn recht er op af te lopen volgens de streepjeslijn. Maar, je beweegt veel trager door water (of je kan je inbeelden dat het modder is). Dus ga je sneller zijn als je wat verder langs de oever loopt om dan een korter stukje door het water te moeten. Dat is ook het idee achter breking van licht. Het licht volgt de volle lijn, niet de streepjeslijn.

Hoe groot is de omweg precies? Dit hangt af van de snelheid in de lucht c_1 en in het water c_2, en van de afgelegde weg in de lucht ℓ_1 en in het water ℓ_2. De looptijd is dan de som van de looptijd in lucht en de looptijd in water:

$$T = \frac{\ell_1}{c_1} + \frac{\ell_2}{c_2}. \tag{1.24}$$

De afgelegde weg in lucht kunnen we schrijven als $h/\cos\theta_1$, en de afgelegde weg in water als $h/\cos\theta_2$, zodat

$$T = \frac{h}{c_1 \cos\theta_1} + \frac{h}{c_2 \cos\theta_2}. \tag{1.25}$$

Als we wiggelen met de hoeken θ_1 en θ_2, dan is de variatie van de looptijd

$$\delta T = h\frac{\sin\theta_1}{c_1 \cos^2\theta_1}\delta\theta_1 + h\frac{\sin\theta_2}{c_2 \cos^2\theta_2}\delta\theta_2. \tag{1.26}$$

Maar we kunnen niet onafhankelijk θ_1 en θ_2 varieren; deze hoeken moeten immers voldoen aan $h(\tan\theta_1 + \tan\theta_2) = L$ om van punt A naar punt B te geraken. Hieruit volgt dat de variaties van de hoeken verbonden zijn via

$$\frac{\delta\theta_1}{\cos^2\theta_1} + \frac{\delta\theta_2}{\cos^2\theta_2} = 0. \tag{1.27}$$

Dit kunnen we in de variatie van de looptijd gebruiken om $\delta\theta_2$ te elimineren:

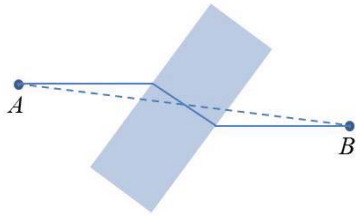
$$\delta T = h\left(\frac{\sin\theta_1}{c_1} - \frac{\sin\theta_2}{c_2}\right)\frac{\delta\theta_1}{\cos^2\theta_1}. \tag{1.28}$$

Dit is nul voor alle $\delta\theta_1$ enkel en alleen indien

$$\sin\theta_1 = \frac{c_1}{c_2}\sin\theta_2 \tag{1.29}$$

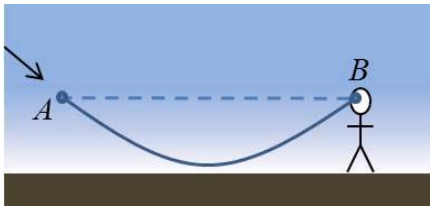
waaruit we inderdaad de wet van Snellius halen, en meer nog, we weten nu dat $n_{12} = c_1/c_2$. Het principe van Fermat is sterker dan de fenomenologische wet van Snellius, want we kunnen er een voorspelling uit maken. Als we tien materialen hebben, zijn er $10 \times 9/2 = 45$ combinaties mogelijk, en heeft Snellius 45 coëfficiënten n_{ij} nodig. Via het principe van Fermat hebben we slechts 10 getallen nodig, 1 per materiaal, namelijk c_j.

We kunnen er nog andere fenomenen mee verklaren, bijvoorbeeld het effect van een gedraaid glazen plaatje op lichtstralen:



Opnieuw wil je zo snel mogelijk van A naar B, maar het glas is als plakkende marmelade waar je niet snel doorheen kan bewegen. De streepjeslijn steekt de marmeladerivier schuin over en blijft langer plakken dan de volle lijn. De natuur vindt het compromis waarbij je wat betaalt door een langer pad te nemen, maar wint doordat het deel van het pad dat door de trage zone gaat, kleiner is. Het correcte pad vind je door de kortste tijd uit te rekenen, net zoals bij breking.

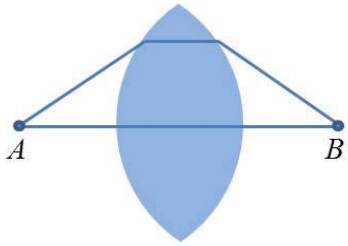
Nog een andere toepassing zijn de fata morgana's of luchtspiegelingen die optreden op een warme dag. Dan is er een laag warme lucht, juist boven de grond. Het licht gaat sneller door warme, ijle lucht dan door koude en dus dense lucht :



De normale rechte weg van A naar B (de streepjeslijn) wordt dan vervormd om een omwegje te nemen langs gebieden waar het licht sneller doorheen kan, vlak bij de grond. Het compromis is dan een curve zoals aangegeven op de figuur, waarbij het licht lijkt te weerspiegelen op de warme grond.

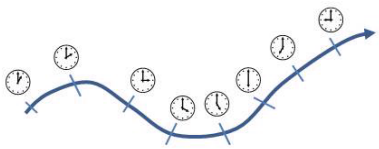
Dat het extremum niet enkel een minimum hoeft te zijn, zien we aan het voorbeeld van een lens, waarbij het start- en eindpunt van het pad in de foci

gekozen worden. Hierbij zijn er een heleboel verschillende trajecten die allemaal een precies even grote doorlooptijd hebben. Dan zal er niet één enkel pad zijn dat het licht neemt van A naar B, maar worden al die paden mogelijk voor lichtstralen die van A naar B gaan:



Het recht pad is korter in lengte, maar gaat langer door het gebied waar licht traag is. Het andere pad maakt een omweg, maar moet minder lang door de marmelade dabben waar het traag gaat. Als A en B foci zijn, dan zijn beide paden juist even snel en dragen ze beiden bij: in B worden alle lichtstralen uit A verzameld.

Nadat Maxwell licht beschreef als een elektromagnetische golf, heeft het principe van Fermat nog een dieper liggende verklaring gekregen, die belangrijk zal worden eens we proberen kwantummechanica te vatten. De fotonen die langs de lichtstraal bewegen worden gekarakteriseerd door een **fase** $\exp\{i\omega t\}$ die meeloopt. Deze fase is als de wijzer van een klok, en draait rond met een periode $2\pi/\omega$.

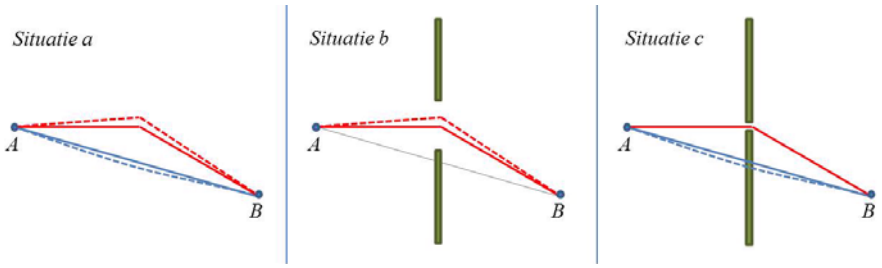


Verschillende paden uit A die aankomen in B zullen in het algemeen aankomen met een verschillende fase. Wanneer naburige paden sterk verschillende fase hebben, dan doven ze elkaar uit door destructieve interferentie. Wanneer naburige paden ongeveer dezelfde fases hebben, dan versterken ze elkaar door constructieve interferentie. Aangezien de fasehoek $\Phi = \omega T$ samenhangt met de looptijd, treedt deze constructieve interferentie slechts op wanneer de looptijd voor naburige paden ongeveer dezelfde is. Met andere woorden, wanneer $\delta T = 0$! De link met de fase laat toe om fenomenen als diffractie van licht en interferentie van licht te begrijpen. We kunnen hiermee het variatieprincipe voor licht in zijn meest complete vorm formuleren:

$$\boxed{\text{Langs het gevolgde lichtpad is de variatie van de fase nul, } \delta\Phi = 0}.$$

Als we een kleine verandering maken in het pad van de lichtstraal, dan is er geen eerste orde verandering in de fase, maar op z'n best verandert de fase als kwadratisch met de verandering in het pad.

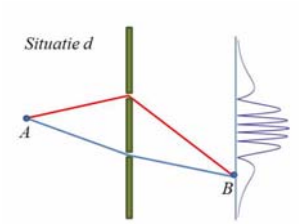
Beschouw nu onderstaande situaties:



In situatie a weten we dat het licht de blauwe rechte volgt. Naburige lichtstralen (de blauwe streepjeslijn) hebben nagenoeg dezelfde fase, of equivalent dezelfde δT. Met andere woorden, als het verschil tussen de blauwe lijn en de blauwe streepjeslijn $\eta(t)$ is, dan is het verschil in looptijd van orde η^2. De lineaire variatie $\delta T = 0$. De rode lijn die een knik maakt en de rode stippellijn voldoen niet aan $\delta T = 0$.want de verandering in looptijd is van eerste orde in de verandering van de curve. We kunnen aantonen dat het licht langs de blauwe rechte gaat door een obstakel tussen A en B te plaatsen, zoals de muurtjes in situatie b. Nu ligt het punt B in de schaduw, het wordt donker, de lichtstralen uit A geraken er niet.

Maar wat gebeurt er als we de opening in de muur nu toeknijpen tot een fijn spleetje? De naburige lichtstralen kunnen niet meer door en kunnen geen destructieve interferentie maken! Er komt meer licht aan in het punt B als de opening in het scherm wordt dichtgeknepen dan wanneer het een grote opening is, in tegenstelling tot wat men intuïtief kan verwachten. Dit gebeurt wanneer de opening van dezelfde grootte is als de golflengte λ van het licht: het zijn lichstralen die in een buurt λ van elkaar liggen die zorgen voor de constructieve of destructieve interferentie. De fase schuift 1 periode op voor een tijd $T = 2\pi/\omega$, dus op een afstand $cT = 2\pi c/\omega = 2\pi/k = \lambda$.

Het associeren van een fase die ronddraait naarmate het pad doorlopen wordt laat ten slotte ook toe om interferentie te begrijpen. Als we in het scherm niet 1 maar 2 kleine gaten maken, dan zijn er maar 2 paden die tot B kunnen geraken. Geen naburige paden, maar hun fases gaan desalniettemin opgeteld moeten worden en er ontstaat een interferentiepatroon:



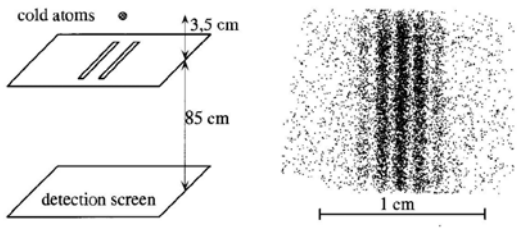
Door met de paden een fase te associëren hebben we niet alleen een natuurlijke verklaring voor Fermat's principe, maar ook nog een manier om interferentie te begrijpen.

1.3 Postulaten voor de Kwantummechanica

Het hart van de kwantummechica is het tweespletenexperiment. We gaan het analyseren en er postulaten voor de kwantummechanica uit destilleren alsof er nooit een Kopenhaagse interpretatie was geweest en geen golffuncties of matrix-operatoren. Het tweespletenexperiment is in eerste plaats een veralgemening naar deeltjes van het interferentie-experiment waar we in de vorige sectie mee eindigden.

> De essentie is dat het interferentiepatroon ook verschijnt voor *deeltjes*, *één per één* afgevuurd en gedetecteerd, waarbij het patroon de *kansverdeling* is voor de plaats van aankomst.
>
> Deze kansverdeling is niet dezelfde als de som van de kansverdelingen om door het ene gat te komen plus dat van het andere gat, zolang het experiment niet kan onderscheiden of het deeltje door een bepaald gat komt.

De deeltjes kunnen elementaire deeltjes zijn zoals elektronen, maar de experimentele waarneming lukt ook voor ganse atomen:



Bovenstaande prent stelt het resultaat voor van een experiment met neon atomen door Shimizu *et al.*, Physical Review A **46**, R17 (1992). Elke stip in het rechterpaneel is een neon atoom dat gedetecteerd wordt op het scherm achter de spleten. Je kan zolang wachten als je wil tussen het afvuren van twee opeenvolgende neon atomen, maar nadat je genoeg atomen hebt afgevuurd zal het stippenpatroon er uitzien zoals op de prent, en interferentiefranjes bevatten. Het opbouwen van het patroon, atoom per atoom, is opmerkelijk: voor een golf verwacht je dat het ganse patroon in één keer tevoorschijn komt wanneer het golffront het scherm bereikt, maar hier is dat dus niet. De andere opmerkelijke eigenschap is dat als je via een lampje probeert te zien waar het atoom zich bevindt en je het door één van de spleten ziet komen, je het andere pad hebt uitgesloten en het interferentiepatroon verdwijnt.

Aangespoord door het succes van het invoeren van een fase om interferentiepatronen uit te leggen, kunnen we uit het kwantummechanische tweespleten-experiment hetvolgende voorstel maken voor "wetten":

1. Met elk pad van A naar B moeten we een fase associëren, of in het algemeen een complex getal ϕ, dat we de **amplitudo** noemen. De modulus kwadraat van deze amplitudo is de kans om het pad van A naar B te volgen.

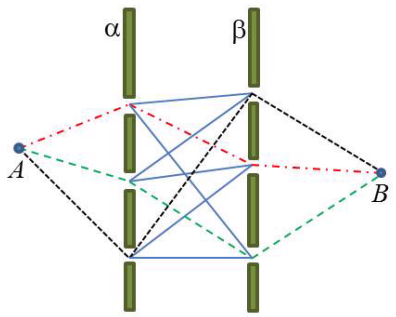
2. Wanneer de twee alternatieve paden mogelijk zijn, met individuele amplitudo's ϕ_1 en ϕ_2 , dan moeten de amplitudo's worden opgeteld: $\phi = \phi_1 + \phi_2$, en daarna pas de modulus kwadraat genomen $P = |\phi_1 + \phi_2|^2$. Dit is het **superpositiebeginsel**.

3. Wanneer de twee paden onderscheiden kunnen worden, dan moeten de kansen opgeteld worden, niet de amplitudo's: $P = |\phi_1|^2 + |\phi_2|^2 = P_1 + P_2$.

Dit kan je beschouwen als de eerste kladversie voor de postulaten van de kwantummechanica.

Nu kan een snuggere student, laten we hem Richard F. noemen, vragen wat er van onze postulaten moet worden als er niet twee alternatieven zijn, maar drie. Het antwoord is duidelijk: dan hebben we voor elk alternatief een amplitudo ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 te bepalen, en is de totale amplitudo een som van deze drie $\phi = \phi_1 + \phi_2 + \phi_3$. Niet van zijn stuk gebracht, gaat Richard F. door, en vraagt wat er gebeurt als er nog meer gaten zijn, vier, vijf, tien? We mogen ons ongeduld niet verliezen met deze student en antwoorden op rustige toon dat het wel vanzelfsprekend is dat je dan gewoon sommeert over alle gaten, $\phi = \sum_j \phi_j$.

Richard F. is al direct klaar met een volgende vraag: "Ja, maar wat als we een tweede scherm met gaten achter het eerste scherm plaatsen?". Wel, dan hebben we natuurlijk meer alternatieven, met samengestelde amplitudos om van de start naar gat nummer j te gaan in scherm α en dan naar gat nummer k in scherm β :



Bijvoorbeeld, het zwarte stippellijn-pad heeft dan een amplitudo ϕ_{α_3,β_1} en de groene streepjeslijn ϕ_{α_2,β_3}. Opnieuw moeten we sommeren over alle mogelijke

mogelijkheden, zodat de amplitudo om van A naar B te gaan nu gegeven wordt door

$$\phi = \sum_i \sum_j \phi_{\alpha_i,\beta_j}. \tag{1.30}$$

Maar ook dit antwoord is niet genoeg voor Richard F., hij blijft maar vragen stellen: "Wat als je een derde, vierde, enz. scherm plaatst? En wat als ik een scherm plaats waar ik oneindig veel gaatjes in boor, zoveel dat het scherm eigenlijk helemaal weggeboord is en er eigenlijk geen scherm meer is? En dan heel veel van die schermen die er niet meer zijn achter elkaar zou zetten?". We zien al waar dit naartoe gaat – zelfs als er geen schermen zijn, dan nog kunnen we de amplitudo opdat een deeltje van A naar B gaat, schrijven als een som over alternatieve paden! De totale amplitudo is dan

$$\phi = \sum_{paden} \phi(pad). \tag{1.31}$$

Hoe we precies de som over paden moeten nemen, zal verderop in de cursus duidelijk worden. Maar je kan terugdenken aan de schermen en een willekeurig pad $x(t)$ via gaten in "schermen" op tijdstippen $t_1, t_2, ..., t_N$ vastleggen. Als het op "tijdscherm" of "frame" t_j doorheen het punt $x(t_j)$ gaat, dan heb je

$$\phi = \sum_{x(t_1)} \sum_{x(t_2)} .. \sum_{x(t_N)} \phi_{x(t_1),x(t_2)...,x(t_N)}. \tag{1.32}$$

Hiervan moet je dan de limiet nemen voor $N \to \infty$. De amplitudo voor een gegeven pad is een functionaal van het pad $x(t)$.

Richard Feynman heeft al dadelijk een goed voorstel klaar voor deze functionaal, een voorstel dat te maken heeft met de actie uit de klassieke mechanica! Met dat voorstel kan hij zijn postulaten van de kwantummechanica opperen:

Postulaten van de Kwantummechanica:
I. Met elk pad $x(t)$ komt een amplitudo overeen die gegeven is door $\exp\{iS[x(t)]/\hbar\}$
II. De amplitudo om van A naar B te gaan is gegeven door de som van de amplitudo's van alle mogelijke paden[1]

Dat is er eentje meer dan wat we hadden voor de klassieke mechanica:

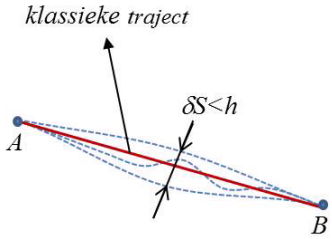
Postulaat van de Klassieke Mechanica:
I. Het klassieke traject $x_{kl}(t)$ is datgene waarvoor de variatie van de actie nul is $\delta S[x_{kl}(t)] = 0$

[1] D.w.z. de mogelijke alternatieven waartussen geen onderscheid kan gemaakt worden door de experimentele opstelling onder beschouwing.

en het zijn er een pak minder dan de axioma's uit de Kopenhaagse interpretatie: we hebben enkel het voorschrift voor de amplitudo van een pad, en het superpositiebeginsel. Bovendien kan je nu mooi de link zien met de klassieke mechanica en de motivatie voor de keuze van $\exp\{iS[x(t)]/\hbar\}$. Beschouw een pad $x(t)$ en een naburig pad $x(t)+\eta(t)$. Als de actie $S[x(t)]$ sterk verschilt van $S[x(t)+\eta(t)]$, dan zullen deze naburige paden elkaar uitdoven via destructieve interferentie, net zoals we dat in de optica zagen. Maar dat wil zeggen dat de enige paden die meetellen diegene zijn waarvoor een kleine variatie in het pad geen variatie in actie geeft tot op eerste orde! Er treedt enkel constructieve interferentie op wanneer de actie niet snel verandert van pad tot nabuurpad, $S[x_{kl}(t)] \approx S[x_{kl}(t)+\eta(t)]$. Maar dit is precies de bewering dat enkel de paden met $\delta S = 0$ meetellen!

Door de keuze van $\exp\{iS[x(t)]/\hbar\}$ als functionaal voor de amplitudo van een pad, heb je in één klap ook het postulaat van de klassieke mechanica mee!

De fase geassocieerd met het pad is niet langer ωt uit de optica, maar $S[x(t)]/\hbar$. Fases moeten dimensieloos zijn, daarom wordt er gedeeld door een constante die dezelfde eenheid heeft als de actie, namelijk $\hbar$. In de optica hebben we gezien dat de paden die elkaar besnuffelen en zorgen voor constructieve of destructieve interferentie de paden zijn die een golflengte uit elkaars buurt liggen. Doorheen gaten veel groter dan de golflengte heb je geen diffractie meer. Hoe zit dat met de paden uit de kwantummechanica? De actiefunctionaal heeft eenheden van impuls p maal plaats x. Als de neon atomen met impuls p worden weggeschoten, vanaf welke grootte van een gat in een scherm treedt diffractie op? We voeren dezelfde redenering als voor de optica: de fase verandert met 2π wanneer de $S/\hbar$ verandert met 2π, wat impliceert dat $px/\hbar$ toeneemt met 2π. De 'golflengte' voor diffractie van kwantumpaden is $x \approx h/p$.



Klassiek is er maar één traject (de rode lijn in bovenstaande prent), maar in de kwantummechanica is er een onbepaaldheid waardoor een bundeltje paden meetelt. Alle paden waarvoor $(\delta S)/\hbar$ nog klein is ten opzichte van 2π hebben geen sterk verschillende fases en doen mee aan de constructieve interferentie, zoals de stippellijnen in bovenstaande prent. Dit geeft aanleiding tot een onbepaaldheid op de plaats, compatibel met Heisenberg's onbepaaldheidsrelatie. Daaraan zien we dat de constante $\hbar$ niets anders kan zijn dan de constante van Planck (gedeeld door 2π). De klassieke limiet wordt bekomen wanneer $\hbar$

klein wordt ten opzichte van de actie $S[x_{kl}(t)]$. Dan trekt de bundel paden die meedoet samen rond $x_{kl}(t)$. Net zoals je in optica geen details kleiner dan de golflengte kan zien (de diffractielimiet), kan je in de kwantummechanica geen details van p maal x kleiner dan $\hbar$ bepalen.

Hoofdstuk 2

Sommeren over paden

If the path be beautiful, let us not ask where it leads
– Anatole France.

2.1 De samenstellingsregel en de propagator

We gaan eerst wat notaties invoeren, om niet alles met ϕ aan te duiden. We zoeken de kans dat een deeltje, vertrekkend in x_a op tijdstip t_a aankomt in plaats x_b op tijdstip t_b. Van elk pad $x(t)$ dat deze ruimtetijdpunten verbindt, kennen we de amplitudo nu, via postulaat 1, $\exp\{iS[x(t)]/\hbar\}$. We moeten sommeren over alle mogelijke paden, en die som noemen we de **propagator**:

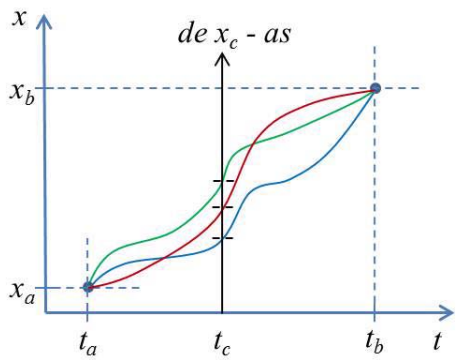
$$K(x_b t_b | x_a t_a) = \sum_{paden} \exp\{iS[x(t)]/\hbar\}\,. \tag{2.1}$$

De propagator is dus de totale amplitudo dat een deeltje vanuit $\{x_a, t_a\}$ terecht komt in $\{x_b, t_b\}$. Merk op hoe we de volgorde van de punten schrijven in K, alsof het een voorwaardelijke kans is (wat ook zo wordt als we de modulus kwadraat van de propagator nemen!). Nu is alleen die som over paden nogal onwiskundig genoteerd, ook daarvoor komt er een nieuw symbool

$$K(x_b t_b | x_a t_a) = \int_{x_a(t_a)}^{x_b(t_b)} \mathcal{D}x \exp\{iS[x(t)]/\hbar\}\,. \tag{2.2}$$

De maat van de padintegraal, $\mathcal{D}x$, wordt met een gekrulde $\mathcal{D}$ geschreven.

Aan de hand van een gedachtenexperiment met één enkel scherm, waarin heel veel gaten geboord zijn, kunnen we al een belangrijke rekenregel voor de propagator uitwerken. In dat gedachtenexperiment plaatsen we het scherm op tijdstip t_c in de ruimtetijd, ergens een tijdstip tussen t_a en t_b (maar dat hoeft in principe wiskundig gezien niet):



Elk pad $x(t)$ dat loopt van x_a naar x_b zal wel ergens terecht gekomen zijn op tijdstip t_c. Noteer $x_c = x(t_c)$. We kunnen elk pad dan opsplitsen in een deel van $\{x_a, t_a\}$ naar $\{x_c, t_c\}$ en daarna van $\{x_c, t_c\}$ voort naar $\{x_b, t_b\}$. We moeten – onze principes indachtig– sommeren over alle mogelijke mogelijkheden: hier zijn dat alle mogelijke plaatsen waar het deeltje kon terecht komen op tijdstip t_c. Bijgevolg moet gelden dat

$$\boxed{\forall t_c : K(x_b t_b | x_a t_a) = \int K(x_b t_b | x_c t_c) K(x_c t_c | x_a t_a) dx_c.} \tag{2.3}$$

In een dimensie loopt de integraal van $-\infty$ tot $+\infty$, in 3D loopt het over de ganse ruimte. Deze hele belangrijke eigenschap is de **samenstellingseigenschap** of semi-groep eigenschap. Uitgeschreven met de nieuwe notatie voor padintegralen

$$\begin{aligned} \forall t_c \quad : \quad & \int\limits_{x_a(t_a)}^{x_b(t_b)} \mathcal{D}x_{ab} \exp\{iS[x_{ab}(t)]/\hbar\} \\ = \quad & \int dx_c \int\limits_{x_a(t_a)}^{x_c(t_c)} \mathcal{D}x_{ac} \int\limits_{x_c(t_c)}^{x_b(t_b)} \mathcal{D}x_{cb} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(S[x_{ab}(t)] + S[x_{bc}(t)]\right)\right\}. \end{aligned} \tag{2.4}$$

Hierin zijn $x_{ac}(t)$ de paden van $\{x_a, t_a\}$ naar $\{x_c, t_c\}$; de integraal met $\mathcal{D}x_{ac}$ sommeert over al deze paden. Verder zijn $x_{cb}(t)$ de paden van $\{x_c, t_c\}$ naar $\{x_b, t_b\}$, de integraal met $\mathcal{D}x_{cb}$ sommeert over al deze paden. En ten slotte sommeren we over alle punten x_c. Het resultaat is gelijk aan de som over alle paden $x_{ab}(t)$ van $\{x_a, t_a\}$ naar $\{x_b, t_b\}$: we tellen precies dezelfde verzameling termen op.

Zo uitgelegd lijkt de samenstellingsregel een redelijk triviale manier om de zaken weeral een pak ingewikkelder te maken. Maar deze regel heeft zijn nut in het opsplitsen van paden in heel kleine stukjes, waarvoor we K wél kunnen uitrekenen, en daarna kunnen we de kleine stukjes terug aaneenrijgen. Deze methode wordt "time-slicing" genoemd. Het andere nut van deze eigenschap,

zoals we zullen zien, is om aan een lang pad nog een infinitesimaal klein stukje bij te plakken. Hiermee kan de integraalvergelijking (2.3) worden omgeschreven tot een differentiaalvergelijking, die we kunnen onderwerpen aan een andere batterij oplossingstechnieken.

Normeringsregel voor de propagator – Zolang er geen deeltjes verdwijnen, moet een deeltje dat in $\{x_a, t_a\}$ vertrekt wel érgens aangekomen zijn op tijdstip t_b. Bijgevolg is

$$\left| \int dx_b K(x_b t_b | x_a t_a) \right|^2 = 1, \tag{2.5}$$

Wanneer we de aankomsttijd t_b heel dicht bij de vertrektijd t_a brengen, kan het deeltje nog nergens naartoe geweest zijn; dus geldt

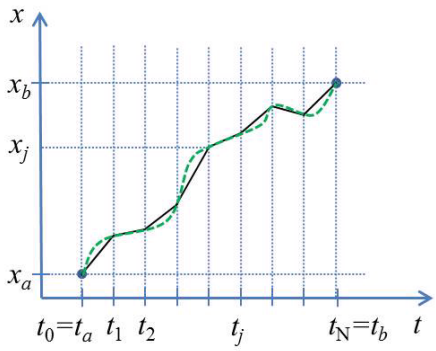
$$\lim_{t_b \to t_a} K(x_b t_b | x_a t_a) = \delta(x_b - x_a). \tag{2.6}$$

Deze normeringsregels helpen ons om lastige voorfactoren in de som over paden uit te werken.

Opmerking – We werken hier in één dimensie voor de duidelijkheid, maar er is geen enkele bijkomende moeilijkheid om met plaatsvectoren in 3D te werken.

2.2 Time-slicing: paden onder stroboscooplicht

De time-slicing methode om padintegralen uit te rekenen bestaat er in dat we de tijd opdelen in N intervallen, gewoonlijk even lang. Het is alsof we het deeltje dat het pad $x(t)$ aflegt van $\{x_a, t_a\}$ naar $\{x_b, t_b\}$, bekijken onder stroboscoopverlichting. Na elk tijdsinterval $\Delta t = (t_b - t_a)/N$ komt er een lichtflits en noteren we de positie van het deeltje. We hebben dan een "film" bestaande uit $N+1$ frames op tijden $t_0 = t_a$, $t_1 = t_a + \Delta t$, $t_2 = t_a + 2\Delta t$, ..., $t_N = t_b$. De positie op tijdstip t_j noteren we x_j, waarbij $x_0 = x_a$ en $x_N = x_b$. Een persoon met dergelijk stroboscoopzicht zou dus een pad karakteriseren door de getallen $\{x_0, x_1, ..., x_N\} \in \mathbb{R}^{N+1}$.



Het echte pad $x(t)$ kan nog meer kronkels maken dan wat je vermoed door enkel naar het setje getallen $\{x_0, x_1, ..., x_N\}$ te kijken. Maar toch zegt je intuitie je dat als N maar groot genoeg wordt, je het echte pad kan benaderen. Dit intuïtief gevoel werd mathematisch scherp gesteld door Norbert Wiener. Hij stelt voor om het echte pad $x(t)$ te benaderen door de verzameling rechte stukjes die de punten x_{j-1} , x_j verbinden. Met andere woorden, Wiener construeert het 'N-stroboscoop pad' $\tilde{x}^{(N)}(t)$ als volgt

$$\tilde{x}^{(N)}(t) = x_{j-1} + (x_j - x_{j-1})\frac{t - t_{j-1}}{t_j - t_{j-1}} \text{ voor } t_{j-1} \leqslant t \leqslant t_j. \tag{2.7}$$

Dit is een lineaire interpolatie tussen de punten $\{x_0, x_1, ..., x_N\}$. Wiener had ook een straffe spline-interpolatie kunnen kiezen, maar dat maakt de zaken moeilijker dan nodig. Naarmate N groter wordt is zelfs een lineaire interpolatie als $\tilde{x}^{(N)}(t)$ een goede benadering van het echte pad $x(t)$. Inderdaad, Wiener kan aantonen[1] dat als $\mathcal{F}[x(t)]$ een functionaal is van het echte pad, dan geldt dat

$$\mathcal{F}[x(t)] = \lim_{N\to\infty} \mathcal{F}[\tilde{x}^{(N)}(t)]. \tag{2.8}$$

Het is in die betekenis dat we zeggen dat het stroboscoop-pad convergeert naar het echte pad, namelijk: functionalen van het stroboscoop pad convergeren naar functionalen van het echte pad. Dit is intuïtief duidelijk, maar vergt wiskundig toch wat meer finesse, daar hebben we dus de Norbert voor nodig gehad. We gaan nog op de finesses terugkomen wanneer we de padintegralen met een vectorpotentiaal gaan time-slicen!

Laten we dat eens toepassen op de actiefunctionaal

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x)\right] dt. \tag{2.9}$$

Dan hebben we

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= \lim_{N\to\infty} S[\tilde{x}^{(N)}(t)] \\ &= \lim_{N\to\infty} \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{1}{2}m\left(\frac{d\tilde{x}^{(N)}}{dt}\right)^2 - V(\tilde{x}^{(N)})\right] dt. \end{aligned} \tag{2.10}$$

De integraal schrijven we als som van integralen over de afzonderlijke tijdsstappen,

$$S[\tilde{x}^{(N)}(t)] = \sum_{j=1}^{N} \int_{t_{j-1}}^{t_j} \left[\frac{1}{2}m\left(\frac{d\tilde{x}^{(N)}}{dt}\right)^2 - V(\tilde{x}^{(N)})\right] dt. \tag{2.11}$$

[1] *The Average of an Analytic Functional*, N. Wiener, Proc. Nat. Acad. Sci. **7**, 253 (1921).

Uit de definitie (2.7) volgt dat

$$\frac{d\tilde{x}^{(N)}}{dt} = \frac{x_j - x_{j-1}}{t_j - t_{j-1}} \text{ voor } t_{j-1} \leqslant t \leqslant t_j. \tag{2.12}$$

Verder gaan we er van uit dat de potentiaal V continu is, zodat er voor elke gewenste nauwkeurigheid ε er een N groot genoeg gevonden kan worden zodanig dat, binnen de gewenste nauwkeurigheid ε geldt dat

$$V(\tilde{x}^{(N)}) \approx V\left(\frac{x_j + x_{j-1}}{2}\right) \text{ voor } t_{j-1} \leqslant t \leqslant t_j. \tag{2.13}$$

Het doet er trouwens niet toe of we bovenstaand voorstel gebruiken of $V(x_j)$ of $V(x_{j+1})$ – zolang V continu is gaan die in de limiet van grote N hetzelfde resultaat opleveren. Hierbij merken we nu al op dat dit *niet het geval is voor de vectorpotentiaal* – daar is de keuze niet vrij! We komen hierop terug in hoofdstuk 4, sectie 2. De actie is dus

$$S[\tilde{x}^{(N)}(t)] = \sum_{j=1}^{N} \int_{t_{j-1}}^{t_j} \left[\frac{1}{2}m\left(\frac{x_j - x_{j-1}}{t_j - t_{j-1}}\right)^2 - V\left(\frac{x_j + x_{j-1}}{2}\right)\right] dt. \tag{2.14}$$

Deze actiefunctionaal is eigenlijk een actie-functie geworden die van $N+1$ input-variabelen $\{x_0, x_1, ..., x_N\}$ afhangt. Het integrand is onafhankelijk van t, zodat de integralen zich laten uitwerken tot

$$S[\tilde{x}^{(N)}(t)] = \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{1}{2}m\frac{(x_j - x_{j-1})^2}{t_j - t_{j-1}} - V\left(\frac{x_j + x_{j-1}}{2}\right)(t_j - t_{j-1})\right]. \tag{2.15}$$

Gegeven een set tijden $\{t_0, t_1, ..., t_N\}$ en een overeenkomstig stroboscoop pad $\{x_0, x_1, ..., x_N\}$ kunnen we hiermee $S[\tilde{x}^{(N)}(t)]$ uitrekenen. In het algemeen zijn de intervalletjes $t_j - t_{j-1} = \Delta t$ allen even groot gekozen. De actiefunctionaal voor het pad $x(t)$ kan dan geschreven worden als de volgende limiet:

$$S[x(t)] = \lim_{N\to\infty} \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{1}{2}m\frac{(x_j - x_{j-1})^2}{t_j - t_{j-1}} - V\left(\frac{x_j + x_{j-1}}{2}\right)(t_j - t_{j-1})\right]. \tag{2.16}$$

2.3 Som over alle time-sliced paden

Nog niet te vroeg gejuicht, want als we de propagator willen uitrekenen, moeten we nog de som over alle paden $\int \mathcal{D}x$ kunnen uitvoeren. We kunnen wel de som over alle stroboscoop paden met een gegeven N uitvoeren: dit is de integraal

over alle $\{x_0, x_1, ..., x_N\} \in \mathbb{R}^{N+1}$, waarbij we nog eisen dat $x_0 = x_a$ en $x_N = x_b$. Dus,

$$\sum_{\substack{stroboscoop \\ paden}} \to \int dx_0 \int dx_1 ... \int dx_N \; \delta(x_0 - x_a)\delta(x_N - x_b). \tag{2.17}$$

Dit is echter niet de som over alle paden... want met elk stroboscoop pad komt er een zeker gewicht aan gewone paden overeen (er gaat meer dan 1 pad doorheen de punten $\{x_0, x_1, ..., x_N\}$). We noteren dit onbekend gewicht dat bij elke integraal $\int dx_j$ staat als $\mathcal{A}$. We vinden dan ten slotte de **time-slicing formule**:

$$K(x_b t_b | x_a t_a) = \lim_{N\to\infty} \mathcal{A}^N \int dx_0 \int dx_1 ... \int dx_N \; \delta(x_0 - x_a)\delta(x_N - x_b)$$
$$\times \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{1}{2} m \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\Delta t} - V\left(\tfrac{x_j + x_{j-1}}{2}\right) \Delta t \right] \right\}. \tag{2.18}$$

De constante A_N is een normeringsfactor (aangezien de kans om ergens aan te komen 1 moet worden) en is in het algemeen moeilijk te vinden; we zullen via de samenstellingsregel aantonen dat deze integratiemaat gelijk is aan

$$\mathcal{A} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{1/2}. \tag{2.19}$$

Verband met de samenstellingsregel – Merk op dat we de samenstellingsregel meermaals achtereen kunnen toepassen om te schrijven dat

$$\begin{aligned} K(x_b t_b | x_a t_a) &= \int dx_1 \; K(x_b t_b | x_1 t_1) K(x_1 t_1 | x_a t_a) \\ &= \int dx_1 \int dx_2 \; K(x_b t_b | x_2 t_2) K(x_2 t_2 | x_1 t_1) K(x_1 t_1 | x_a t_a) \\ &= \int dx_1 ... \int dx_{N-1} \; K(x_b t_b | x_{N-1} t_{N-1}) \times ... \times K(x_1 t_1 | x_a t_a), \end{aligned}$$

of nog,

$$K(x_b t_b | x_a t_a) = \int dx_0 ... \int dx_N \; \delta(x_0 - x_a)\delta(x_N - x_b) \times \prod_{j=1}^{N} K(x_j t_j | x_{j-1} t_{j-1}). \tag{2.20}$$

Anderzijds kunnen we de time-slicing regel ook schrijven als

$$K(x_b t_b | x_a t_a) = \lim_{N\to\infty} \int dx_0 \int dx_1 ... \int dx_N \; \delta(x_0 - x_a)\delta(x_N - x_b)$$
$$\times \mathcal{A}^N \prod_{j=1}^{N} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2} m \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\Delta t} - V\left(\tfrac{x_j + x_{j-1}}{2}\right) \Delta t \right] \right\}. \tag{2.21}$$

Beide geven hetzelfde resultaat als we voor de **infinitesimale propagator** van x_{j-1}, t_{j-1} naar x_j, t_j veronderstellen dat

$$K_\varepsilon(x_j t_j | x_{j-1} t_{j-1}) \approx \mathcal{A} \exp\left\{ \frac{im}{2\hbar} \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\Delta t} - \frac{i}{\hbar} V\left(\tfrac{x_j + x_{j-1}}{2}\right) \Delta t \right\}. \quad (2.22)$$

De benadering wordt nauwkeuriger naarmate het stapje infinitesimaler wordt. Dit is geen onredelijk resultaat, want voor een infinitesimaal tijdsstapje verwachten we dat het deeltje niet ver kan geraken, zodat zoals eerder geargumenteerd een continue potentiaal min of meer constant blijft en gelijk aan $V[(x_j + x_{j-1})/2]$ genomen kan worden[2]. Voor een constante potentiaal is het sterkst bijdragend pad dat van een vrij deeltje, waarvoor de actie $m(\Delta x)^2/(2\Delta t)$ is, zoals we in hoofdstuk 1 uitgerekend hebben.

We moeten natuurlijk in de limiet $t_j \to t_{j-1}$ nog steeds voldoen aan de normeringsregel (2.6),

$$\lim_{t_j \to t_{j-1}} K(x_j t_j | x_{j-1} t_{j-1}) = \delta(x_j - x_{j-1}), \quad (2.23)$$

en hieruit halen we $\mathcal{A}$. De delta-distributie kan voorgesteld worden als een limiet van Gaussische functies, met name

$$\delta(x_j - x_{j-1}) = \lim_{\varepsilon \to 0} \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi \varepsilon}} \exp\left[-\frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\varepsilon} \right] \right\}, \quad (2.24)$$

met $\varepsilon = 2i\hbar\Delta t/m$ zien we dan dat

$$\begin{aligned} &\lim_{\Delta t \to 0} \left\{ \mathcal{A} \exp\left[-\frac{m}{2i\hbar} \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\Delta t} \right] \right\} = \delta(x_j - x_{j-1}) \\ \Leftrightarrow \quad &\mathcal{A} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (2.25)$$

zoals we eerder beweerd hebben. We hebben hier geen last van de potentiaal aangezien

$$\lim_{\Delta t \to 0} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} V\left(\tfrac{x_j + x_{j-1}}{2}\right) \Delta t \right] = 1. \quad (2.26)$$

Dus, tot besluit nog eens de vervolledigde formule voor de time-sliced padintegraal:

$$\boxed{\begin{aligned} K(x_b t_b | x_a t_a) = &\lim_{N \to \infty} \int dx_0 \int dx_1 ... \int dx_N \; \delta(x_0 - x_a) \delta(x_N - x_b) \\ \times \prod_{j=1}^{N} &\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2} m \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\Delta t} - V\left(\frac{x_j + x_{j-1}}{2} \right) \Delta t \right] \right\}. \end{aligned}} \quad (2.27)$$

[2] Voor de vectorpotentiaal zijn de keuzes niet equivalent, cf. hoofdstuk 4, sectie 2.

2.4 Toepassing: het vrije deeltje

We zoeken de propagator $K_0(x_b t_b|x_a t_a)$ voor het vrije deeltje. Hiervoor is $V = 0$, en is de infinitesimale propagator gegeven door

$$K_\varepsilon(x_j t_j|x_{j-1} t_{j-1}) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_j - t_{j-1})}} \exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\Delta t}\right\}. \tag{2.28}$$

Opeenvolgende infinitesimale propagatoren kunnen redelijk eenvoudig aan elkaar gerijgd worden, aangezien de integraal van twee gaussische functies terug een gaussische functie is. Om dit aan te tonen gebruiken we

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \exp\{-ax^2 + bx\} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left\{b^2/(4a)\right\}.$$

Hiermee werken we eerst de integraal $\mathcal{I}$ van twee opeenvolgende infinitesimale propagatoren uit:

$$\begin{aligned}\mathcal{I} &= \int dx_2 K_\varepsilon(x_3, t_3|x_2, t_2) K_\varepsilon(x_2, t_2|x_1, t_1) \qquad (2.29)\\ &= \frac{m}{2\pi i\hbar\sqrt{(t_3 - t_2)(t_2 - t_1)}} \int dx_2 \exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_3 - x_2)^2}{t_3 - t_2} + \frac{im}{2\hbar}\frac{(x_2 - x_1)^2}{t_2 - t_1}\right\}.\end{aligned}$$

Verzamelen van de termen in x_2 geeft

$$\begin{aligned}\mathcal{I} &= \frac{m}{2\pi i\hbar\sqrt{(t_3 - t_2)(t_2 - t_1)}}\\ &\times \int dx_2 \exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\left(\frac{1}{t_3 - t_2} + \frac{1}{t_2 - t_1}\right)x_2^2 - \frac{im}{\hbar}\left(\frac{x_3}{t_3 - t_2} + \frac{x_1}{t_2 - t_1}\right)x_2\right\}\\ &\times \exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\left(\frac{x_3^2}{t_3 - t_2} + \frac{x_1^2}{t_2 - t_1}\right)\right\}. \qquad (2.30)\end{aligned}$$

Hiermee is

$$\begin{aligned}a &= \frac{m}{2i\hbar}\left(\frac{1}{t_3 - t_2} + \frac{1}{t_2 - t_1}\right)\\ &\Rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar}{m}\frac{(t_3 - t_2)(t_2 - t_1)}{t_3 - t_1}}.\end{aligned}$$

Verder is

$$\begin{aligned}b &= -\frac{im}{\hbar}\left(\frac{x_3}{t_3 - t_2} + \frac{x_1}{t_2 - t_1}\right)\\ \Rightarrow \frac{b^2}{4a} &= \left(\frac{im}{\hbar}\right)^2 \frac{2i\hbar}{4m}\left(\frac{x_3}{t_3 - t_2} + \frac{x_1}{t_2 - t_1}\right)^2 \frac{(t_3 - t_2)(t_2 - t_1)}{t_3 - t_1}\\ &= \frac{m}{2i\hbar(t_3 - t_1)}\left(x_3^2\frac{t_2 - t_1}{t_3 - t_2} + 2x_1x_3 + x_1^2\frac{t_3 - t_2}{t_2 - t_1}\right). \qquad (2.31)\end{aligned}$$

Alles samen invullen geeft

$$\begin{aligned}\mathcal{I} = & \frac{m}{2\pi i\hbar\sqrt{(t_3-t_2)(t_2-t_1)}}\sqrt{\frac{2\pi i\hbar}{m}\frac{(t_3-t_2)(t_2-t_1)}{t_3-t_1}} \\ & \times\exp\left\{\frac{-im}{2\hbar(t_3-t_1)}\left(x_3^2\frac{t_2-t_1}{t_3-t_2}+2x_1x_3+x_1^2\frac{t_3-t_2}{t_2-t_1}\right)\right. \\ & \left.+\frac{im}{2\hbar}\left(\frac{x_3^2}{t_3-t_2}+\frac{x_1^2}{t_2-t_1}\right)\right\}. \end{aligned} \tag{2.32}$$

Dit vereenvoudigt zich tot

$$\mathcal{I} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_3-t_1)}}\exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_3-x_1)^2}{(t_3-t_1)}\right\} = K_\varepsilon(x_3,t_3|x_1,t_1). \tag{2.33}$$

De samenstellingsregel geldt hier op het niveau van de infinitesimale propagatoren $K_\varepsilon(x_3,t_3|x_1,t_1)$ (in het algemeen geldt dit enkel voor de exacte propagator – dat twee infinitesimale propagatoren terug integreren tot dezelfde wiskundige vorm is niet algemeen waar). Dat is gemakkelijk, nu kunnen we de samenstellingsregel rechtstreeks gebruiken:

$$\begin{aligned} & \int dx_3\int dx_2 K_\varepsilon(x_4,t_4|x_3,t_3)K_\varepsilon(x_3,t_3|x_2,t_2)K_\varepsilon(x_2,t_2|x_1,t_1) \\ = & \int dx_3 K_\varepsilon(x_4,t_4|x_3,t_3)\left(\int dx_2 K_\varepsilon(x_3,t_3|x_2,t_2)K_\varepsilon(x_2,t_2|x_1,t_1)\right) \\ = & \int dx_3 K_\varepsilon(x_4,t_4|x_3,t_3)K_\varepsilon(x_3,t_3|x_1,t_1) \\ = & K_\varepsilon(x_4,t_4|x_1,t_1). \end{aligned} \tag{2.34}$$

En dit kunnen we ook doen met een N-voudig produkt aan integralen,

$$\begin{aligned} K(x_bt_b|x_at_a) &= \int dx_0 ... \int dx_{N-1}\ K_\varepsilon(x_bt_b|x_{N-1}t_{N-1})\times ... \times K(x_1t_1|x_at_a) \\ &= K_\varepsilon(x_b,t_b|x_a,t_a). \end{aligned} \tag{2.35}$$

Waarmee we vinden dat voor een vrij deeltje

$$\boxed{K_0(\mathbf{r}_bt_b|\mathbf{r}_at_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b-t_a)}}\exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\frac{(\mathbf{r}_b-\mathbf{r}_a)^2}{(t_b-t_a)}\right\}.} \tag{2.36}$$

Hierin is al voor het gemak van gebruik verderop de algemene 3D uitdrukking gegeven met startpositie $\mathbf{r}_a$ en eindpositie $\mathbf{r}_b$.

Kijken we op een vast tijdsinterval $T = t_b - t_a$, dan is de propagator een oscillerende functie van $X = (x_b - x_a)$. De golflengte van die oscillatie is de afstand die we uit X moeten weg bewegen opdat de fase met 2π toeneemt. Dit is:

$$\begin{aligned} 2\pi &= \frac{m\,(X+\lambda)^2}{2\hbar T} - \frac{mX^2}{2\hbar T} \approx \frac{mX\lambda}{\hbar T}\ (\text{voor } X \gg \lambda) \\ &\Rightarrow \lambda = \frac{2\pi\hbar T}{mX}. \end{aligned} \tag{2.37}$$

Uit eerdere cursussen kwantummechanica weet je al dat de golffunctie van een vrij deeltje met momentum $p = m\Delta x/(T+\tau)$ inderdaad moet oscilleren met een golflengte

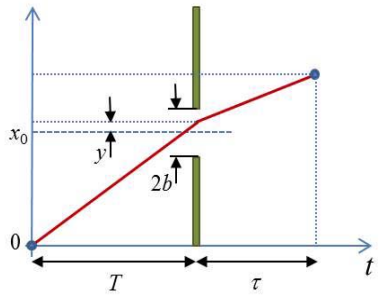
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hT}{mX}. \tag{2.38}$$

De vrije deeltjes propagator geeft dus de goede kwantumfysica voor het vrije deeltje!

2.5 Diffractie van materiegolven

We kunnen het resultaat voor de propagator van een vrij deeltje gebruiken om een inzichtelijk voorbeeldje uit te werken. Klassiek weten we dat als een deeltje dat op tijd $t = 0$ uit de oorsprong $x = 0$ werd vrijgelaten, gezien wordt op plaats x_0 op tijd T, de snelheid van dat deeltje exact gegeven is door $v_0 = x_0/T$. De implicatie van klassieke mechanica is dat, een tijd τ later, het deeltje een bijkomende afstand $v_0\tau$ aflegt. Om dit kwantummechanisch te begrijpen, gaan we hetvolgende probleem oplossen:

Op tijd $t = 0$ start het deeltje uit de oorsprong, en na een tijd T weten we dat het zich bevindt binnen een afstand $\pm b$ van het punt x_0. We vragen ons af wat de kans is, om na een gegeven extra tijd τ, het deeltje op een afstand x van het punt x_0 te vinden. Klassiek is dat dus een deltafunctie $\delta(x - v_0\tau)$, kwantummechanisch zal dit niet zo vastbepaald zijn. Het resultaat is een som over alle mogelijke paden van de start naar het eindpunt, op voorwaarde dat die paden liggen in het interval $\pm b$ vanuit x_0 op tijd T. Deze paden zijn uitgesloten door het experiment, bijvoorbeeld doordat we op tijd T een muurtje optrekken, of met intens licht alle gebieden *buiten* $[x_0 - b, x_0 + b]$ onderzoeken en die experimentele verwezenlijkingen waarin we het deeltje in het verboden gebied zien, niet meetellen.



De amplitudo om aan te komen in $\{x+x_0, T+\tau\}$ kan dan geschreven worden

als volgt

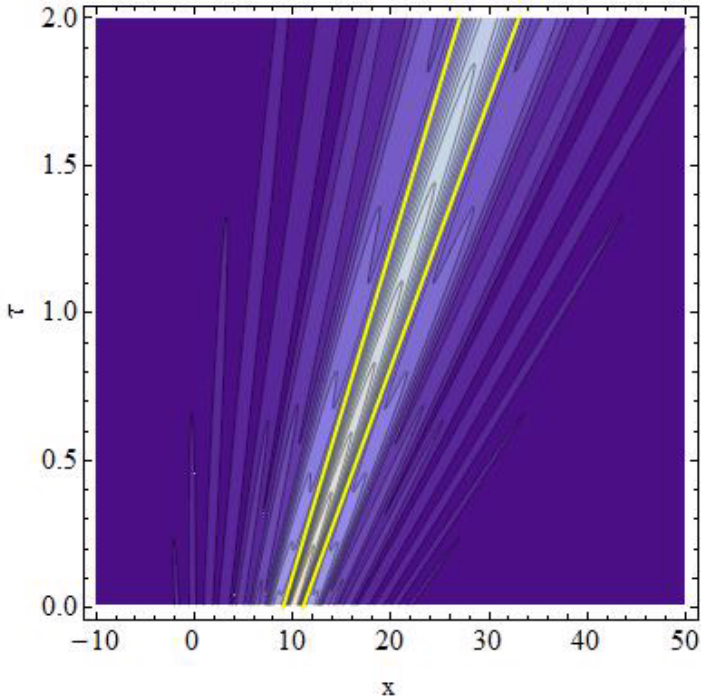
$$\phi(x,\tau) = \int_{-b}^{b} dy\ K_0(x+x_0, T+\tau|x_0+y, T) K_0(x_0+y, T|0,0). \tag{2.39}$$

Merk vooreerst op dat als we de diffractiespleet helemaal opentrekken, $b \to \infty$, er hier niets anders staat dan de samenstellingsregel, en

$$\phi_{b\to\infty}(x,\tau) = K_0(x+x_0, T+\tau|0,0) \propto \exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x+x_0)^2}{(T+\tau)}\right\}.$$

Deze 'vrije-ruimte' amplitudo heeft een oscillerende fase $\theta = m(x+x_0)^2/[2\hbar(T+\tau)]$, die sneller en sneller oscilleert naarmate we verder weg van de oorsprong gaan, overeenkomstig met de impuls zoals in (2.37).

Nu voeren we de muurtjes in, we maken met andere woorden b eindig. We kunnen de integraal in principe exact oplossen, het is de zogenaamde "Fresnel integraal". De analytische uitdrukking leert ons echter niet zoveel al de grafieken van deze integraal. Die rekenen we uit voor $m = \hbar = T = 1$, en we plaatsen de slit op $x_0 = 10$. We vergelijken hiermee twee gevallen, $b = 2$ (brede slit) en $b = 0.2$ (smalle slit), in onderstaande contourplots voor $\phi(x,\tau)$.



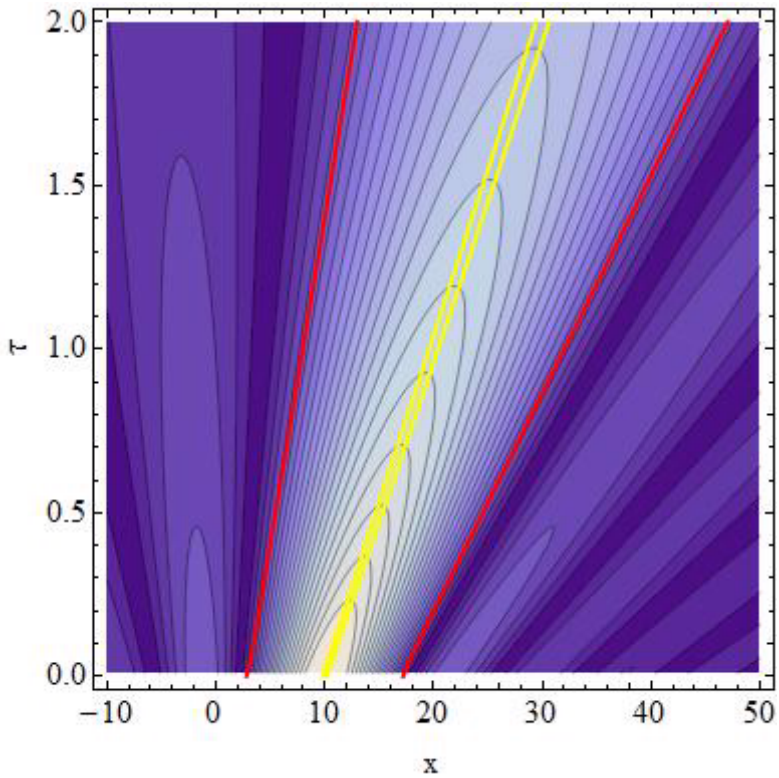
We beginnen met de brede slit, $b = 2$. De gele lijnen tonen de "schaduw"

grenzen van de klassieke theorie. De bundel klassieke trajecten zal zich binnen deze twee lijnen bevinden. We zien dat de kwantummechanische berekening voor de materiegolf ook mooi zijn maximum heeft binnen deze twee grenzen, en daarna scherp kleiner wordt (hoe lichter de kleur in de contourplot, hoe groter $\phi(x,\tau)$. Er zijn nog wel enkele zwakke lijnen te zien buiten de hoofdstraal, maar de amplitude ervan is klein, en wordt verwaarloosbaar naarmate we de diffractiespleet verder opentrekken. Bij een heel brede diffractiespleet krijgen we een materiebundel die zich helemaal klassiek gedraagt (zoals een lichtbundel door een opening die veel breder is dan de golflengte). De breedte van de materiebundel die door de diffractiespleet komt is oorspronkelijk $2b$, en na een tijd τ is die toegenomen tot $2b_1$ met

$$b_1 = b\frac{T+\tau}{T}, \tag{2.40}$$

wat opnieuw de breedte is die aangeduid is met de gele lijnen.

Nu trekken we de diffractiespleet dicht, bij $b = 0.2$. De klassieke breedte (gele lijnen) van de bundel is hierdoor mee versmald, maar het resultaat uit de propagator is veel breder:



Er zijn opnieuw zwakke zijnbundels. Dit zijn secundaire diffractiestralen; de oscillatie in de x-richting is opnieuw te wijten aan de relatie van de Broglie

tussen impuls en golflengte. De hoofdbundel blijkt nu een pak breder te zijn dan wat we uit de klassieke wet zouden voorspellen: dit is het eerder besproken fenomeen van diffractie! Uit de Fresnel integralen kunnen we aantonen dat

$$b_1^2 \approx \left(b\frac{T+\tau}{T}\right)^2 + \frac{\hbar^2\tau^2}{m^2b^2}. \tag{2.41}$$

De τ afhankelijkheid van deze breedte is in bovenstaande figuur getoond door de rode lijnen[3]. Er is de klassieke onbepaaldheid $\Delta x_{kl} = b(T+\tau)/T$ en een kwantumbijdrage

$$\Delta x_{kw} = \frac{\hbar\tau}{mb}, \tag{2.42}$$

zodanig dat de totale onbepaaldheid[4] gegeven wordt door $\sqrt{\Delta x_{kl}^2 + \Delta x_{kw}^2}$. Deze extra kwantum-onbepaaldheid gaat naar nul voor $\hbar \to 0$ en vertelt ons dat voor deeltjes die door een smalle diffractiespleet gaan, de toekomstige positie onzeker wordt. Deze onzekerheid is evenredig met het tijdsinterval τ tussen de doorgang door de diffractiespleet en de volgende observatie van de positie van het deeltje. Als we de klassieke notie van snelheid van het deeltje invoeren, kunnen we stellen dan de doorgang door de diffractiespleet een onbepaaldheid in de snelheid veroorzaakt ter grootte van

$$\Delta v = \frac{\hbar}{mb}. \tag{2.43}$$

De diffractiespleet is een soort plaatsbepaling: op het moment dat het deeltje door de spleet gaat weten de we de positie ervan op $\Delta x = \pm b$ nauwkeurig. Aangezien $m\Delta v = \Delta p$ halen we hieruit de onbepaaldheidsrelatie van Heisenberg,

$$\Delta p \Delta x = \hbar. \tag{2.44}$$

Van een voorfactor 2 of π moet je je hier niet veel aantrekken, aangezien de formule (2.41) een breedte bij half maximum voorstelt voor een gaussische diffractiespleet, en de echte onbepaaldheid aan de hand van de exacte formule bepaald zou moeten worden; de formule (2.41) is met andere woorden een goede afschatting. Merk op dat het verhaal dat we hier opsteken voor diffractie van materiegolven in essentie hetzelfde is als dat van de laatste sectie van het vorige hoofdstuk – alleen hebben we nu de propagator bij de hand om dit kwantitatief aan te tonen. Het is ook in essentie hetzelfde als onze bespreking van diffractie in de sectie over optica. Als er vele golflengten over de diffractiespleet lopen (i.e. de diffractiespleet is erg breed, $b \gg \lambda$), dan is het resulterend interferentiepatroon scherp en de beweging klassiek. Maar als de diffractiespleet zo klein is dat er niet eens een ganse golflengte tussen past, dan zijn er geen amplitudo-oscillaties meer die aanleiding geven tot een interferentie. De informatie over

[3] Hierin zit een constante bijgegeteld, omdat de formule er een is voor de breedte bij half maximum van een de hoofdbundel bij een Gaussische slit. Deze constante wordt verwaarloosbaar naarmate b kleiner wordt of τ groter.

[4] De som van twee onafhankelijke (gaussische) random variabelen met standaarddeviatie Δx_1 en Δx_2, heeft zelf een standaarddeviatie $\sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta x_2^2}$.

de impuls is verloren samen met de golflengte vermits $\lambda = h/p$. Bijgevolg zijn alle impulsen mogelijk in de limiet van een oneindig scherpe diffractiespleet, en wordt de bundel heel breed.

Opmerking – Voor (vrije) relativisitische deeltjes is de actie $S_0 = -m_0 c \int ds$, en is het gewicht van een pad bijgevolg evenredig met

$$\exp\left\{-i\frac{m_0 c}{\hbar}\int ds\right\}.$$

Moeten we voor relativistische deeltjes ook paden mee in rekening brengen die buiten de lichtkegel gaan? Het antwoord is ja! Voor deze paden is $(ds)^2 < 0$, en dus wordt ds imaginair. Hierdoor zal de amplitudo niet langer een oscillerende functie zijn, maar exponentiëel gedempt. De paden die buiten de lichtkegel lopen gaan in de som over alle mogelijke paden dus een infinitesimaal (exponentieel) kleine bijdrage hebben. Maar, net zoals bij tunneling kunnen kwantumdeeltjes toch een beetje binnendringen in het verboden gebied. De typische penetratiediepte buiten de lichtkegel is

$$\lambda_C = \frac{\hbar}{m_0 c}.$$

Dit is de Compton golflengte. Het is de typische lengteschaal waarop we relativistische effecten in de kwantummechanica moeten in rekening brengen, of vice-versa, kwantummechanische effecten in de speciale relativiteit in rekening moeten brengen. Ver geraken de deeltjes evenwel niet, voor het elektron is $\lambda_C = 2.43 \times 10^{-12}$ m.

Hoofdstuk 3

Expansie rond het klassieke pad

The path of least resistance is the path of the loser – H. G. Wells.

3.1 Klassiek pad als zadelpunt

Stel dat we een integraal

$$\mathcal{I} = \lim_{\lambda \to \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\lambda f(x)\}\, dx \tag{3.1}$$

willen uitrekenen. De zogenaamde "**zadelpuntsbenadering**" kan worden toegepast als de functie $f(x)$ een globaal minimum $f(x_0) = y_{\min}$ heeft in het punt x_0 dat ver genoeg verwijderd is van andere lokale minima en dat aanzienlijk kleiner is dan de waarde van deze locale minima. In dat geval kunnen we de functie $f(x)$ immers in Taylorreeks ontwikkelen omheen $x = x_0$:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2 + ... \tag{3.2}$$

Aangezien $f(x)$ een minimum heeft in x_0 is het duidelijk dat $f(x_0) = 0$. Dan is de zadelpuntsbenadering

$$\mathcal{I} \approx \lim_{\lambda \to \infty} e^{-\lambda f(x_0)} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\lambda \frac{1}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2\right\} dx. \tag{3.3}$$

Hierin hebben we de hogere orde termen in de expansie verwaarloosd en blijven we met de gaussische over, waarvan we de oplossing kennen: $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-au^2} du =$

$\sqrt{\pi/a}$. Hiermee vinden we de zadelpuntsbenadering:

$$\mathcal{I} \approx \lim_{\lambda\to\infty} e^{-\lambda f(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda f''(x_0)}}. \tag{3.4}$$

Even kijken naar de hogere orde correctie. Als die klein is, kunnen we de exponent expanderen:

$$\begin{aligned} & \exp\left\{-\lambda\frac{1}{3!}f'''(x_0)(x-x_0)^3 - \lambda\frac{1}{4!}f^{(4)}(x_0)(x-x_0)^4\right\} \\ \approx \quad & 1 - \lambda\frac{1}{3!}f'''(x_0)(x-x_0)^3 - \lambda\frac{1}{4!}f^{(4)}(x_0)(x-x_0)^4. \end{aligned} \tag{3.5}$$

Hiermee wordt de "verbeterde" benadering

$$\mathcal{I} \approx \lim_{\lambda\to\infty} e^{-\lambda f(x_0)} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 - \lambda\frac{f^{(4)}(x_0)}{4!}(x-x_0)^4\right) \exp\left\{-\frac{\lambda}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2\right\} dx. \tag{3.6}$$

De derde orde term valt weg, omdat het integrand oneven is en het integratiedomein symmetrisch. Met behulp van

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u^4 e^{-au^2} du = \frac{3\sqrt{\pi}}{4a^{5/2}}, \tag{3.7}$$

vinden we

$$\mathcal{I} \approx \lim_{\lambda\to\infty} e^{-\lambda f(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda f''(x_0)}} \left[1 - \frac{3}{4!\lambda}\frac{f^{(4)}(x_0)}{[f''(x_0)]^2}\right]. \tag{3.8}$$

We gaan nu dezelfde werkwijze gebruiken om de padintegraal te benaderen, door de actie te expanderen rond het klassieke pad. In de context van padintegralen noemen we deze methode de **WKB methode,** of **Wentzel–Kramers–Brillouin** methode.

We weten dat het klassieke pad $x_{kl}(t)$ de actie extremaliseert. Beschouw nu

$$x(t) = x_{kl}(t) + \eta(t) \tag{3.9}$$

in onze actiefunctionaal $S[x(t)]$. Zoals in het eerste hoofdstuk gaan we ordes van η verzamelen. De kinetische energie wordt

$$\frac{1}{2}m\left(\frac{dx_{kl}}{dt}\right)^2 + m\left(\frac{dx_{kl}}{dt}\right)\left(\frac{d\eta}{dt}\right) + \frac{1}{2}m\left(\frac{d\eta}{dt}\right)^2, \tag{3.10}$$

en de potentiële energie expandeert als

$$V(x_{kl}) + \left.\frac{dV}{dx}\right|_{x_{kl}} \eta + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2V}{dx^2}\right|_{x_{kl}} \eta^2 + ... + \frac{1}{n!}\left.\frac{d^nV}{dx^n}\right|_{x_{kl}} \eta^n + ... \tag{3.11}$$

De actie kunnen we bijgevolg schrijven als

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= \int_0^T dt \left\{ \frac{1}{2} m \left(\frac{dx_{kl}}{dt} \right)^2 - V(x_{kl}) \right\} \\ &+ \int_0^T dt \left\{ m \left(\frac{dx_{kl}}{dt} \right) \left(\frac{d\eta}{dt} \right) - \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_{kl}} \eta \right\} \\ &+ \int_0^T dt \left\{ \frac{1}{2} m \left(\frac{d\eta}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_{kl}} \eta^2 \right\} + ... \end{aligned} \tag{3.12}$$

De eerste lijn hierin is $S[x_{kl}(t)]$. De tweede lijn is de variatie van de actie δS, waarvan we weten dat die nul is langs het klassieke pad. Immers, $\delta S = 0$ definieert het klassieke pad! De volgende term is de tweede variatie $\delta^2 S$. Net zoals de tweede afgeleide van f verdwijnt die niet. Als we alle hogere orde termen verwaarlozen, dan hebben we voor de WKB benadering:

$$\boxed{\int \mathcal{D}x \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right\} \approx \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S[x_{kl}(t)] \right\} \times \int \mathcal{D}\eta \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \delta^2 S[\eta(t)] \right\}}. \tag{3.13}$$

We hebben de padintegraal over de $x(t)$ vervangen door een padintegraal over de $\eta(t)$, die bovendien kwadratisch is in η. We herkennen in het integrand van de laatste term in (3.12) immers de lagrangiaan van een harmonische oscillator

$$L_{HO}(\eta, \dot{\eta}) = \frac{1}{2} m \dot{\eta}^2 - \frac{1}{2} m \Omega^2 \eta^2. \tag{3.14}$$

met

$$\Omega = \sqrt{\frac{1}{m} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_{kl}}}. \tag{3.15}$$

Merk bovendien op dat de rol die λ speelt in de zadelpuntsbenadering voor de integraal $\mathcal{I}$, hier gespeeld wordt door $1/\hbar$. De WKB benadering wordt beter en beter naarmate $\hbar \to 0$, maar dat wisten we al want dat is de klassieke limiet waarin de bijdrage van het klassiek pad domineert.

3.2 Integraal over de kwadratische fluctuaties

Nu dienen we nog wel de padintegraal voor de fluctuaties uit te rekenen

$$K_{fl}(\eta_T, T|0, \eta_0) = \int_{\{\eta_0, 0\}}^{\{\eta_T, T)} \mathcal{D}\eta \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{d\eta}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_{kl}} \eta^2 \right] \right\}. \tag{3.16}$$

De uitwijkingen of fluctuaties $\eta(t)$ moeten we zodanig kiezen dat $\eta(0) = 0 = \eta(T)$. Het pad ligt in begin-en eindpunt vast: $x(t = 0) = x_a = x_{kl}(t = 0)$ en $x(t = T) = x_b = x_{kl}(t = T)$. Immers, we voeren een expansie uit langs het klassieke pad dat $\{x_a, t = 0\}$ verbindt met $\{x_b, t = T\}$. We hebben dus enkel $K_{fl}(0, T|0, 0)$ nodig. De gezochte propagator voor het deeltje is dan in de WKB benadering

$$K(x_b T|x_a 0) = K_{fl}(0, T|0, 0) \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{kl}(t)]\right\}. \tag{3.17}$$

Merk op dat de voorfactor enkel een functie is van het tijdsinterval T. Wanneer we geïnteresseerd zijn in de x_b afhankelijkheid bij vaste T, dan is $K_{fl}(0, T|0, 0)$ niets meer dan een normeringsfactor waar we gewoonlijk niet al te veel last van hebben. Maar gewoonlijk is niet altijd en ik zie me dus verplicht om deze voorfactor ook expliciet uit te werken, wat geen simpele materie is.

De tweede variatie van de actie is op zich een functionaal en ga ik hernoemen tot

$$S_{fl}[\eta(t)] = \int_0^T dt \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{d\eta}{dt}\right)^2 - \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 V}{dx^2}\right|_{x_{kl}} \eta^2\right], \tag{3.18}$$

dit is de effectieve actie van de fluctuaties. Hierop gaan we de time-slicing methode, uitdrukking (2.16) toepassen[1]:

$$S_{fl}[\eta(t)] = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \left[m \frac{(\eta_j - \eta_{j-1})^2}{t_j - t_{j-1}} - V''(x_j)\, \eta_j^2 (t_j - t_{j-1})\right]. \tag{3.19}$$

Hierin is $\eta_0 = 0 = \eta_N$, en kiezen we alle tijdsintervallen gelijk, $t_j - t_{j-1} = \Delta t = T/N$. De fluctuatie-padintegraal is dan

$$\begin{aligned} K_{fl}(0, T|0, 0) \quad = \quad & \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \int d\eta_j\right) \exp\left\{\frac{i}{2\hbar} \sum_{j=1}^{N-1} m \frac{(\eta_j - \eta_{j-1})^2}{\Delta t}\right. \\ & \left. - \frac{i}{2\hbar} \sum_{j=1}^{N} V''(x_j)\, \eta_j^2 \Delta t\right\}. \end{aligned} \tag{3.20}$$

Dit kunnen we herschrijven als een gaussische multivariabelen integraal

$$K_{fl}(0, T|0, 0) = \lim_{N\to\infty} \prod_{j=1}^{N} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \int d\eta_j\right) \exp\left\{\frac{im}{2\hbar\Delta t} \sum_{j,\ell=1}^{N-1} \eta_j A_{j\ell} \eta_\ell\right\}, \tag{3.21}$$

[1] We kiezen de time-sliced versie van (2.16) met $V(x_j)$ in plaats van $V((x_j + x_{j+1})/2)$. Die keuze mag in principe geen verschil uitmaken voor het eindresultaat, maar het zal wel een pak gemakkelijker zijn om uit te werken.

met als coëfficiëntenmatrix

$$A_{j\ell} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & & & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & & & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & & & 0 \\ & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$-\frac{(\Delta t)^2}{m} \begin{pmatrix} V''(x_{kl,1}) & 0 & & 0 \\ 0 & V''(x_{kl,2}) & & 0 \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & V''(x_{kl,N}) \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

De matrix afkomstig van de potentiële energie is diagonaal, omdat er enkel η_ℓ^2 termen in voorkomen. De matrix van de kinetische energie is tridiagonaal want we hebben termen ook termen $\eta_\ell \eta_{\ell\pm1}$. Een dergelijke bilineaire vorm integreert tot[2]

$$K_{fl}(0,T|0,0) = \lim_{N\to\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \det(A_{j\ell})}}. \quad (3.23)$$

Om verder te kunnen, zoeken we een recursierelatie waaraan $\det(A_{j\ell})$ voldoet, wanneer we een extra verfijning invoeren en van N naar $N+1$ time slices gaan. Dit doen we op de traditionele manier voor tridiagonale matrices, namelijk door een expansie in minoren langs de laatste kolom. Als $\det(A^{(N)})$ de determinant is voor het geval met N time slices, dan is

$$\det(A^{(N+1)}) = \left(2 - \frac{(\Delta t)^2}{m} V''(x_{kl,N+1})\right) \det(A^{(N)}) - \det(A^{(N-1)}). \quad (3.24)$$

We kunnen dit herschikken tot

$$\frac{\det(A^{(N+1)}) - 2\det(A^{(N)}) + \det(A^{(N-1)})}{(\Delta t)^2} = -\frac{V''(x_{kl,N+1})}{m} \det(A^{(N)}). \quad (3.25)$$

Het is nu duidelijk dat in de limiet $\Delta t \to 0$ dit een differentiaalvergelijking wordt. Schijven we

$$J(t) = \frac{1}{m} \det(A^{(j)})$$

[2] Dit is niet zo moeilijk aan te tonen: je zoekt een unitaire transformatie die de matrix diagonaliseert, en je gaat over naar nieuwe integratievariabelen die de eigenvectoren van de matrix zijn. Dan heb je een produkt van N gaussische integralen, met de eigenwaarde als breedte van de Gauss. Het resultaat van de N integraties is een produkt van N maal de inverse van de wortel van de eigenwaarde. En dit moet precies gelijk zijn aan de inverse van de wortel van de determinant. Omdat er maar $N-1$ onafhankelijke variabelen zijn schiet er een factor $\sqrt{m/(2\pi i\hbar)}$ over.

voor $t = j\Delta t$, dan zien we dat de bovenstaande differentiaalvergelijking equivalent is aan

$$m\frac{d^2 J(t)}{dt^2} = -V''(x_{kl}(t))J(t). \tag{3.26}$$

Als we deze vergelijking oplossen met randvoorwaarden

$$J(0) = \frac{1}{m}\det\left(A^{(0)}\right) = 0 \tag{3.27}$$

en

$$\left.\frac{dJ}{dt}\right|_{t=0} = \lim_{\Delta t\to 0}\left[\Delta t\left(\frac{\det\left(A^{(1)}\right) - \det\left(A^{(0)}\right)}{m\Delta t}\right)\right] = \frac{1}{m}. \tag{3.28}$$

Dan kunnen we $J(T)$ vinden, en invullen in

$$K_{fl}(0,T|0,0) = \sqrt{\frac{1}{2\pi i\hbar J\left(T\right)}}. \tag{3.29}$$

Er is echter een simpeler formule, waarbij we niet allerlei lineaire algebra en matrixgektes moeten doorstaan. We kunnen die simpeler formule vinden door in te zien dat J de oplossing is van de Hamilton-Jacobi vergelijking uit de klassieke mechanica.

3.3 Hamilton-Jacobi vergelijking

Beschouw een familie klassieke trajecten, die allemaal vertrekken uit x_a op tijdstip $t = 0$, zonder dat we het eindpunt vastleggen. We kunnen deze klassieke trajecten labelen door de start-impuls p, zodat een traject uit deze familie uniek bepaald is door

$$x(p,t) \tag{3.30}$$

en.$x(p,0) = x_a$ voor alle p. Nu willen we onderzoeken op welke manier de eindpunten twee naburige trajecten uit elkaar divergeren. Hiertoe voeren we de grootheid

$$J(p,t) = \frac{dx(p,t)}{dp} \tag{3.31}$$

in die we niet toevallig met dezelfde letter J als in de vorige sectie aanduiden. Het verschil tussen twee trajecten is bijgevolg gegeven door

$$x(p+\varepsilon,t) - x(p,t) = \varepsilon J(p,t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \tag{3.32}$$

Het klassiek traject $x(p,t)$ moet natuurlijk voldoen aan de Euler-Lagrange bewegingsvergelijking, cf. (1.14) :

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L}{\partial x}. \tag{3.33}$$

Als we dit partieel differentiëren naar p en daarbij rekening houden met de kettingregel voor $L(x(p,t), \dot{x}(p,t))$, dan komt er met

$$\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\frac{\partial \dot{x}}{\partial p} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}\partial x}\frac{\partial x}{\partial p} \tag{3.34}$$

$$\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\frac{\partial x}{\partial p} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}\partial x}\frac{\partial \dot{x}}{\partial p} \tag{3.35}$$

het resultaat

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\frac{\partial \dot{x}}{\partial p}\right) + \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}\partial x}\frac{\partial x}{\partial p}\right) = \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\frac{\partial x}{\partial p} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}\partial x}\frac{\partial \dot{x}}{\partial p}. \tag{3.36}$$

Met $\dot{J} = \partial \dot{x}/\partial p$ herschrijven we dit als

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\dot{J}\right) + \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}\partial x}\right) - \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\right] J. \tag{3.37}$$

Dit is de Hamilton-Jacobi vergelijking. Voor de Lagrangiaan van de fluctuaties,

$$L_{fl}(x,\dot{x}) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}\left.\frac{d^2V}{dx^2}\right|_{x_{kl}} x^2 \tag{3.38}$$

herleidt zich dit tot

$$m\frac{d^2J}{dt^2} + \frac{d^2V}{dx^2}J = 0, \tag{3.39}$$

wat exact hetzelfde resultaat is als (3.26). De randvoorwaarden vinden we via $x(p,0) = x_a$ en $\dot{x}(p,0) = p/m$. Hiermee is

$$\begin{aligned} J(p,0) &= 0, \\ \dot{J}(p,0) &= 1/m. \end{aligned}$$

De oplossing is dan *exact* de gezochte J uit de vorige sectie, die we in het resultaat (3.29) kunnen plaatsen.

De oplossing van de Hamilton-Jacobi vergelijking is verbonden met de actiefunctionaal. De link vind je via de variatie van de actie, uitdrukking (1.9) uit het eerste hoofdstuk:

$$\delta S = \int_{t_a}^{t_b}\left[m\frac{dx_{kl}}{dt}\frac{d\eta}{dt} - V'(x_{kl})\eta\right]dt. \tag{3.40}$$

Herinner u dat we hierin partiële integratie uitvoeren om van $\dot{\eta}$ af te raken,

$$\delta S = m\frac{dx_{kl}}{dt}\eta\Big|_0^T - \int_0^T\left[m\frac{d^2x_{kl}}{dt^2} + V'(x_{kl})\right]\eta dt. \tag{3.41}$$

Voor het klassiek pad valt de integraal weg. In tegenstelling tot voordien bekijken we nu uitwijkingen waarbij het eindpunt niet vast is. Voor twee klassieke paden met lichtjes verschillend eindpunt is $\eta(t_b) = \delta x_b$. Voor twee klassieke paden met lichtjes verschillend beginpunt is $\eta(t_a) = \delta x_a$. Daardoor valt de eerste term aan de randen niet weg, en komt er

$$\begin{aligned} \delta S &= (m\dot{x}_{kl}(T))\,\delta x_b - (m\dot{x}_{kl}(0))\,\delta x_a \\ &\Rightarrow \begin{cases} p(t=0) = -\left.\dfrac{\partial S}{\partial x_a}\right|_{x_b,T} \\ p(t=T) = \left.\dfrac{\partial S}{\partial x_b}\right|_{x_a,T} \end{cases} . \end{aligned} \tag{3.42}$$

In de context van de Hamilton-Jacobi vergelijking is $p(t=0)$ onze parameter p. Deze blijkt dus interpreteerbaar als een functie van x_b (en T), en we kunnen de afgeleide van p naar x_b schrijven als

$$\frac{1}{J} = \frac{dp}{dx_b} = -\left.\frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b}\right|_T . \tag{3.43}$$

Merk op dat we hier veronderstellen dat J aan de inverse functie stelling voldoet. Als die dat niet doet, zijn er brandpunten of brandlijnen waar de klassieke trajecten samenkomen, wat zorgt voor globale fasefactoren – voor de volledigheid verwijzen we naar het Morse index theorema[3]. Vullen we dit resultaat in, in (3.29), dan komt er

$$K_{fl}(0,T|0,0) = \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar}\left.\frac{\partial^2 S[x_{kl}(t)]}{\partial x_a \partial x_b}\right|_T} . \tag{3.44}$$

Oef, in het vervolg moeten we moeten enkel de actie langs het klassieke pad uitrekenen, om de propagator in WKB benadering te kunnen neerschrijven!

3.4 De WKB formule

Nu kunnen we eindelijk de nodige resultaten bij elkaar zetten om de propagator te vinden via de WKB methode.

1. Wanneer we de propagator zoeken voor deeltjes die van $\{x_a, t_a\}$ naar $\{x_b, t_b\}$ gaan, bepalen we eerst het klassieke pad $x_{kl}(t)$ dat deze ruimte-tijd punten verbindt.

2. Daarna berekenen we de actie langs het klassieke traject $S[x_{kl}(t)]$. Dit resultaat zal enkel nog afhangen van x_a, t_a, x_b, en t_b.

3. We berekenen ook de tweede afgeleide $\partial S[x_{kl}(t)]/(\partial x_a \partial x_b)$ bij vaste t_a en t_b

[3] M. Morse, *Variational Analysis* (Wiley, New York, 1973); zie ook L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York, 1996) §12 .

4. Dit zetten we bij elkaar in de WKB formule

$$\boxed{K(x_b,t_b|x_a,t_a) \approx \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 S[x_{kl}(t)]}{\partial x_a \partial x_b}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S[x_{kl}(t)]\right\}.} \tag{3.45}$$

Deze procedure veralgemeent naar meer dimensies. Noteren we de plaatsvector van de startpositie $\mathbf{a}$, en van de eindpositie $\mathbf{b}$, dan gaan we in 3D ook een 3x3 een matrix van tweede afgeleiden nodig hebben,

$$K(\mathbf{b},t_b|\mathbf{a},t_a) \approx \sqrt{\det\left(\frac{i}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 S[\mathbf{r}_{kl}(t)]}{\partial a_j \partial b_\ell}\right)}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S[\mathbf{r}_{kl}(t)]\right\}. \tag{3.46}$$

Hierin indexeren j en ℓ de componten van de vectoren $\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}_1 + a_2\mathbf{e}_2 + a_3\mathbf{e}_3$ en $\mathbf{b}$ (idem). Voorts is $\mathbf{r}_{kl}(t)$ het klassieke traject.

Ter controle kunnen we ons exact resultaat voor het vrije deeltje onderzoeken. Het klassieke traject is

$$x_{kl}(t) = x_a + (x_b - x_a)\frac{t-t_a}{t_b-t_a}. \tag{3.47}$$

De actie langs het klassieke traject is

$$S[x_{kl}(t)] = \frac{m}{2}\frac{(x_b-x_a)^2}{(t_b-t_a)}. \tag{3.48}$$

Merk op dat $-\partial S/\partial x_a = m(x_b - x_a)/(t_b - t_a) = mv$ inderdaad de impuls p is. De tweede afgeleide is

$$\frac{\partial S}{\partial x_b \partial x_a} = -\frac{m}{(t_b-t_a)}. \tag{3.49}$$

Hiermee levert de WKB formule het resultaat

$$K_0(x_b,t_b|x_a,t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b-t_a)}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_b-x_a)^2}{(t_b-t_a)}\right\}. \tag{3.50}$$

In dit geval is de WKB benadering zelfs exact, zoals we zien uit een vergelijking met het eerder bekomen resultaat (2.36).

Voor welke actiefunctionalen zal de WKB methode exacte resultaten opleveren? Dat is niet zo moeilijk na te gaan, dat zijn de actiefunctionalen waarvoor de puntjes ... in formule (3.12) wegvallen. Deze actiefunctionalen (en de bijbehorende Lagrangianen) zijn kwadratisch in x. Hieruit volgt dat we *systemen met kwadratische actiefunctionalen exact kunnen oplossen* – we dienen hiertoe WKB toe te passen. Voor 1 deeltje in 1 dimensie is de meest algemene exact oplosbare vorm

$$L(x,\dot{x},t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + a(t)x\dot{x} + b(t)x^2 + c(t)x + d(t)\dot{x} + e(t).$$

Dit omhelst ondermeer de harmonische oscillator (eventueel met aandrijfkracht en demping), en een deeltje in een homogeen krachtveld. In meer dimensies of met meer deeltjes kunnen we natuurlijk nog gekkere zaken bedenken. Wanneer een systeem geen kwadratische Lagrangiaan heeft is de WKB formule benaderend, en wordt het een betere benadering naarmate het systeem klassieker is, i.e. naarmate $(S[x_{kl}(t)]/\hbar) \to \infty$. We kunnen de benadering verbeteren door de hogere orde termen in rekening te brengen zoals in (3.8).

3.5 De harmonische oscillator

Als toepassing en voorbeeld gaan we de padintegraal voor de harmonische oscillator uitvoeren. De (ééndimensionale) harmonische oscillator met frequentie ω kan gedefiniëerd worden als systeem dat de volgende actiefunctionaal heeft:

$$S_{HO}[x(t)] = \int_0^T \left(\frac{1}{2} m\dot{x}^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) dt. \tag{3.51}$$

Vroeger schreef een mens al eens een Hamiltoniaan als startpunt van een vraagstuk neer, hier gebruiken we dus de actie (of de Lagrangiaan). We gebruiken de WKB methode aangezien deze een exact resultaat zal opleveren: deze actiefunctionaal is kwadratisch.

1. De eerste stap is het oplossen van de bewegingvergelijkingen voor het klassieke traject,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} &= \frac{\partial L}{\partial x} \\ &\Leftrightarrow \quad \ddot{x} = -\omega^2 x, \end{aligned} \tag{3.52}$$

met als randvoorwaarden $x(0) = x_a$ en $x(T) = x_b$. Dit is een eenvoudig differentiaalvergelijkingetje met algemene oplossing

$$x(t) = A\cos(\omega t) + B\sin(\omega t), \tag{3.53}$$

waarin A en B de integratieconstanten zijn. We vinden deze door de randvoorwaarden op te leggen,

$$\begin{cases} x_a = A \\ x_b = A\cos(\omega T) + B\sin(\omega t) \end{cases}, \tag{3.54}$$

en op te lossen:

$$\begin{cases} A = x_a \\ B = \dfrac{x_b - x_a\cos(\omega T)}{\sin(\omega T)} \end{cases}. \tag{3.55}$$

Hiermee is het klassiek pad vanuit $\{x_a, 0\}$ naar $\{x_b, T\}$ gegeven door

$$x_{kl}(t) = x_a\cos(\omega t) + \frac{x_b - x_a\cos(\omega T)}{\sin(\omega T)}\sin(\omega t). \tag{3.56}$$

2. De tweede stap bestaat er in dat we dit klassiek traject invullen in de actiefunctionaal. Hiertoe moeten we niet alleen $x_{kl}(t)$ kennen, maar ook

$$\dot{x}_{kl}(t) = -\omega x_a \sin(\omega t) + \omega \frac{x_b - x_a \cos(\omega T)}{\sin(\omega T)} \cos(\omega t), \tag{3.57}$$

en we moeten sinussen en cosinussen en hun produkt en kwadraat kunnen integreren, de regel

$$\begin{aligned} & \int_0^T [\alpha \cos(\omega t) + \beta \sin(\omega t)]^2 \, dt \\ = \; & \frac{2\alpha\beta + 2\omega T(\alpha^2 + \beta^2)}{4\omega} - \frac{2\alpha\beta}{4\omega} \cos(2\omega T) + \frac{\alpha^2 - \beta^2}{4\omega} \sin(2\omega T) \end{aligned} \tag{3.58}$$

kan hierbij behulpzaam zijn. Na enig triviaal rekenwerk, boekhouding van constanten, en vereenvoudigingen vinden we

$$\begin{aligned} S_{HO}[x_{kl}(t)] &= \int_0^T \left(\frac{1}{2} m \dot{x}_{kl}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x_{kl}^2 \right) dt \\ &= \frac{m\omega}{2} \frac{(x_a^2 + x_b^2)\cos(\omega T) - 2x_a x_b}{\sin(\omega T)}. \end{aligned} \tag{3.59}$$

3. In de derde stap zoeken we de afgeleide hiervan naar x_a en x_b

$$\frac{\partial^2 S_{HO}[x_{kl}(t)]}{\partial x_a} = m\omega \frac{x_a \cos(\omega T) - x_b}{\sin(\omega T)}. \tag{3.60}$$

We kunnen de relatie tussen begin-impuls en deze afgeleide, $m\dot{x}_{kl}(t = 0) = -\partial S / \partial x_a$ gebruiken als simpele test voor ons rekenwerk; de gelijkheid gaat hier inderdaad op. De tweede afgeleide is dan

$$\frac{\partial^2 S_{HO}[x_{kl}(t)]}{\partial x_a \partial x_b} = \frac{m\omega}{\sin(\omega T)}. \tag{3.61}$$

4. Als finale stap vullen we dit alles in, in de WKB uitdrukking om de kwantummechanische propagator voor een harmonische oscillator te kennen:

$$\boxed{K_{HO}(x_b, t_b | x_a, t_a) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \frac{(x_a^2 + x_b^2)\cos(\omega T) - 2x_a x_b}{\sin(\omega T)} \right\},} \tag{3.62}$$

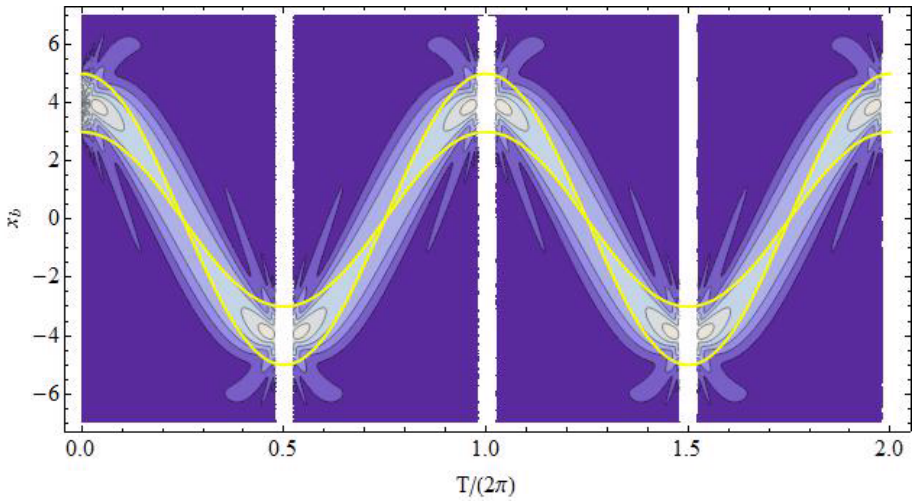
met $T = t_b - t_a$. Is het niet wonderbaarlijk dat we, enkel door het oplossen van het *klassieke* mechanica probleem, het *kwantummechanisch* resultaat bekomen? Enkel als de actie niet kwadratisch is, zijn er nog effecten van kwantumfluctuaties die niet door de WKB benadering in rekening gebracht zijn.

3.6 Propagatie van amplitudo's

Het resultaat voor de harmonische oscillator gaan we visualiseren. We gebruiken als eenheden de oscillatorlengte $a_{HO} = \sqrt{\hbar/m\omega}$ voor afstanden, en ω^{-1} voor tijden. We veronderstellen dat we op tijd $t = 0$ weten dat het deeltje zich ergens bevindt tussen $x_a = 3$ en $x_a = 5$ (met een uniforme kansverdeling). We weten dat bijvoorbeeld omdat we er op tijd $t = 0$ een muurtje hebben gezet zoals in het verhaal over diffractie van materiegolven uit het vorige hoofdstuk. We zoeken dan de amplitudo dat het vanuit die startpositie geraakt in x_b op tijd T. Deze amplitudo is dus de som van alle paden die ergens in $x_a \in [3, 5]$ vertrekken en dan aankomen in x_b. Dit kan geschreven worden als

$$\phi(x_b, T) = \int_{3a_{HO}}^{5a_{HO}} dx_a \; K_{HO}(x_b, T|x_a, 0).$$

Het resultaat voor $|\phi|^2$ is geplot in onderstaande figuur:



We hebben een mooie oscillatie in de harmonische potentiaal. De gele lijnen tonen wat klassieke deeltjes, vertrekkend uit $x_a = 3$ en $x_a = 5$ zouden doen. In $x = 0$ komen deze klassieke paden bij elkaar, maar kwantummechanisch blijft er een onbepaaldheid bestaan. Merk op dat er in de grafiek witte strepen staan telkens $T = n\pi$ met $n \in \mathbb{Z}$. In die punten heeft de computer numerieke problemen, omdat $\sin(\omega T) = 0$, en de analytische limiet waarbij de propagator terug een delta-functie wordt (zoals uitdrukking (2.6)) geeft rekenproblemen, net zoals bij het uitrekenen van $\sin(x)/x$ op een rekenmachine. De punten bij $T = n\pi$ zijn speciale punten, brandpunten, waarbij de paden terug focusseren tot één punt en de propagator een deltafunctie wordt.

Bemerk dat de deeltjes starten met beginsnelheid nul. Dit komt omdat we de start-amplitudo op tijd=0 uniform gekozen hebben, zonder oscillaties. We

kunnen immers onze formule herschrijven als

$$\boxed{\phi(x_b, T) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_a K_{HO}(x_b, T|x_a, 0)\phi(x_a, 0),} \tag{3.63}$$

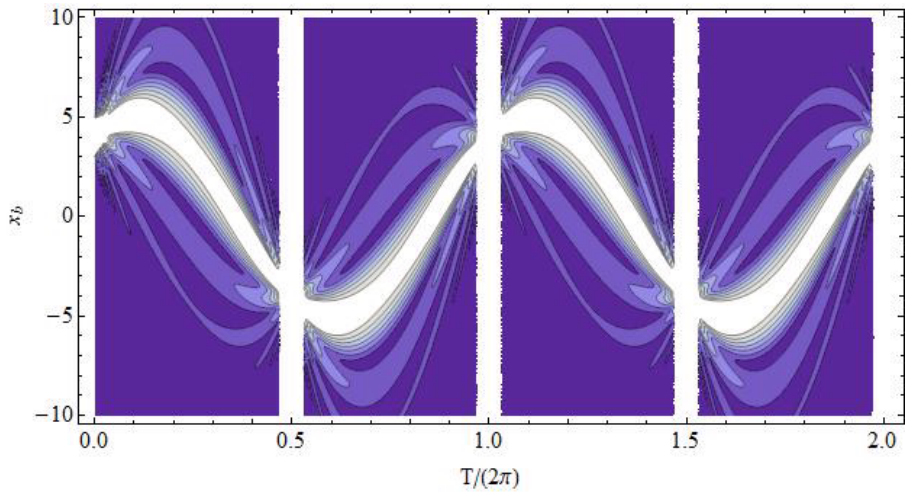
met start-amplitudo

$$\phi(x_a, 0) = \begin{cases} 1 \text{ voor } x_a \in [3, 5] \\ 0 \text{ voor } x_a \notin [3, 5] \end{cases} . \tag{3.64}$$

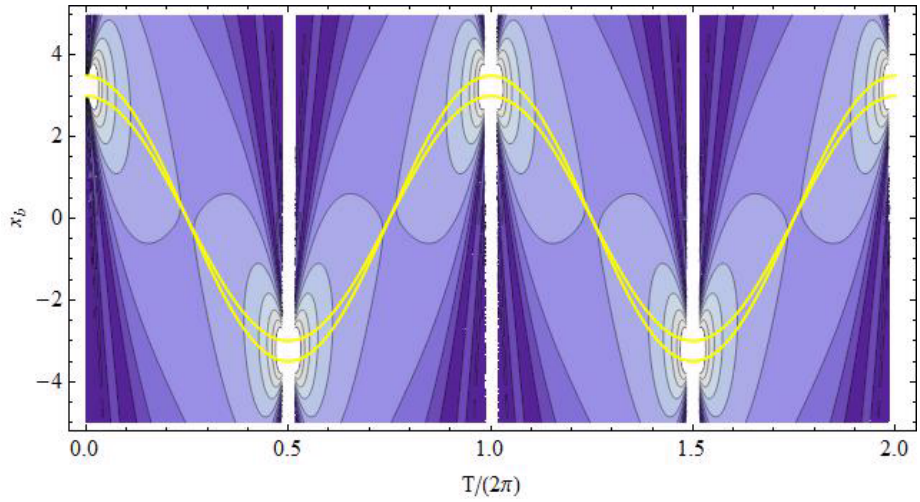
Dit maakt duidelijk van waar de propagator zijn naam gekregen heeft. We propageren een start-amplitudo om deeltjes ergens te vinden, naar een eindtijd T via bovenstaande formule. Hiermee bekomen we de amplitudo om deetjes te vinden op plaats x_b op tijd T. Deeltjes met een impuls p hebben een golffunctie die oscilleert met golflengte $\lambda = h/p$. Stel nu dat we starten met

$$\phi(x_a, 0) = \begin{cases} \exp(i\pi x/\lambda) \text{ voor } x_a \in [3, 5] \\ 0 \text{ voor } x_a \notin [3, 5] \end{cases} \tag{3.65}$$

met $\lambda = 1$. Dan hebben we de deeltjes wel een startsnelheid gegeven, zoals te zien op onderstaande prent voor de resulterende $|\phi(x_b, T)|^2$:



Het gebied van sterke intensteit vertrekt niet meer horizontaal, maar met een positieve startsnelheid. De oscillatie is nog steeds klassiek, en de in de tijd varierende impuls geeft aanleiding tot ruimtelijke oscillaties. In deze prenten kan je daarom ook zwakke secundaire diffractielijnen zien. Worden we zekerder van de positie van het deeltje (doordat we zeggen dat het start bij $x_a \in [3, 3.5]$), dan is de impuls onbepaalder (hoewel nog steeds gemiddeld nul als we een uniforme start-amplitudo gebruiken). Dit resulteert in een amplitudo op latere tijden waar de oscillatie niet meer zo uitgesproken is, en in een kwantumverbreding:



Dit toont alleszins dat de kwantummechanische effecten ook vervat zijn in onze propagator berekend met enkel het klassieke pad als input. Als je meent dat de propagerende ampitudo's verdacht veel weg hebben van de golffuncties uit Schrödinger's versie van de kwantummechanica, dan heb je het goed voor. Dit verband brengt ons naadloos naar het volgende hoofdstuk.

Hoofdstuk 4

Schrödinger's kwantummechanica

> To learn something new, take the path that you took yesterday
> – John Burroughs.

4.1 Van padintegraal tot golfvergelijking

De samenstellingseigenschap

$$K(x_b t_b | x_a t_a) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_b t_b | x_c, t_c) K(x_c, t_c | x_a t_a) dx_c \tag{4.1}$$

en de propagatie van een amplitudo

$$\phi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K(x_b, t_b | x_c, t_c) \phi(x_c, t_c) \tag{4.2}$$

zijn integraalvergelijkingen. In het tweede laten we de informatie dat het deeltje oorspronkelijk uit x_a, t_a kwam achterwege en leggen we de nadruk op hoe de amplitudo in de ruimte varieert op tijdstip t_c.

Integraalvergelijkingen kunnen worden omgezet naar differentiaalvergelijkingen. Dit gebeurt altijd via dezelfde truc: het tijdsintervalletje schuift infinitesimaal op: $t_b - t_c = \delta t$. Met andere woorden, we onderzoeken

$$\phi(x, t + \delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \; K(x, t + \delta t | x - y, t) \phi(x - y, t). \tag{4.3}$$

Het deeltje in plaats x op tijd $t + \delta t$, moet daar naartoe gepropageerd zijn vanuit een plaats $x - y$ een tijdstipje δt vroeger. Het kan natuurlijk eender

welke afstand y afgelegd hebben om tot in x te geraken, dus we sommeren over alle mogelijke y. Wanneer δt infinitesimaal wordt, kan de propagator vervangen worden door de infinitesimale propagator, uitdrukking (2.22):

$$K(x,t+\delta t|x-y,t) \approx \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\frac{y^2}{\delta t} - V(x)\,\delta t\right]\right\}. \tag{4.4}$$

Herinner u dat we de vrijheid gebruikt hebben om in deze formule $V(x)$ of $V(x-y)$ of $V\left(\frac{x+(x-y)}{2}\right)$ te kiezen, cf. (2.14). Voor kleine δt kunnen we bovendien de exponentiële met de potentiaal benaderen als

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}V\left(\tfrac{x+(x-y)}{2}\right)\delta t\right\} \approx 1 - \frac{i}{\hbar}V(x)\,\delta t. \tag{4.5}$$

Hiermee is

$$K(x,t+\delta t|x-y,t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar\delta t}y^2\right) \times \left[1 - \frac{i}{\hbar}V(x)\,\delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)\right]. \tag{4.6}$$

De vergelijking wordt

$$\begin{aligned}\phi(x,t+\delta t) &= \left[1 - \frac{i}{\hbar}V(x)\,\delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)\right] \times \\ &\int_{-\infty}^{\infty} dy\, \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar\delta t}y^2\right)\phi(x-y,t).\end{aligned} \tag{4.7}$$

Als we toch maar tot op orde δt gaan voor het rechterlid, dan kunnen we dat ook in het linkerlid doen,

$$\begin{aligned}\phi(x,t) + \frac{\partial\phi}{\partial t}\delta t &= \left[1 - \frac{i}{\hbar}V(x)\,\delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)\right] \times \\ &\int_{-\infty}^{\infty} dy\, \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar\delta t}y^2\right)\phi(x-y,t).\end{aligned} \tag{4.8}$$

De factor vóór $\phi(x-y,t)$ in het integrandum is sterk gepiekt rond $y=0$ – in de limiet $\delta t \to 0$ weten we immers dat dit een deltafunctie wordt (cf. uitdrukking (2.24)). Dan kunnen we de amplitudo in het rechterlid ook ontwikkelen voor kleine y :

$$\phi(x-y,t) = \phi(x,t) + \frac{\partial\phi}{\partial x}y + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}y^2 + \mathcal{O}(y^3). \tag{4.9}$$

Enkele standaard gaussische integralen treden dan op:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar\delta t}y^2\right) = 1, \tag{4.10}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}} y \exp\left(\frac{im}{2\hbar\delta t}y^2\right) = 0, \tag{4.11}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}} y^2 \exp\left(\frac{im}{2\hbar\delta t}y^2\right) = \frac{i\hbar\delta t}{m}. \tag{4.12}$$

We zien dat de integraal met y^2 van de orde δt is. Oneven machten van y geven nul omdat het integrand oneven is, en hogere even machten van y geven opnieuw termen van minstens orde δt^2. Met deze integralen kunnen we uitdrukking (4.8) vereenvoudigen tot

$$\phi(x,t) + \frac{\partial\phi}{\partial t}\delta t = \left(1 - \frac{i}{\hbar}V(x)\,\delta t\right)\left(\phi(x,t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\frac{i\hbar\delta t}{m}\right) + \mathcal{O}(\delta t^2). \tag{4.13}$$

De nulde-orde termen in δt vallen weg tegen elkaar, en de eerste orde termen die overblijven geven

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}\delta t = -\frac{i}{\hbar}V(x)\,\phi(x,t)\delta t + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\frac{i\hbar\delta t}{m}.$$

Vermenigvuldigen we dit met $i\hbar/\delta t$, dan komt er

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + V(x)\phi. \tag{4.14}$$

Dit is de u welbekende Schrödingervergelijking! Goed nieuws: we zijn wel begonnen van heel andere postulaten dat grootvaders Kopenhaagse kwantummechanica, maar we zullen op het eind van de dag dezelfde resultaten bekomen. De Schrödingervergelijking zit braaf vervat in ons formalisme, maar padintegralen zijn algemener (andere acties kunnen gebruikt worden) en bovendien zuiniger in postulaten, zou de padintegralenverkoper zeggen.

4.2 Het probleem met de vectorpotentiaal

Voor een systeem met actiefunctionaal

$$S[x(t)] = \int_0^T dt\; L(x,\dot{x}) = \int_0^T dt\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 + V(x)\right) \tag{4.15}$$

kunnen we de time-sliced limiet schrijven als

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= \lim_{N\to\infty}\sum_{j=1}^{N}\int_{t_{j-1}}^{t_j} dt\; L\left(\frac{x_j+x_{j-1}}{2},\frac{x_j-x_{j-1}}{t_j-t_{j-1}}\right) \\ &= \lim_{N\to\infty}\sum_{j=1}^{N}\int_{t_{j-1}}^{t_j} dt\left(\frac{m}{2}\left(\frac{x_j-x_{j-1}}{t_j-t_{j-1}}\right)^2+V\left(\frac{x_j+x_{j-1}}{2}\right)\right) \end{aligned} \tag{4.16}$$

Hierin hebben we tot nu toe enkel een scalaire potentiaal $V(x)$ beschouwd, en nog geen vectorpotentiaal. Dat gaan we nochtans nodig hebben om elektromagnetisme in rekening te brengen. De Lagrangiaan van een geladen deeltje in een elektromagnetisch veld is

$$L=\frac{m}{2}\dot{\mathbf{x}}^2+q\dot{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x},t)-V(\mathbf{x}). \tag{4.17}$$

Nu moeten we wel werken in drie dimensies, elektromagnetisme zou er helemaal anders uit zien in 2D of 1D, zoals je misschien uit de veldentheorie weet. Of, als je dat niet weet, probeer maar eens in een andere aantal dimensies de bewegingsvergelijkingen op te stellen! In de actiefunctionaal geeft de term van de vectorpotentiaal aanleiding tot een bijdrage

$$\begin{aligned} S[\mathbf{x}(t)] &= \lim_{N\to\infty}\sum_{j=1}^{N}\int_{t_{j-1}}^{t_j} dt\;\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_{j-1}}{t_j-t_{j-1}}\right)^2\right. \\ &\left.+q\frac{\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_{j-1}}{t_j-t_{j-1}}\cdot\mathbf{A}\left(\frac{\mathbf{x}_j+\mathbf{x}_{j-1}}{2}\right)-V\left(\frac{\mathbf{x}_j+\mathbf{x}_{j-1}}{2}\right)\right]. \end{aligned} \tag{4.18}$$

Op het eerste zicht vertelt je intuïtie je dat het er niet toe doet of je hierin nu $\mathbf{A}(\mathbf{x}_j)$ of $\mathbf{A}(\mathbf{x}_{j-1})$ of $\mathbf{A}((\mathbf{x}_j+\mathbf{x}_{j-1})/2)$ gebruikt, dat zou allemaal naar dezelfde limiet moeten convergeren. Voor de term met V is dit inderdaad zo, voor de vectorpotentiaal niet! De infinitesimale propagator wordt hiermee

$$\boxed{\begin{aligned} K_\varepsilon(\mathbf{x}_j,t_{j-1}+\delta t|\mathbf{x}_{j-1},t_{j-1}) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}}^{\,3}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\frac{(\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_{j-1})^2}{\delta t}\right.\right. \\ &\left.\left.+q(\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_{j-1})\cdot\mathbf{A}\left(\frac{\mathbf{x}_j+\mathbf{x}_{j-1}}{2}\right)-V\left(\frac{\mathbf{x}_j+\mathbf{x}_{j-1}}{2}\right)\delta t\right]\right\}. \end{aligned}} \tag{4.19}$$

Aangezien we in 3 dimensies werken staat er nu een derde macht bij de wortel in de voorfactor, om de correcte normering te bekomen.

We beginnen door eerst aan te tonen dat we met de keuze voor het midpunt $(\mathbf{x}_j+\mathbf{x}_{j-1})/2$ de juiste Schrödingervergelijking terugkrijgen. Dit doen we door net zoals in vorige subsectie naar de infinitesimale propagator $K(\mathbf{x},t+\delta t|\mathbf{x}-\mathbf{y},t)$

te kijken, zodat $\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1} = \mathbf{y}$ en $(\mathbf{x}_j + \mathbf{x}_{j-1})/2 = \mathbf{x} - (\mathbf{y}/2)$ Voor de

$$K_\varepsilon(\mathbf{x}, t+\delta t|\mathbf{x}-\mathbf{y}, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}}^3 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\frac{y^2}{\delta t}\right.\right.$$
$$\left.\left. -V\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}/2\right)\delta t + q\mathbf{y}\cdot\mathbf{A}\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}/2\right)\right]\right\}. \tag{4.20}$$

Hierin gaan we

$$\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[-V\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}/2\right)\delta t + q\mathbf{y}\cdot\mathbf{A}\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}/2\right)\right]\right\} \tag{4.21}$$

ontwikkelen naar δt (waarbij we uit vorige sectie onthouden dat y^2 van dezelfde orde is als δt). Voor de eerste factor komt er

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}V\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}/2\right)\delta t\right\} = 1 - \frac{i}{\hbar}V\left(\mathbf{x}\right)\delta t + \mathcal{O}(\delta t^{3/2}). \tag{4.22}$$

Het verschil tussen werken met $V\left(\mathbf{x}\right)$ en $V(\mathbf{x}-\mathbf{y}/2)$ is van hogere orde in δt, het is van de orde $y\delta t = \mathcal{O}(\delta t^{3/2})$, en dus niet van tel. Maar in de exponentiële met de vectorpotentiaal is $\mathbf{y}$ wél belangrijk. Ontwikkelen tot op orde δt is ontwikkelen tot op orde y^2

$$\begin{aligned}
& \exp\left\{+\frac{i}{\hbar}q\mathbf{y}\cdot\mathbf{A}\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}/2\right)\right\} \\
= \; & \exp\left\{+\frac{i}{\hbar}q\mathbf{y}\cdot\left[\mathbf{A}(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\left(\mathbf{y}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\mathbf{A}(\mathbf{x})\right] + \mathcal{O}(y^3)\right\} \\
= \; & 1 + \frac{i}{\hbar}q\mathbf{y}\cdot\left[\mathbf{A}(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\left(\mathbf{y}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\mathbf{A}(\mathbf{x})\right] \\
& + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 q^2\left(\mathbf{y}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x})\right)^2 + \mathcal{O}(y^3).
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Als we de boel terug bijeenschrijven, dan vinden we tot op orde δt

$$K_\varepsilon(\mathbf{x}, t+\delta t|\mathbf{x}-\mathbf{y}, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}}^3 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{y^2}{\delta t}\right\}$$
$$\times\left(1 - \frac{i}{\hbar}V\left(\mathbf{x}\right)\delta t + \frac{i}{\hbar}q\mathbf{y}\cdot\left[\mathbf{A}(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\left(\mathbf{y}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\mathbf{A}(\mathbf{x})\right] + \frac{1}{2}\left(\frac{iq}{\hbar}\mathbf{y}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x})\right)^2\right).$$

Net zoals voorheen gebruiken we deze resultaten in

$$\phi(\mathbf{x}, t+\delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y}\; K_\varepsilon(\mathbf{x}, t+\delta t|\mathbf{x}-\mathbf{y}, t)\phi(\mathbf{x}-\mathbf{y}, t), \tag{4.24}$$

met

$$\phi(\mathbf{x}-\mathbf{y}, t) = \left[1 - \left(\mathbf{y}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right) + \frac{1}{2}y^2\nabla^2\right]\phi(\mathbf{x}, t). \tag{4.25}$$

We vinden dan, voor onze aangepaste versie van (4.8). Opnieuw verzamelen van alle termen van orde δt (of y^2) geeft

$$\begin{aligned}\frac{\partial\phi}{\partial t}\delta t &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}}^{3}\int d\mathbf{y}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{y^2}{\delta t}\right\}\\ &\times\left[-\frac{i}{\hbar}V\phi\delta t+\frac{1}{2}\phi\left(\frac{iq}{\hbar}\mathbf{y}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x})\right)^2+\frac{1}{2}y^2\nabla^2\phi\right.\\ &\left.-\frac{i}{\hbar}q\left(\mathbf{y}\cdot\mathbf{A}\right)\left(\mathbf{y}\cdot\boldsymbol{\nabla}\phi\right)-\frac{i}{2\hbar}q\phi\mathbf{y}\cdot\left(\mathbf{y}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\mathbf{A}(\mathbf{x})\right]. \qquad (4.26)\end{aligned}$$

Dit integreert tot

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\phi+V\phi+\frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2\phi\\ &\quad-\frac{i\hbar q}{2m}\left[2\left(\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\phi+\phi\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A}\right)\right]. \qquad (4.27)\end{aligned}$$

Dit laat zich ten slotte herschrijven tot

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left[-i\hbar\boldsymbol{\nabla}+q\mathbf{A}\right]^2\phi+V\phi, \qquad (4.28)$$

wat inderdaad de juiste Schrödingervergelijking is voor een geladen deeltje in een elektromagnetisch veld.

Als we $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ hadden gebruikt in plaats van $\mathbf{A}(\mathbf{x}-\mathbf{y}/2)$, dan was de term met $\frac{i}{2\hbar}q\phi\mathbf{y}\cdot(\mathbf{y}\cdot\boldsymbol{\nabla})\,\mathbf{A}(\mathbf{x})$ niet verschenen in (4.27), en deze term gaf aanleiding tot $\phi\,(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A})$ in vergelijking (4.27). Andersom, hadden we het eindpunt gebruikt, $\mathbf{A}(\mathbf{x}-\mathbf{y})$, dan was de term met $\phi\,(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A})$ in vergelijking (4.27) vermenigvuldigd met een foutieve factor 2. Niets van dit alles doet er toe als we opleggen dat $\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A}=0$, de Coulomb ijk, maar we besluiten dat het voor een algemene ijk dus wél van belang is om de midpuntsregel te gebruiken!

Opmerking – Ter aanvulling tonen we even aan dat de Lagrangiaan (4.17) inderdaad leidt tot de Lorentzkracht. In 3D vinden we voor de Euler-Lagrange bewegingsvergelijkingen van $\mathbf{x}=x_1\mathbf{e}_x+x_2\mathbf{e}_y+x_3\mathbf{e}_z$:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_j} &= \frac{\partial L}{\partial x_j}\\ &\Leftrightarrow\ \frac{d}{dt}\left[m\dot{x}_j+qA_j(\mathbf{x})\right]=-\frac{\partial V}{\partial x_j}+\sum_{k=1}^{3}q\dot{x}_k\frac{\partial A_k}{\partial x_j}. \qquad (4.29)\end{aligned}$$

Het rechterlid is

$$\frac{d}{dt}\left[m\dot{x}_j+qx_jA_j(\mathbf{x},t)\right]=m\ddot{x}_j+q\frac{\partial A_j}{\partial t}+q\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial A_j}{\partial x_k}\dot{x}_k. \qquad (4.30)$$

Voor de potentiaal gebruiken we $q\phi$ met ϕ de scalaire (elektrostatische) potentiaal. Dan komt er

$$m\ddot{x}_j = -q\frac{\partial \phi}{\partial x_j} - q\frac{\partial A_j}{\partial t} + q\sum_{k=1}^{3}\dot{x}_k\left(\frac{\partial A_k}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_k}\right), \tag{4.31}$$

wat zich inderdaad herleidt tot

$$\mathbf{F} = \mathbf{E} + q\mathbf{v}\times\mathbf{B}, \tag{4.32}$$

aangezien $\mathbf{E} = -\boldsymbol{\nabla}\phi - \partial\mathbf{A}/\partial t$ en $\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}$.

4.3 Van Hamiltoniaan tot padintegraal

In de vorige sectie zijn we gegaan van de padintegraal naar de traditionele kwantummechanica. In deze sectie gaan we de weg andersom afleggen, en uit de traditionele kwantummechanica een uitdrukking voor de propagator opstellen. Hierbij dient opgemerkt te worden, dan dit enkel de equivalentie aantoont van beide formalismes voor actiefunctionalen die een tradionele vorm hebben (beschrijfbaar door een tijdsonafhankelijke Hamiltoniaan). Je hebt meer vrijheid in de keuze van de actiefunctionaal dan enkel die vormen die volgen uit tijdsonafhankelijke Hamiltonianen.

4.3.1 Tijdsevolutie-operator

In bra-ket notatie vertelt de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\phi(t)\right\rangle = \hat{H}\left|\phi(t)\right\rangle \tag{4.33}$$

ons iets over de tijdsevolutie van de toestand $|\psi(t)\rangle$, namelijk dat de Hamiltoniaan

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{4.34}$$

de generator is van de tijdsevolutie. Deze Hamiltoniaan uitdrukken in positierepresentatie geeft de Schrödingervergelijking (4.14). Bovenstaande differentiaalvergelijking kan ook als integraalvergelijking geschreven worden: door te integreren van tijd t_0 tot tijd t komt er

$$i\hbar\left(\left|\phi(t)\right\rangle - \left|\phi(t_0)\right\rangle\right) = \int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{H}(t')\left|\phi(t')\right\rangle, \tag{4.35}$$

waarbij we toelaten dat de Hamiltoniaan nog een expliciete tijdsafhankelijkheid heeft (bvb. een potentiaal die we inschakelen). Dit kan herschikt worden tot

$$\left|\phi(t)\right\rangle = \left|\phi(t_0)\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\hat{H}(t_1)\left|\phi(t_1)\right\rangle. \tag{4.36}$$

We kunnen deze vergelijking recursief oplossen door in het integrand de formule zelf opnieuw in te vullen:

$$\begin{aligned} |\phi(t)\rangle &= |\phi(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 \hat{H}(t_1)\,|\phi(t_0)\rangle \\ &\quad + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\,|\phi(t_2)\rangle\,. \end{aligned} \tag{4.37}$$

Door telkens maar opnieuw in de laatste term de oorspronkelijke vergelijking in te vullen ontstaat een reeks:

$$|\phi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 ... \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)...\hat{H}(t_n)\,|\phi(t_0)\rangle\,. \tag{4.38}$$

Aan de hand van de tijdsordeningsoperator $\mathcal{T}$ en symmetrie kan dit herschreven worden tot

$$|\phi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 ... \int_{t_0}^{t} dt_n \mathcal{T}\left[\hat{H}(t_1)...\hat{H}(t_n)\right]|\phi(t_0)\rangle\,. \tag{4.39}$$

De tijdsordeningsoperator $\mathcal{T}$ ordent de operatoren van een produkt in chronologische volgorde, waarde de vroegste eerst inwerkt. De reeks blijkt die van de exponentiële functie te zijn:

$$|\phi(t)\rangle = \mathcal{T}\left\{\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 \hat{H}(t_1)\right]\right\}|\phi(t_0)\rangle\,. \tag{4.40}$$

Dit is de "integraalvergelijking" vorm van Schrödingermechanica. In wat volgt gaan we werken met een *tijdsonafhankelijke* Hamiltoniaan, dan vereenvoudigt bovenstaand resultaat zich tot

$$|\phi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}\right]|\phi(t_0)\rangle\,. \tag{4.41}$$

De exponentiële is hier een unitaire transformatie die de een translatie in de tijd bewerkstelligt, deze wordt soms genoteerd als $\hat{U}(t,t_0)$. Dit is de **tijdsevolutieoperator**.

4.3.2 De Trotter produkt formule

Voor reële of complexe getallen a, b geldt dat $e^{a+b} = e^a + e^b$, voor operatoren geldt dit niet. Dat is een nadeel, we zouden graag de Hamiltoniaanse operator

$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ opsplitsen in een deel kinetische energie $\hat{T}$ en een deel potentiële energie $\hat{V}$, maar we mogen de opsplitsing niet doortrekken:

$$e^{\lambda\left(\hat{T}+\hat{V}\right)} \neq e^{\lambda\hat{T}} e^{\lambda\hat{V}}. \tag{4.42}$$

Voor $\lambda = -i(t - t_0)/\hbar$ had dit het oplossen van (4.41) vereenvoudigd. Het verschil tussen linker-en rechterlid kan worden uitgedrukt met de commutator $\left[\hat{T}, \hat{V}\right]$ en hogere orde commutatoren van $\hat{T}$ en $\hat{V}$. Dat brengt Trotter op een idee; aangezien voor een grote N geldt dat

$$\left[\frac{\hat{T}}{N}, \frac{\hat{V}}{N}\right] = \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \tag{4.43}$$

van orde $(1/N^2)$ is, vinden we

$$e^{\lambda\left(\hat{T}+\hat{V}\right)/N} = e^{\lambda\hat{T}/N} e^{\lambda\hat{V}/N} + \mathcal{O}\left[(\lambda/N)^2\right]. \tag{4.44}$$

De correcties ten gevolge van het opsplitsen van de exponentiële kunnen arbitrair klein gemaakt worden als N arbitrair groot mag worden. Het laatste puzzelstuk dat we nodig hebben is de identiteit

$$\left(e^{\hat{A}/N}\right)^N = e^{\hat{A}}, \tag{4.45}$$

wat je met reeksontwikkeling en verzamelen van termen kan aantonen. Hiermee is

$$e^{\lambda\left(\hat{T}+\hat{V}\right)} = \left(e^{\lambda\left(\hat{T}+\hat{V}\right)/N}\right)^N = \left(e^{\lambda\hat{T}/N} e^{\lambda\hat{V}/N} + \mathcal{O}\left[(\lambda/N)^2\right]\right)^N. \tag{4.46}$$

Brengen we dit allemaal samen, dan hebben we de **Trotter produkt formule**:

$$e^{\lambda\left(\hat{T}+\hat{V}\right)} = \lim_{N\to 0}\left(e^{\lambda\hat{T}/N} e^{\lambda\hat{V}/N}\right)^N. \tag{4.47}$$

4.3.3 Propagator

De padintegraalpropagator $K(x, t|x_0, t_0)$ is de amplitudo dat een deeltje dat zich op de positie x_0 bevindt op tijd t_0 zich op een later tijdstip t zal bevinden in x. We kunnen dit uitdrukken met positie-kets $|x_0\rangle$ en $|x\rangle$, als de amplitudo dat een deeltje, oorspronkelijk in toestand $|x_0\rangle$, in de tijd evolueert naar toestand $|x\rangle$. De tijdsevolutie van $|x_0\rangle$ kunnen we schrijven als

$$|x_0(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}\right]|x_0\rangle, \tag{4.48}$$

en de amplitudo dat dit overlapt met $|x\rangle$ is dan

$$\boxed{K(x, t|x_0, t_0) = \left\langle x \left| \exp\left[-\tfrac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)\right] \right| x_0 \right\rangle.} \tag{4.49}$$

Deze formule legt de link met het Heisenberg operatorformalisme en met de Hamiltoniaanse operator in het bijzonder. De Trotter produktformule laat dan toe om dit te schrijven als

$$K(x,t|x_0,t_0) = \lim_{N\to\infty} \left\langle x \left| \left(\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{t-t_0}{N}\hat{T}\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{t-t_0}{N}\hat{V}\right]\right)^N \right| x_0 \right\rangle . \tag{4.50}$$

Eigenlijk is dit weerom time-slicing, we hebben nu tijdsstapjes $\Delta t = (t-t_0)/N$ in elk van de factoren. Tussen elk produkt kunnen we de eenheidsoperator schrijven,

$$\hat{1} = \int dx_j \left|x_j\right\rangle \left\langle x_j\right| , \tag{4.51}$$

waarmee

$$\begin{aligned} K(x,t|x_0,t_0) &= \lim_{N\to\infty} \int dx_1 ... \int dx_{N-1} \\ &\times \prod_{j=1}^{N} \left\langle x_j \left| \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\hat{T}\right] \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\hat{V}\right] \right| x_{j-1} \right\rangle , \end{aligned} \tag{4.52}$$

waarin $x_N = x$. Weerom zitten we met de infinitesimale propagator:

$$K_\varepsilon(x_j,t_j|x_{j-1},t_{j-1}) = \left\langle x_j \left| \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\hat{T}\right] \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\hat{V}\right] \right| x_{j-1} \right\rangle \tag{4.53}$$

(met $t_j = t_0 + j\Delta t$). Om deze uit te rekenen, voeren we ook de ontbinding van de eenheidsoperator in impuls-kets door:

$$\hat{1} = \int dp \left|p\right\rangle \left\langle p\right| , \tag{4.54}$$

waarbij

$$\left\langle p|x\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left\{ipx/\hbar\right\} . \tag{4.55}$$

Er komt

$$K_\varepsilon(x_j,t_j|x_{j-1},t_{j-1}) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \left\langle x_j \left| \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\hat{T}\right] \right| p \right\rangle \left\langle p \left| \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\hat{V}\right] \right| x_{j-1} \right\rangle . \tag{4.56}$$

Hierin is

$$\exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\hat{V}\right] \left|x_{j-1}\right\rangle = \left|x_{j-1}\right\rangle \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}V(x_{j-1})\right] , \tag{4.57}$$

en

$$\exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\hat{T}\right] \left|p\right\rangle = \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\right] \left|p\right\rangle , \tag{4.58}$$

waarmee

$$\begin{aligned} K_\varepsilon(x_j,t_j|x_{j-1},t_{j-1}) &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \left\langle x_j|p\right\rangle \left\langle p|x_{j-1}\right\rangle \\ &\times \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\right] \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}V(x_{j-1})\right] . \end{aligned} \tag{4.59}$$

De exponentiëlen kunnen terug worden samengevoegd, want ze bevatten geen operatoren meer, zodat

$$K_\varepsilon(x_j,t_j|x_{j-1},t_{j-1}) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}p(x_j - x_{j-1}) - \frac{i\Delta t}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m} + V(x_{j-1})\right)\right\}. \tag{4.60}$$

De integratie over p kan worden uitgevoerd, het is weerom de standaard Gaussische integraal $\int dp \exp\left\{-ap^2 + bp\right\} = \sqrt{\pi/a}\exp\left\{b^2/(4a)\right\}$ zodat

$$K_\varepsilon(x_j,t_j|x_{j-1},t_{j-1}) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m(x_j - x_{j-1})^2}{2\Delta t} - \frac{i}{\hbar}V(x_{j-1})\Delta t\right\}. \tag{4.61}$$

Dit is exact wat we eerder vonden in het hoofdstuk voor time-slicing:

$$\begin{aligned} K(x,t|x_0,t_0) &= \lim_{N\to\infty}\int dx_1 ... \int dx_{N-1} \\ &\times \prod_{j=1}^{N}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m(x_j - x_{j-1})^2}{2\Delta t} - \frac{i}{\hbar}V(x_{j-1})\Delta t\right\}, \end{aligned} \tag{4.62}$$

met, opnieuw $x_N = x$. De kwantummechanica zoals je hem reeds kende is dus compatibel met de nieuwe kwantummechanica die we hier op basis van slechts de twee postulaten hebben opgesteld.

Opmerking – Bemerk dat het argument van de exponentiële in (4.60) op de factor $i/\hbar$ na kan geschreven worden als

$$\begin{aligned} -p(x_j - x_{j-1}) + \Delta t\left(\frac{p^2}{2m} + V(x_{j-1})\right) &= -p\frac{x_j - x_{j-1}}{\Delta t}\Delta t + H(x_{j-1},p)\Delta t \\ &\approx \int_{t_{j-1}}^{t_j} \left(-p\dot{x} + H(x,p)\right) dt \\ &\approx \int_{t_{j-1}}^{t_j} L(x,\dot{x})dt, \end{aligned}$$

waarmee er eigenlijk opnieuw de actie voor een infinitesimaal tijdsstapje staat. Dus, de $\langle x_j|p\rangle\langle p|x_{j-1}\rangle$ fourierfactoren zorgen hier voor de Legendretransformatie van de Hamiltoniaan naar de Lagrangiaan, waarmee we opnieuw dezelfde formule tegenkomen voor de infinitesimale propagator.

4.4 Perturbatiereeksen en Feynmandiagrammen

Een van de voordelen van de padintegraal is dat er geen operatoren meer bij te pas komen. In de voorgaande sectie moesten we ons zorgen maken over het niet commuteren van de kinetische energie $\hat{K}$ en de potentiële energie $\hat{V}$ wanneer we

de exponentiële wilden factoriseren. In de padintegraal is er daar geen probleem mee:

$$\begin{aligned} K(x_b,t_b|x_a,t_a) &= \int\limits_{\{x_a,t_a\}}^{\{x_b,t_b\}} Dx\ \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]\right\} \\ &= \int\limits_{\{x_a,t_a\}}^{\{x_b,t_b\}} Dx\ \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_a}^{t_b}\frac{m}{2}\dot{x}^2dt\right\}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_a}^{t_b}V(x(t),t)dt\right\}. \end{aligned} \tag{4.63}$$

We kunnen hierin de exponentiële functie die met de potentiaal te maken heeft, in reeks ontwikkelen:

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_a}^{t_b}V(x(t),t)dt\right\} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n\left(\int\limits_{t_a}^{t_b}V(x(t),t)dt\right)^n. \tag{4.64}$$

Wanneer de potentiaal zwak is, kunnen we op zoek gaan naar de laagste orde correcties te wijten aan deze potentiaal. De opeenvolgende termen in bovenstaande reeks worden dan opeenvolgend hoger in orde van de correctie. We schrijven

$$K_n(x_b,t_b|x_a,t_a) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int\limits_{\{x_a,t_a\}}^{\{x_b,t_b\}} Dx\ \left(\int\limits_{t_a}^{t_b}V(x(t'),t')dt'\right)^n\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_a}^{t_b}\frac{m}{2}\dot{x}^2dt\right\}. \tag{4.65}$$

Het is duidelijk dat

$$K(x_b,t_b|x_a,t_a) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n K_n(x_b,t_b|x_a,t_a). \tag{4.66}$$

Laten we enkele termen hiervan uitwerken. De nulde-orde term is de vrijedeeltjes propagator:

$$\begin{aligned} K_0(x_b,t_b|x_a,t_a) &= \int\limits_{\{x_a,t_a\}}^{\{x_b,t_b\}} Dx\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_a}^{t_b}\frac{m}{2}\dot{x}^2dt\right\} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b-t_a)}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m(x_b-x_a)^2}{2(t_b-t_a)}\right\}. \end{aligned} \tag{4.67}$$

In de eerste-orde term kunnen we de integraal met de padintegraal (dit is een N-voudige integraal in de limiet $N\to\infty$) omwisselen:

$$K_1(x_b,t_b|x_a,t_a) = \int\limits_{t_a}^{t_b}dt'\int\limits_{\{x_a,t_a\}}^{\{x_b,t_b\}} Dx\ V\left(x(t'),t'\right)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_a}^{t_b}\frac{m}{2}\dot{x}^2dt\right\}. \tag{4.68}$$

We kunnen hierin de samenstellingsregel gebruiken, om de paden op te splitsen in een deel van t_a tot t', en een deel van t' tot t_b.

$$\int\limits_{\{x_a,t_a\}}^{\{x_b,t_b\}} Dx \longrightarrow \int dx' \int\limits_{\{x_a,t_a\}}^{\{x',t'\}} Dx \int\limits_{\{x',t'\}}^{\{x_b,t_b\}} Dx. \tag{4.69}$$

Wat hier staat is dat de som over *alle* paden gelijk is aan de som over alle tussenpunten x', van de som over alle paden van start naar tussenpunt x', en daarna verder van tussenpunt x' naar eind. Hiermee is

$$K_1(x_b,t_b|x_a,t_a) = \int\limits_{t_a}^{t_b} dt' \int dx' V(x',t') \int\limits_{\{x_a,t_a\}}^{\{x',t'\}} Dx \int\limits_{\{x',t'\}}^{\{x_b,t_b\}} Dx \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2}\dot{x}^2 dt\right\}. \tag{4.70}$$

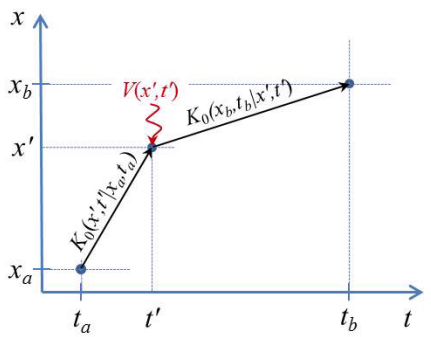
Op zijn beurt kunnen we de exponentiële opsplitsen:

$$\begin{aligned} & \int\limits_{\{x_a,t_a\}}^{\{x',t'\}} Dx \int\limits_{\{x',t'\}}^{\{x_b,t_b\}} Dx \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2}\dot{x}^2 dt\right\} \\ = & \int\limits_{\{x_a,t_a\}}^{\{x',t'\}} Dx \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_a}^{t'} \frac{m}{2}\dot{x}^2 dt\right\} \int\limits_{\{x',t'\}}^{\{x_b,t_b\}} Dx \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t'}^{t_b} \frac{m}{2}\dot{x}^2 dt\right\} \\ = & K_0(x',t'|x_a,t_a)\; K_0(x_b,t_b|x',t'). \end{aligned} \tag{4.71}$$

Hiermee is

$$K_1(x_b,t_b|x_a,t_a) = \int\limits_{t_a}^{t_b} dt' \int dx'\; K_0(x_b,t_b|x',t')V(x',t')K_0(x',t'|x_a,t_a), \tag{4.72}$$

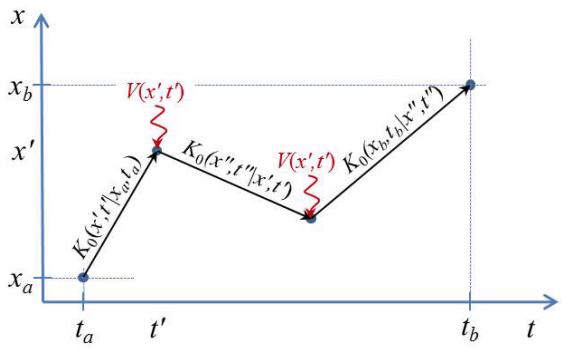
wat grafisch kan worden voorgesteld als:



Om de storing $V(x,t)$ tot op eerste orde in rekening te brengen moeten we dus

weerom sommeren over alle mogelijke mogelijkheden. De eerste orde betekent dat $V(x,t)$ slechts éénmaal mag gevoeld worden door het deeltje, wel moeten we sommeren over alle mogelijk plaatsen in ruimtetijd waar die ene interactie kan plaatsvinden. Om tot die plaats te geraken is er bovendien een amplitudo $K_0(x',t'|x_a,t_a)$, en om van daaruit naar de eindpositie te geraken moeten we nog met $K_0(x_b,t_b|x',t')$ vermenigvuldigen.

Het is dan ook duidelijk hoe deze reeks verder ontwikkelt. De tweede orde storingsterm wordt dan diagrammatisch:



De verhalen waarbij het deeltjes tweemaal en slechts tweemaal interageren zijn allemaal van dezelfde vorm: «het deeltje propageert eerst van startpunt naar x',t', als een vrije deeltje. Daar ervaart het de potentiaal. Dan gaat het verder wandelen, opnieuw als vrij deeltje, tot x'',t'', waar het een tweede maal de potentiaal ervaart. Ten slotte beweegt het verder naar het eindpunt als vrij deeltje». Hetgeen deze "tweede orde storing" verhalen over het leven van een deeltje onderscheidt zijn de posities $\{x',t'\}$ en $\{x'',t''\}$. Sommeren over alle mogelijke verhalen is dus sommeren over deze ruimtetijdpunten. We vinden

$$K_2(x_b,t_b|x_a,t_a) = \int_{t_a}^{t_b} dt' \int dx' \int_{t_a}^{t_b} dt'' \int dx'' \; K_0(x_b,t_b|x',t')$$
$$\times V(x',t')K_0(x'',t''|x',t')V(x'',t'')K_0(x'',t''|x_a,t_a). \tag{4.73}$$

De grafische voorstellingen, waarbij we aan elke pijl een propagator toekennen, en aan elk interactiepunt (vertex) een waarde V, noemt men "**Feynmandiagrammen**". Deze diagrammen zijn het resultaat van een reeksontwikkeling van de exponent die een van de termen in de actie bevat waar we op geen andere manier mee verder kunnen, en die we als storing beschouwen.

Hoofdstuk 5

Statistische fysica met padintegralen

As people are walking all the time, in the same spot, a path appears.
– John Locke.

5.1 Spectraalvoorstelling van de propagator

Veronderstel dat we de eigentoestanden $|\psi_n\rangle$ en overeenkomstige eigen-energieën E_n van de Hamiltoniaan $\hat{H}$ kennen. Dan kunnen we de eenheidsontbinding

$$\hat{1} = \sum_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n| \tag{5.1}$$

gebruiken in de uitdrukking (4.49) geldig voor tijdsonafhankelijke Hamiltonianen:

$$K(x,t|x_0,t_0) = \left\langle x \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right] \right| x_0 \right\rangle$$

voor de propagator. Er komt

$$\begin{aligned} K(x,t|x_0,t_0) &= \sum_n \left\langle x \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right] \right| \psi_n \right\rangle \langle\psi_n|x_0\rangle \\ &= \sum_n \langle x|\psi_n\rangle \langle\psi_n|x_0\rangle \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)\right]. \end{aligned} \tag{5.2}$$

En dus vinden we

$$\boxed{K(x,t|x_0,t_0) = \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x_0)e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}.} \tag{5.3}$$

Dit is een erg belangrijke formule in de context van statistische fysica, zoals we verderop zullen zien.

5.2 Kwantumstatistische fysica

De filosofie achter het combineren van statistische fysica en kwantummechanica ga ik opdelen in vier stappen (er zijn vele mogelijke filosofiën hierover mogelijk, ik volg de courantste):

1. Wanneer wij vermetele stervelingen een kwantummechanisch probleem oplossen, gaan we eigenlijk de wereld in twee opdelen: enerzijds het systeem waarin we geïnteresseerd zijn, en anderzijds de rest van de wereld.

2. Kwantummechanica leert ons dat de toestand van het systeem een vector is in een (soms oneindig-dimensionale) vectorruimte. Die vectorruimte wordt opgespannen door een set orthogonale basistoestanden; je kan je basis kiezen maar een van de nuttigste keuzes is ongetwijfeld de basis van eigentoestanden van de Hamiltoniaan. Deze energie-eigenkets zullen we aanduiden met $|\psi_n\rangle$, de overeenkomstige energie is E_n.

3. De "rest van de wereld" beschouwen we als het reservoir waarmee het systeem in contact staat, ten gevolge waarvan de toestand waarin het systeem zich bevindt kan fluctueren. Door de "rest van de wereld" weg te werken verliezen we dus informatie over welke "pure" toestand het te onderzoeken systeem zich bevindt. Dit wordt beschreven via een statistische kansverdeling p_n die de kans geeft om het systeem in een eigentoestand $|\psi_n\rangle$ te vinden, waarbij de $|\psi_n\rangle$'s een orthonormale basis vormen.

4. De fundamentele aanname van de statistische fysica is dat in thermisch evenwicht elke toestand die dezelfde energie heeft even waarschijnlijk is, en dat de waarschijnlijkheid p_n om zo'n toestand te bevolken evenredig is met de Boltzman factor $\exp\{-E_n/(k_BT)\}$. Onze eerdere bewering dat het de energie-eigenkets zijn die een nuttige basis blijken te zijn, heeft natuurlijk met deze fundamentele aanname van de statistische fysica te maken.

Dit brengt ons tot de constructie van de dichtheidsmatrix. Dit is een centraal concept voor kwantumstatistiek. Het is een operator die we kunnen schrijven als

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n| \tag{5.4}$$

met p_n de statistische kans (evenredig aan $\exp\{-E_n/(k_BT)\}$) dat $|\psi_n\rangle$ optreedt. De normering voor de kansverdeling vinden we door het spoor te nemen van de dichtheidsmatrix

$$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}] = \sum_m \langle\psi_m| \hat{\rho} |\psi_m\rangle = \sum_{m,n} p_n \delta_{mn} = \sum_n p_n. \tag{5.5}$$

Je kent de naam voor die normering: het is de toestandssom

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}] = \sum_n \exp\{-E_n/(k_BT)\}. \tag{5.6}$$

Eens je de toestandssom hebt, kan je natuurlijk allerlei thermodynamische grootheden over je systeem uitrekenen, bijvoorbeeld de vrije energie

$$F(T,V) = -k_B T \ln(\mathcal{Z}), \tag{5.7}$$

of de interne energie

$$U(S,V) = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln(\mathcal{Z}). \tag{5.8}$$

De verwachtingswaarde van een operator $\hat{A}$ kunnen we ook vinden door het spoor te nemen,

$$\begin{aligned} \left\langle\left\langle \hat{A} \right\rangle\right\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \operatorname{Tr}[\hat{\rho}\hat{A}] \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_m \langle\psi_m| \hat{\rho}\hat{A} |\psi_m\rangle \\ &= \sum_n p_n \langle\psi_n| \hat{A} |\psi_n\rangle . \end{aligned} \tag{5.9}$$

Dit lijkt een triviale formule: in de toestand $|\psi_n\rangle$ heeft de operator $\hat{A}$ een verwachtingswaarde $\left\langle \hat{A} \right\rangle = \langle\psi_n| \hat{A} |\psi_n\rangle$, maar we weten niet precies in welke toestand het systeem is, enkel de kansverdeling, dus moeten we ook hierover nog uitmiddelen. Het is belangrijk te beseffen dat er *twee* bronnen van onbepaaldheid zijn: er is de kwantummechanische uitmiddeling $\langle\psi_n| \hat{A} |\psi_n\rangle$ over de golffunctie enerzijds, en dan de statistische (thermische) uitmiddeling over de statistische kansverdeling anderzijds. Daarom zetten we dubbele haakjes rond deze "dubbele" verwachtingswaarde : $\left\langle\left\langle \hat{A} \right\rangle\right\rangle$. Een en ander over deze dubbele uitmiddeling wordt duidelijk gemaakt in een voorbeeldje, dat ik naar appendix A geschoven heb omdat het nogal lang werd.

De dichtheidsmatrix voor een systeem in thermisch evenwicht is diagonaal in de basis van energie-eigentoestanden, maar hoe ziet die dichtheidsmatrix er uit in de positie-basis? We noteren

$$\rho_\beta(x;y) = \langle x| \hat{\rho} |y\rangle . \tag{5.10}$$

voor het matrixelement tussen $\langle x|$ en $|y\rangle$, bij een temperatuur $T = 1/(k_B\beta)$. Het symbool β is dus een notatie voor de inverse temperatuur, $\beta = 1/(k_B T)$. Hierin gebruiken we uitdrukking (5.4) voor de dichtheidsmatrix om te komen tot

$$\begin{aligned} \rho_\beta(x;y) &= \langle x| \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|y\rangle \\ &= \sum_n p_n \psi_n(x) \psi_n^*(y). \end{aligned} \tag{5.11}$$

Vullen we hier ten slotte $p_n = \exp\{-E_n/(k_B T)\}$ in, dan vinden we voor de dichtheidsmatrix

$$\rho_\beta(x;y) = \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(y)e^{-\beta E_n}. \tag{5.12}$$

Ken je de energie-eigentoestanden en de energie-eigenwaarden, dan levert deze formule je een manier om de dichtheidsmatrix te berekenen. De toestandssom wordt nog steeds

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}] = \int dx \, \langle x \,|\hat{\rho}|\, x\rangle = \int dx \; \rho_\beta(x;x), \tag{5.13}$$

wat zich laat uitwerken tot

$$\mathcal{Z} = \sum_n \int dx \, |\psi_n(x)|^2 \, e^{-\beta E_n} = \sum_n e^{-\beta E_n}. \tag{5.14}$$

Hierin hebben we de orthonormaliteit van de basis gebruikt. Kwantumstatistische verwachtingswaardes berekenen we hiermee als volgt

$$\begin{aligned} \left\langle\left\langle \hat{A} \right\rangle\right\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int dx \left\langle x \left| \hat{\rho}\hat{A} \right| x \right\rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int dx \int dy \; \langle x \,|\hat{\rho}|\, y\rangle \left\langle y \left| \hat{A} \right| x \right\rangle. \end{aligned} \tag{5.15}$$

Als $\hat{A}$ diagonaal is in de positieruimte, dan komt er

$$\begin{aligned} \left\langle\left\langle \hat{A} \right\rangle\right\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int dx \; \rho_\beta(x;x) A(x) \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_n e^{-\beta E_n} \int dx \; \psi_n^*(x) A(x) \psi_n(x). \end{aligned} \tag{5.16}$$

Hieraan zien we dat deze dichtheidsmatrices een volledige beschrijving geven van een kwantumsysteem in thermisch evenwicht.

5.3 Dichtheidsmatrix als imaginaire-tijd propagator

Nu leggen we de resultaten van de twee vorige secties naast elkaar, in het bijzonder de formules (5.3) en (5.12). Hieraan zien we dat

$$\begin{aligned} \rho_\beta(x;y) &= \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(y) \exp\{-\beta E_n\} \\ &= \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(y) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(-i\hbar\beta)E_n\right\} \\ &\Rightarrow \boxed{\rho_\beta(x;y) = K(x, -i\hbar\beta|y, 0).} \end{aligned} \tag{5.17}$$

Hieruit volgt dat we de dichtheidsmatrix kunnen uitrekenen door een analytische voortzetting van de propagator in het complexe (tijds)vlak!

Zo kunnen we de toestandssom uitrekenen via de padintegraalpropagator:

$$\mathcal{Z} = \int dx K(x, -i\hbar\beta|x, 0). \tag{5.18}$$

De padintegraalpropagator, in imaginaire tijden $-i\tau$, geeft ons dus de thermodynamica van het kwantumsysteem, in thermisch evenwicht met een reservoir met temperatuur $T = \hbar/(k_B\tau)$.

We hebben nu ook een recept om uit de propagator de grondtoestandsenergie te distilleren. Immers, in de limiet $\beta \to \infty$ (temperatuur$\to 0$) blijft enkel de grondtoestand bevolkt, zodat

$$\begin{aligned} \lim_{\beta\to\infty} \rho_\beta(x;y) &= \lim_{\beta\to\infty} \left(e^{-\beta E_0} \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(y) \exp\left\{-\beta\left(E_n - E_0\right)\right\} \right) \\ &\approx e^{-\beta E_0} \psi_0(x)\psi_0^*(y). \end{aligned} \tag{5.19}$$

Aangezien $E_n - E_0 > 0$ kunnen alle termen met $n \neq 0$ verwaarloosd worden in de limiet $\beta \to \infty$. Dus, de regel om de grondtoestandsenergie te extraheren is:

$$E_0 = -\lim_{\beta\to\infty} \left\{ \frac{1}{\beta} \ln \left[\int dx\ K(x, -i\hbar\beta|x, 0) \right] \right\}. \tag{5.20}$$

Aangezien $\psi_0(x)\psi_0^*(y)$ toch niet afhangt van β, zien we dat voor alle x, y waarvoor $\psi_0(x) \neq 0 \neq \psi_0(y)$ zelfs geldt dat

$$E_0 = -\lim_{\beta\to\infty} \left\{ \frac{1}{\beta} \ln \left[K(x, -i\hbar\beta|x, 0) \right] \right\}. \tag{5.21}$$

Eens E_0 bepaald is, kan de golffunctie voor de grondtoestand zelf bepaald worden aan de hand van

$$\Psi_0(x) = \lim_{\beta\to\infty} \left[e^{\beta E_0} K(x, -i\hbar\beta|y, 0) \right], \tag{5.22}$$

voor vaste y waarvoor $0 \neq \psi_0(y)$. Deze moet achteraf nog genormeerd worden. Als je alleen in de modulus kwadraat geïnteresseerd bent is het eenvoudiger

$$|\psi_0(x)|^2 = \lim_{\beta\to\infty} \left[e^{\beta E_0} K(x, -i\hbar\beta|x, 0) \right]. \tag{5.23}$$

Soms is het moeilijk om deze formules numeriek te implementeren omdat de limiet voor grote β traag convergeert, maar het blijft het proberen waard.

5.4 Harmonische oscillator opnieuw als voorbeeld

Laten we dit eens bekijken voor ons standaardvoorbeeldje van de harmonische oscillator. Daarvoor hadden we de propagator netjes uitgerekend met de WKB methode,

$$K_{HO}(x_b,t|x_a,0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega t)}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2}\frac{(x_a^2+x_b^2)\cos(\omega t)-2x_ax_b}{\sin(\omega t)}\right\}. \tag{5.24}$$

Eerst gaan we dit analytisch uitbreiden naar imaginaire tijden, $t=-i\hbar\beta$. Er komt, met

$$\sin\left[\omega(-i\hbar\beta)\right] = -i\sinh\left(\hbar\omega\beta\right) \tag{5.25}$$

$$\cos[\omega(-i\hbar\beta)] = \cosh(\hbar\omega\beta), \tag{5.26}$$

als resultaat

$$K_{HO}(x_b,-i\hbar\beta|x_a,0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh\left(\hbar\omega\beta\right)}} \tag{5.27}$$

$$\times\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}\frac{(x_a^2+x_b^2)\cosh(\hbar\omega\beta)-2x_ax_b}{\sinh\left(\hbar\omega\beta\right)}\right\}. \tag{5.28}$$

Dit is een volledig reële functie. Het is gelijk aan de dichtheidmatrix $\rho_\beta(x;y)$ voor de harmonische oscillator.

We kunnen hiermee een heel aantal thermodynamische eigenschappen van de kwantum harmonische oscillator uitwerken. Vooreerst gaan we de toestandssom voor de harmonische oscillator bepalen:

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{HO} &= \int dx\ K_{HO}(x,-i\hbar\beta|x,0)\\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh\left(\hbar\omega\beta\right)}}\int dx\ \exp\left\{-\frac{\cosh(\hbar\omega\beta)-1}{\sinh\left(\hbar\omega\beta\right)}\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right\}.\end{aligned} \tag{5.29}$$

In de voorfactor kunnen we nog wat vereenvoudigen aangezien

$$\frac{\cosh(\hbar\omega\beta)-1}{\sinh\left(\hbar\omega\beta\right)} = \tanh(\hbar\omega\beta/2). \tag{5.30}$$

De integraal is een gaussische integraal, zodat

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{HO} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh\left(\hbar\omega\beta\right)}}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega\tanh(\hbar\omega\beta/2)}}\\ &= \frac{1}{2\sinh(\hbar\omega\beta/2)}.\end{aligned} \tag{5.31}$$

De vrije energie als functie van de temperatuur is dan

$$F = k_BT\ln\left[2\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right)\right], \tag{5.32}$$

en de interne energie

$$U = \frac{\hbar\omega}{2}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right). \tag{5.33}$$

Dit zijn bekende resultaten voor de harmonische oscillator, die we hier terugvinden aan de hand van de propagator. Nemen we van F of van U de limiet voor $T \to 0$, dan vinden we in beide gevallen $\hbar\omega/2$, zoals het hoort voor de grondtoestandsenergie van de harmonische oscillator. De grondtoestandsgolffunctie is dan

$$|\psi_0(x)|^2 = \lim_{\beta\to\infty}\left[e^{\beta\hbar\omega/2}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\hbar\omega\beta)}}\exp\left\{-\tanh(\hbar\omega\beta/2)\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right\}\right]. \tag{5.34}$$

Hierin gaat $\tanh(\hbar\omega\beta/2) \to 1$, en is

$$\lim_{\beta\to\infty}\frac{e^{\beta\hbar\omega/2}}{\sqrt{2\sinh(\hbar\omega\beta)}} = \lim_{\beta\to\infty}\frac{e^{\beta\hbar\omega/2}}{\sqrt{e^{\hbar\omega\beta}-e^{-\hbar\omega\beta}}} = 1, \tag{5.35}$$

zodat

$$|\psi_0(x)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right\}. \tag{5.36}$$

Aangezien de grondtoestand geen nodes heeft en hier niet ontaard is, kunnen we die reëel kiezen, en is

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\}. \tag{5.37}$$

Dit is inderdaad de grondtoestand van de harmonische oscillator, zonder dat we er ook maar 1 Schrödingervergelijking voor hebben moeten oplossen. Enkel het klassieke pad gaat als input in WKB, remember?

De cornucopia aan resultaten die we uit de link met de statistische fysica halen is nog lang niet uitgeput. We kunnen ons bijvoorbeeld afvragen wat de typische amplitude van de oscillatie, is, i.e. de verwachtingswaarde van $\hat{x}^2$. Daartoe moeten we een spoor uitrekenen,

$$\langle\langle\hat{x}^2\rangle\rangle = \int dx\; x^2\rho_\beta(x;x). \tag{5.38}$$

Dit is gegeven door

$$\langle\langle\hat{x}^2\rangle\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_{HO}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\hbar\omega\beta)}}\int dx\; x^2\exp\left\{-\tanh(\hbar\omega\beta/2)\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right\}. \tag{5.39}$$

Dit is een integraal van de vorm $\int u^2e^{-au^2}du = (1/2)\sqrt{\pi/a^3}$, waarmee

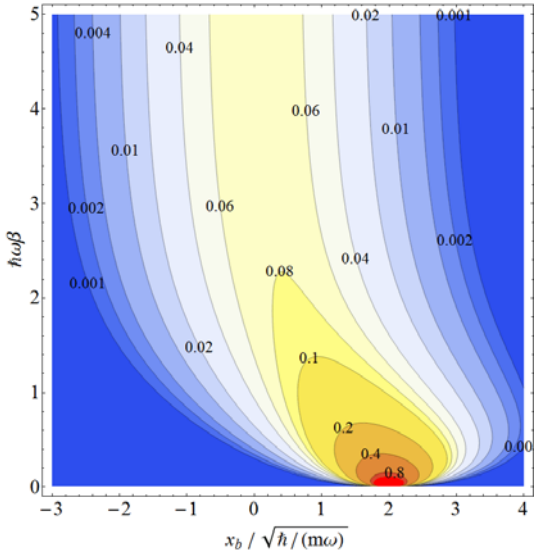
$$\begin{aligned}\langle\langle\hat{x}^2\rangle\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}_{HO}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\hbar\omega\beta)}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega\tanh(\hbar\omega\beta/2)}\right)^{3/2}\\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_{HO}}\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{\coth(\hbar\omega\beta/2)}{2\sinh(\hbar\omega\beta/2)}.\end{aligned} \tag{5.40}$$

Invullen van $\mathcal{Z}_{HO}$ geeft

$$\langle\langle \hat{x}^2 \rangle\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right). \tag{5.41}$$

Voor $T \to 0$ gaat dit naar de breedte van de grondtoestand, maar naarmate de temperatuur stijgt groeit de breedte continu. Het is niet dat we naar de eerste geëxciteerde toestand gaan (en het systeem in een pure toestand zit), wat er gebeurt is dat er een statistisch ensemble is waarin verschillende toestanden bevolkt zijn, en de breedte statistisch uitmiddelt tot bovenstaand resultaat. Met andere woorden, dit is niet enkel een verwachtingswaarde over een kwantumtoestand, maar ook nog een gemiddelde over een statistisch ensemble aan toestanden (vandaar de dubbele haakjes).

We zien het resultaat voor de golffunctie ook tevoorschijn komen in een contourplot van $e^{\beta\hbar\omega/2} K_{HO}(x_b, -i\hbar\beta|x_a, 0)$ als functie van x_b, β, voor vaste x_a. In lengte-eenheden $\hbar/m\omega$ en temperatuurs-eenheden $\hbar\omega/k_B$ ziet dat er als volgt uit:



Voor deze figuur kozen we $x_a = 2\sqrt{\hbar/(m\omega)}$. Merk op dat bij lage temperatuur (grote β) het resultaat onafhankelijk van β en x_a wordt. Als we langs een lijn bij vaste β (voor $\beta = 5$ bijvoorbeeld) het resultaat bekijken, komt er een gaussische golffunctie rond nul tevoorschijn, cf. vergelijking (5.37).

5.5 Padintegraal voor de dichtheidsmatrix

In de voorgaande secties zijn we er van uit gegaan dat de padintegraal propagator reeds was uitgerekend in reële tijden, $K(x_b, t|x_a, 0)$, en dat we die dan analytisch kunnen voortzetten in het complexe vlak door $-i\hbar\beta$ te substitueren

voor t. We kunnen echter ook de paden in imaginaire tijden rechtstreeks sommeren. We starten van de actiefunctionaal

$$S[x(t)] = \int_0^T dt \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{dx(t)}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right]. \tag{5.42}$$

Hierin willen we overgaan op een nieuwe integratievariabele $\tau = it$. Het pad $x(t)$ wordt dan een pad $x(t) = x(-i\tau) = \overline{x}(\tau)$ in imaginaire tijd:

$$S[\overline{x}(\tau)] = \int_0^T dt \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{d\overline{x}(\tau)}{dt} \right)^2 - V(\overline{x}(\tau)) \right]. \tag{5.43}$$

Het veranderen van de integratievariabele gaat gepaard met een verandering van integratiemaat $dt = -id\tau$, en van de integratiegrenzen die nu lopen van 0 tot $\hbar\beta = iT$. We definiëren het symbool β in de bovengrens niet zomaar, het komt overeen met de inverse temperatuur uit de vorige secties aangezien $T = -i\hbar\beta$. Er komt

$$S[\overline{x}(\tau)] = -i \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{d\overline{x}(\tau)}{d(-i\tau)} \right)^2 - V(\overline{x}(\tau)) \right] \tag{5.44}$$

$$= +i \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{d\overline{x}(\tau)}{d\tau} \right)^2 + V(\overline{x}(\tau)) \right]. \tag{5.45}$$

Het gewicht van een pad $x(t)$ wordt in deze imaginaire tijdsvariabele een zuiver reëel getal:

$$\exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right\} = \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S[\overline{x}(\tau)] \right\}$$

$$= \exp\left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{d\overline{x}(\tau)}{d\tau} \right)^2 + V(\overline{x}(\tau)) \right] \right\}. \tag{5.46}$$

De padintegraal zelf wordt dan een som over alle mogelijke functies $\overline{x}(\tau)$ van 0 tot $\hbar\beta$. En aangezien $T = -i\hbar\beta$ (zie hierboven), is dit de gezochte imaginaire-tijd propagator $K(x_b, -i\hbar\beta | x_a, 0)$:

$$K(x_b, T | x_a, 0) = \int \mathcal{D}x \ \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{dx(t)}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right] \right\} \tag{5.47}$$

$$\Rightarrow K(x_b, -i\hbar\beta | x_a, 0) = \int_{\{x_a, 0\}}^{\{x_b, \hbar\beta\}} \mathcal{D}\overline{x} \exp\left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{d\overline{x}(\tau)}{d\tau} \right)^2 + V(\overline{x}(\tau)) \right] \right\}. \tag{5.48}$$

Hiermee kan bvb. de partitiefunctie (5.18) worden uitgedrukt als padintegraal:

$$\mathcal{Z} = \int dx_a \int_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}\overline{x} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{1}{2}m\left(\frac{d\overline{x}(\tau)}{d\tau}\right)^2 + V(\overline{x}(\tau))\right]\right\}, \quad (5.49)$$

ook te noteren als

$$\boxed{\mathcal{Z} = \int dx_a \int_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}\overline{x} \exp\left\{-S[\bar{x}(\tau)]/\hbar\right\}} \quad (5.50)$$

Ook de verwachtingswaarde van een pad-afhankelijke functionaal $A[\bar{x}(\tau)]$ kan je dan uitrekenen,

$$\boxed{\langle\langle A[\bar{x}(\tau)]\rangle\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}}\int dx_a \int_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}\overline{x} A[\bar{x}(\tau)] \exp\left\{-S[\bar{x}(\tau)]/\hbar\right\}}. \quad (5.51)$$

Dit is de padintegraal-versie van $\mathrm{Tr}[A\rho]$, waarbij de trace hier dus de betekenis heeft van een de som over alle paden met hetzelfde begin-als eindpunt.

Om opnieuw te zien wat het betekent te sommeren over alle paden, gaan we weerom time-slicen, en het pad $\overline{x}(\tau)$ van 0 tot $\hbar\beta$ indelen in stukjes $\delta\tau = (\hbar\beta)/N$. We kunnen opnieuw in stroboscooplicht het pad karakteriseren door de functiewaarde op deze imaginaire-tijdstippen vast te leggen, $\{\overline{x}_0, \overline{x}_1, ..., \overline{x}_N\}$. Integreren we over alle mogelijke $(N+1)$-tupels, dan hebben we over alle mogelijke paden gesommeerd in de N-stroboscoopflitsen benadering. Aangezien $K(x_b, -i\hbar\beta|x_a, 0) = \rho_\beta(x;y)$ hebben we dus een padintegraal-formule voor de dichtheidsmatrix:

$$\begin{aligned}\rho_\beta(x;y) &= \lim_{N\to\infty} \mathcal{A}^N \int d\bar{x}_0 .. \int d\bar{x}_N\ \delta(\bar{x}_0 - x_a)\delta(\bar{x}_N - x_b) \\ &\quad \times \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\sum_{j=0}^{N}\left[\frac{m}{2}\frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\delta\tau} + V(x_j)\delta\tau\right]\right\}. \quad (5.52)\end{aligned}$$

Het gewicht $\mathcal{A}$ is opnieuw een dichtheid aan echte paden, in de stroboscooppadenruimte, en kan weerom gevonden worden door de normerings-eis op te leggen. Er komt

$$\begin{aligned}\rho_\beta(x;y) &= \lim_{N\to\infty} \int d\bar{x}_0 .. \int d\bar{x}_N\ \delta(\bar{x}_0 - x_a)\delta(\bar{x}_N - x_b) \\ &\quad \times \prod_{j=1}^{N}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\delta\tau}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\delta\tau} + V(x_j)\delta\tau\right]\right\} \quad (5.53)\end{aligned}$$

Het verschil met de vorige formule is niet enkel het reëel zijn van de gewichten, er is ook een tekenverandering: de potentiële energie wordt bij de kinetische geteld, dit komt omdat de laatste een minteken heeft geërfd uit het kwadraat van de tijdsafgeleide voor de snelheid. Eigenlijk dient opgemerkt te worden dat de padintegraal met deze reële gewichten reeds door Wiener was vooropgesteld, en het is ook Wiener die aangetoond heeft dat de integratiemaat wiskundig consistent is met maattheorie. Voor de complexe gewichten die Feynman voorstelt om de kwantummechanica te beschrijven, heeft het tot de jaren '90 geduurd vooraleer men kon aantonen dat de integratiemaat ook daar wiskundig consistent is met maattheorie.

Ook op bovenstaande formule kunnen we de WKB benadering toepassen. Nu is het niet meer door destructieve interferentie met naburige paden dat "slechte" paden niet meetellen, maar krijgen de slechte paden een exponentiëel klein gewicht. In beide gevallen zijn het de paden waarvoor $\delta S = 0$ die opnieuw de belangrijkste bijdrage leveren, en kan er geëxpandeerd worden in kleine fluctuaties omheen die "klassieke" paden.

Opmerking – Ten slotte kijken we opnieuw naar het geval met de vectorpotentiaal. Herinner u dat we dan met het time-slicen zorg moesten dragen in welk punt $\in [x_{j-1}, x_j]$ we de vectorpotentiaal evualeren voor een de stap van t_{j-1} naar t_j. Dat blijft zo, maar nu komt er een bijkomende moeilijkheid: het gewicht van de paden blijft een complexe functie, ook voor de dichtheidsmatrix. Herinner u de Lagrangiaan (4.17) en de bijbehorende actie voor een geladen deeltje in een vectorpotentiaal,

$$S[\mathbf{x}(t)] = \int_0^T dt \left[\frac{m}{2}\dot{\mathbf{x}}^2 + q\dot{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x}) - V(\mathbf{x})\right].$$

Wanneer we hierin eerst de functie $\bar{\mathbf{x}}(\tau) = \mathbf{x}(-i\tau) = \mathbf{x}(t)$ met $t = i\tau$ invoeren, komt er

$$S[\bar{\mathbf{x}}(\tau)] = \int_0^T dt \left[\frac{m}{2}\left(\frac{d\bar{\mathbf{x}}(\tau)}{dt}\right)^2 + q\frac{d\bar{\mathbf{x}}(\tau)}{dt}\cdot\mathbf{A}(\bar{\mathbf{x}}(\tau)) - V(\bar{\mathbf{x}}(\tau))\right]. \tag{5.54}$$

Dan veranderen we van integratieveranderlijke:

$$S[\bar{\mathbf{x}}(\tau)] = -i\int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{m}{2}\left(\frac{d\bar{\mathbf{x}}(\tau)}{-id\tau}\right)^2 + q\frac{d\bar{\mathbf{x}}(\tau)}{-id\tau}\cdot\mathbf{A}(\bar{\mathbf{x}}(\tau)) - V(\bar{\mathbf{x}}(\tau))\right]. \tag{5.55}$$

Het gewicht van de paden wordt nu

$$\begin{aligned}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S[\bar{\mathbf{x}}(\tau)]\right\} &= \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{m}{2}\left(\frac{d\bar{\mathbf{x}}(\tau)}{d\tau}\right)^2 + V(\bar{\mathbf{x}}(\tau))\right.\right.\\ &\qquad \left.\left. + iq\frac{d\bar{\mathbf{x}}(\tau)}{d\tau}\cdot\mathbf{A}(\bar{\mathbf{x}}(\tau))\right]\right\}\end{aligned} \tag{5.56}$$

Dit is niet meer reëel, het blijft een complex gewicht door de term met de vectorpotentiaal. Op zich is dit niet noodzakelijk een probleem, maar om de WKB methode toe te passen moet je dan apart naar de extrema van het reële en het imaginaire deel kijken, en als die niet bijeenvallen wordt de methode onbruikbaar. Ook de variatierekening die we in het volgende hoofdstuk uit de doeken gaan doen, lukt daarom niet meer. Dit probleem werd opgelost door Devreese en Brosens[1] in het begin van de jaren '90.

[1] J.T. Devreese, F. Brosens, Physical Review B **45**, 6459–6478 (1992).

Hoofdstuk 6

Variatierekening met padintegralen

> All paths are the same, leading nowhere. Therefore, pick a path with heart! – Carlos Castaneda.

6.1 Variatierekening

Het principe van minste actie of het principe van Fermat zijn voorbeelden van minimum-principes. Er zijn er nog veel meer, en als inleiding zien we een voorbeeldje uit de veldentheorie, elektrostatica meer bepaald. Om het elektrostatisch veld ϕ te vinden dat met een bepaalde ladingsverdeling ρ overeenkomt, moet je de Poisson vergelijking oplossen:

$$\nabla\phi = \rho/\varepsilon. \tag{6.1}$$

Een equivalente manier om hetzelfde uit te drukken is dit: bereken de volume-integraal

$$U^* = \frac{\varepsilon}{2}\int\left[(\nabla\phi)^2 - \rho\phi\right] d\mathbf{r}. \tag{6.2}$$

Deze functionaal $U^*[\phi]$ is minimaal voor de correcte potentiaal $\phi(\mathbf{r})$.Nu hebben we een minimum-principe, en we kunnen de equivalentie aantonen door tewerk te gaan als voor de Euler-Lagrange bewegingsvergelijkingen, en dat veld ϕ_0 te zoeken waarvoor de variatie δU^* nul is. Met andere woorden, als we bij het veld een klein fluctuatieveldje η optellen,

$$\phi = \phi_0 + \eta \tag{6.3}$$

dan wordt de functionaal

$$\begin{aligned} U^*[\phi] &= \int\left[\frac{\varepsilon}{2}(\nabla\phi_0)^2 + \varepsilon(\nabla\phi_0)\cdot(\nabla\eta) + \frac{\varepsilon}{2}(\nabla\phi_0)^2 - \rho\phi_0 - \rho\eta\right] d\mathbf{r} \\ &= U^*[\phi_0] + \int\left[\varepsilon(\nabla\phi_0)\cdot(\nabla\eta) - \rho\eta\right] d\mathbf{r} + \mathcal{O}(\eta^2). \end{aligned} \tag{6.4}$$

Hieruit halen we de variatie

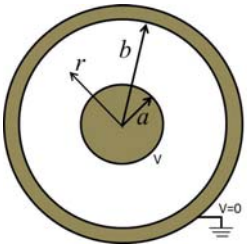
$$\begin{aligned}\delta U^* &= \int \left[\varepsilon\left(\nabla\phi_0\right)\cdot\left(\nabla\eta\right) - \rho\eta\right] d\mathbf{r} \\ &= \varepsilon\left(\nabla\phi_0\right)\eta\big|_{\text{rand}} - \int \left[\varepsilon\left(\nabla^2\phi_0\right) + \rho\right]\eta d\mathbf{r}. \end{aligned} \tag{6.5}$$

We hebben, hoofdstuk 1 indachtig, de afgeleide van η weggewerkt via partiële integratie. Wanneer de randterm wegvalt, zal de variatie van U^* nul zijn enkel en alleen indien het integrand $\varepsilon\left(\nabla^2\phi_0\right) + \rho$ nul is, zodat we de Poisson vergelijking bekomen. De fysische betekenis van de functionaal die we minimaal moeten maken, herken je misschien beter in het geval dat het volume V waarover we integreren, geen ladingen bevat. Dan is

$$U^* = \int \frac{\varepsilon}{2}\left(\nabla\phi\right)^2 d\mathbf{r} = \int \frac{\varepsilon E^2}{2} d\mathbf{r}$$

met $\mathbf{E} = \boldsymbol{\nabla}\phi$ het elektrisch veld. Dus is U^* de elektrostatische energie, en het is die die we minimaal willen.

Met zo'n minimum-principe kunnen we méér doen dan met de differentiaalvergelijking: we kunnen resultaten bekomen ook in het geval wanneer geen exacte oplossing voorhanden is. Stel dat we het veld willen kennen tussen twee cilindrische oppervlakken (bvb in een condensator of een coax-kabel):



De buitenkant van de kabel is geaard, de binnenste draad staat op een potentiaal V. De vraag is hoe de potentiaal $\phi(r)$ verloopt tussen de twee oppervlakken, voor $a < r < b$. Nu kan je voor dat simpel voorbeeld de Poisson vergelijking exact oplossen, maar stel dat we dat niet kunnen. Dan kunnen we toch een gokje placeren, en bijvoorbeeld de potentiaal lineair laten toenemen van buiten naar binnen:

$$\phi_{\text{gok 1}} = V\left(1 - \frac{r-a}{b-a}\right) \tag{6.6}$$

Plaatsen we dit in de functionaal U^* dan vinden we in cilindercoordinaten

$$\begin{aligned} U^*[\phi_{\text{gok 1}}] &= 2\pi\int_a^b \frac{\varepsilon}{2}\left(\nabla\phi\right)^2 r dr \\ &= \pi\varepsilon V^2 \int_a^b \left(-\frac{1}{b-a}\right)^2 r dr \\ &= \frac{\pi\varepsilon V^2}{2}\frac{b+a}{b-a} \end{aligned} \tag{6.7}$$

Het minimum zoeken van U^* is equivalent als het minimum zoeken voor de capacitantie C, aangezien $U^* = (1/2)CV^2$ en

$$\frac{U^*[\phi_{\text{gok 1}}]}{\pi\varepsilon V^2} = \frac{C_{\text{gok 1}}}{2\pi\varepsilon}.$$

Hiermee schrijven we het resultaat als

$$\frac{C_{\text{gok 1}}}{2\pi\varepsilon} = \frac{1}{2}\frac{b+a}{b-a}. \tag{6.8}$$

Dit antwoord is verschillend van het exacte antwoord $C/(2\pi\varepsilon) = \ln(b/a)$, maar het is niet zo slecht, zeker voor kleine waarden van b/a. Het minimum-principe voor U^* is hier heruitgedrukt als een minimum-principe voor de capacitantie.

Nu kunnen een verbeterde gok proberen: beter dan de lineaire interpolatie is een parabolische, maar dan hebben we nog wel een extra parameter:

$$\phi_{\text{gok 2}} = V\left[1 + \alpha\frac{r-a}{b-a} - (1+\alpha)\left(\frac{r-a}{b-a}\right)^2\right] \tag{6.9}$$

Enig rekenwerk leert dan dat

$$U^*[\phi_{\text{gok 2}}] = 2\pi\varepsilon V^2\frac{a}{b-a}\left[\frac{b}{a}\left(\frac{\alpha^2}{6} + \frac{2\alpha}{3} + 1\right) + \frac{\alpha^2}{6} + \frac{1}{3}\right] \tag{6.10}$$

Nu kan je hierin nog α kiezen. We weten dat de juiste energie kleiner is dan eender wat je uitrekent: elke keuze van α geeft een te grote energie (en te grote capacitantie). Maar als je blijft spelen met α en je bekomt de kleinste waarde die je kan, dan is die kleinste waarde dus ook het dichtst bij de waarheid. Dus, wat je nu moet doen is die waarde van α kiezen die de minimale U^* geeft. Dit vinden we via $\partial U^*/\partial\alpha = 0$ en er komt $\alpha = -2b/(b+a)$. Als we dat resultaat terug in de energie of capacitantie pluggen, dan vinden we als scherpste bovengrens

$$\frac{C_{\text{gok 2}}}{2\pi\varepsilon} = \frac{b^2 + 4ab + a^2}{3(b^2 - a^2)} \tag{6.11}$$

Laten we de verschillende gokken vergelijken voor enkele waarden van b/a:

$\frac{b}{a}$	$\frac{C_{\text{gok 1}}}{2\pi\varepsilon}$	$\frac{C_{\text{gok 2}}}{2\pi\varepsilon}$	$\frac{C_{\text{exact}}}{2\pi\varepsilon}$
1.1	10.500000	10.492065	10.492070
1.5	2.5000	2.4667	2.4662
2	1.500	1.444	1.442
4	0.833	0.733	0.721
10	0.612	0.475	0.434
100	0.510	0.346	0.267

We zien dat de benaderingen beter worden naarmate b/a dichter bij 1 komt, voor een heel dunne draad in een heel grote buitencilinder is het antwoord

minder goed. Maar het is opvallend hoe goed je al met een simpele lineaire of parabolische interpolatie geraakt. Daarin zit het praktisch nut van minimum-principes: ook voor situaties waarin je geen exact antwoord kent, kan je een gokje maken gebaseerd op fysische intuitie plus wat aanpasbare parameters. Zo bekom je uitstekende numerieke resultaten voor probleem die anders onoplosbaar zijn. Dit willen we in dit hoofdstuk veralgemenen naar padintegralen.

6.2 Jensen-Feynman ongelijkheid

Stel dat we de vrije energie F van een systeem willen uitrekenen, bij een bepaalde temperatuur T (of $\beta = 1/(k_B T)$). Dit probleem kan in termen van padintegralen worden uitdrukt door te starten met de partitiefunctie

$$\mathcal{Z} = e^{-\beta F} \tag{6.12}$$

die zoals we in het vorige hoofdstuk zagen, kan worden uitgedrukt als een padintegraal

$$\mathcal{Z} = \int dx_a \int_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}x \exp\left\{-\frac{S[x(\tau)]}{\hbar}\right\} \tag{6.13}$$

in imaginaire tijden, cf. uitdrukking (5.49). Dit zegt ons dat de partitiesom de som is over alle paden $x(\tau)$ met dezelfde begin-en eindpunt, waarbij elk pad gewogen wordt met $e^{-S[x(\tau)]/\hbar}$. Wanneer $S[x(\tau)]$ reëel is, dan kunnen we hieruit een variatieprincipe puren[1].

Laten we veronderstellen dat er een ander actiefunctionaal $S'[x(\tau)]$ kan gevonden worden die aan twee voorwaarden voldoet. Dit is onze "probeer-actie". Ten eerste, S' is eenvoudig genoeg zodanig dat $\int \mathcal{D}x\ e^{-S'/\hbar}$ en $\int \mathcal{D}x\ Fe^{-S'/\hbar}$ voor simpele functionalen F kunnen worden berekend. Ten tweede, de sterk bijdragende paden in de integraal $\int \mathcal{D}x\ e^{-S'/\hbar}$ en in de integraal $\int \mathcal{D}x\ e^{-S/\hbar}$ zijn gelijkaardig. We noteren de vrije energie die met de probeer-actie S' overeenkomt als F', dus

$$e^{-\beta F'} = \int dx_a \int_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}x \exp\left\{-\frac{S'[x(\tau)]}{\hbar}\right\} \tag{6.14}$$

[1] Dit zal dus niet rechtstreeks lukken voor systemen met vectorpotentialen, zoals aangegeven helemaal op het einde van het vorige hoofdstuk, maar voor die complicatie refereren we de geïnteresseerde lezer naar de vakliteratuur.

Hiermee kunnen we ook schrijven dat

$$e^{-\beta(F-F')} = \frac{\int dx_a \int\limits_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}x \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}S[x(\tau)]\right\}}{\int dx_a \int\limits_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}x \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}S'[x(\tau)]\right\}} \tag{6.15}$$

Tellen we bij de actie de probeer-actie op, en trekken we die er terug van af, dan komt er

$$\exp\left\{-\frac{S[x(\tau)]}{\hbar}\right\} = \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left(S-S'\right)\right\}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}S'\right\} \tag{6.16}$$

waarmee

$$e^{-\beta(F-F')} = \frac{\int dx_a \int\limits_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}x \left[\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left(S-S'\right)\right\}\right] \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}S'[x(\tau)]\right\}}{\int dx_a \int\limits_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}x \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}S'[x(\tau)]\right\}} \tag{6.17}$$

Deze formule vertelt ons dat $e^{-\beta(F-F')}$ het gemiddelde is van $\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left(S-S'\right)\right\}$, waarbij dit gemiddelde genomen wordt over alle paden $x(\tau)$ met dezelfde begin- en eindpunten, gewogen met $e^{-S'[x(\tau)]/\hbar}$. Met andere woorden,

$$e^{-\beta(F-F')} = \left\langle\left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left(S-S'\right)\right\}\right\rangle\right\rangle_{S'}, \tag{6.18}$$

waarbij we onze dubbele haakjes van de kwantumstatistische gemiddelde uit het vorig hoofdstuk overnemen, cf. (5.51). Nu zetten we er een onder-index S' bij om te benadrukken dat de kwantumstatistische verwachtingswaarde genomen wordt in het systeem S', met dus de $e^{-S'/\hbar}$ als gewichten voor de paden.

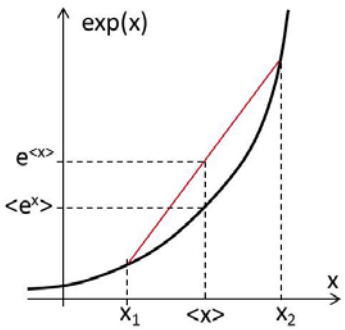
Een manier om hiermee verder te werken, is om beide exponenten in reeksontwikkeling te schrijven in de hoop dat $\beta(F-F')$ en $(S-S')/\hbar$ klein zijn. Maar, zeker voor lage temperaturen waar β groot is, is dit niet altijd een goede benadering. Er is een betere methode, gebaseerd op een eigenschap van concave functies. Dit zijn functies, net zoals e^x, die overal een positieve tweede afgeleide hebben. De gemiddelde waarde van zo'n concave functie zoals e^x, wanneer x een random variabele is, is steeds groter of gelijk aan de functiewaarde geëvalueerd in het gemiddelde van x, zolang x reëel is en de gewichten in de uitmiddeling positief. Met andere woorden,

$$\langle e^x\rangle \geqslant e^{\langle x\rangle} \tag{6.19}$$

en dit geldt natuurlijk ook voor ons kwantumstatistisch gemiddelde met de dubbele haakjes, zodat

$$\left\langle\left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left(S-S'\right)\right\}\right\rangle\right\rangle_{S'} \geqslant \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left\langle\left\langle S-S'\right\rangle\right\rangle_{S'}\right\}. \tag{6.20}$$

Deze eigenschap van concave functies, en de exponentiële, kan je duidelijk zien in onderstaande figuur:



waar we uitmiddelen met gelijk gewicht over x_1 en x_2. Wanneer een willekeurig aantal massapunten op de curve ligt, ligt het massamiddelpunt (het gewogen gemiddelde dus) inderdaad boven de curve. Hiermee vinden we

$$\exp\{-\beta(F-F')\} \geqslant \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left\langle\left\langle S-S'\right\rangle\right\rangle_{S'}\right\}. \tag{6.21}$$

Dit impliceert

$$\boxed{F \leqslant F' - \frac{1}{\hbar\beta}\left\langle\left\langle S'-S\right\rangle\right\rangle_{S'}.} \tag{6.22}$$

Dit is de **Jensen-Feynman variationele ongelijkheid**. Het is een minimumprincipe dat zegt dat als we de vrije energie F' en $\left\langle\left\langle S'-S\right\rangle\right\rangle_{S'}$ voor allerlei "probeer-acties" S' kunnen uitrekenen, dan de berekende waarde van $F' - \left\langle\left\langle S'-S\right\rangle\right\rangle_{S'}/(\hbar\beta)$ die het kleinste is ook de beste afschatting zal zijn van de echte vrije energie. We vinden met andere woorden een variationele bovengrens voor de vrije energie.

Dit is krachtiger dan het variatieprincipe uit de kwantumfysica, waar je met probeer golffuncties werkt. Dat variatieprincipe gaat je alleen de grondtoestand *bij temperatuur nul* opleveren. Met het nieuwe variatieprincipe heb je een resultaat bij elke temperatuur. Het verschil is dat je niet langer met een probeergolffunctie werkt, maar met een probeer-actie (of probeer-Lagrangiaan) waar je parameters in kan plaatsen. Deze probeer-actie zullen we graag kwadratisch kiezen, dan kunnen we inderdaad alle padintegralen analytisch uitrekenen, bvb. via de WKB methode.

6.3 Jensen-Feynman variatiemethode

6.3.1 De actie van het echte systeem

In deze sectie gaan we de Jensen-Feynman variatiemethode illustreren aan de hand van een voorbeeld. Het te onderzoeken systeem is een deeltje in een "quartische" potentiaalput:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \lambda x^4. \tag{6.23}$$

Het deeltje wordt door de potentiaal λx^4 teruggetrokken naar de oorsprong, maar niet meer op een harmonische manier (i.e. niet meer zoals een veer dat zou doen). De actie die hiermee overeenkomt is

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \lambda x^4\right) dt. \tag{6.24}$$

Opletten geblazen, het is niet de actie voor het pad in reële tijd dat we nodig hebben om de toestandssom te berekenen, maar de actie voor het pad in imaginaire tijd! En dit voor een vertrektijd $\tau = 0$ en een aankomsttijd $\tau = \hbar\beta$. Daarbij draait het teken van de potentiële energie om, zoals in formule (5.49). Omdat het overgaan op imaginaire tijden vaak verwarrend kan zijn, doen we het nog even expliciet. Het gewicht van de paden, $\exp\{iS[x(t)]/\hbar\}$, verandert in imaginaire tijden $\tau = it$ naar $\exp\{-S[x(\tau)]/\hbar\}$. De overgang naar de nieuwe variabele $\tau = it$ (en dus $t = -i\tau$) gaat gepaard met $dt = -id\tau$. en dus met

$$\frac{dx}{dt} = \frac{dx}{d\tau}\frac{d\tau}{dt} = i\frac{dx}{d\tau}. \tag{6.25}$$

Hieruit volgt dat

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar}S[x(it)] &= \frac{i}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta}\left(\frac{1}{2}m\left(i\frac{dx}{d\tau}\right)^2 - \lambda x^4\right)(-id\tau) \\
&= -\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta}\left(\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + \lambda x^4\right)d\tau \\
&= -\frac{1}{\hbar}S[x(\tau)],
\end{aligned} \tag{6.26}$$

met dus

$$S[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta}\left(\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + \lambda x^4\right)d\tau. \tag{6.27}$$

Dit is het startpunt van onze berekening, de imaginaire-tijd actie van een deeltje in een quartische potentiaal. We zoeken de vrije energie van dit systeem bij

temperatuur $T = 1/(k_B\beta)$, gegeven door

$$e^{-\beta F} = \int dx_a \int\limits_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}x \exp\left\{-\frac{S[x(\tau)]}{\hbar}\right\}. \tag{6.28}$$

We kunnen dit doen door de propagator af te schatten met WKB, of door een storingsreeks op te stellen, maar we kiezen er voor om de derde methode te illustreren: het Jensen-Feynman variatieprincipe.

6.3.2 De probeer-actie van het variationele modelsysteem

Hiertoe hebben we een probeer-actie nodig, eentje waarvan we de padintegraal goed kunnen oplossen. Waarom niet het voorbeeld dat we al het uitgebreidst uitgewerkt hebben? Hiervan is de Lagrangiaan natuurlijk

$$L' = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{6.29}$$

In plaats van een variationele golffunctie hebben we nu een variationele Lagrangiaan, met als aanpasbare modelparameter ω. Gegegeven een quartische potentiaal met sterkte λ, wat zal de best passende ω zijn ? Even opmerken dat we ook hier moeten werken met imaginaire-tijd acties. Opnieuw doorvoeren van de analytische voortzetting naar $\tau = it$ geeft net zoals hierboven

$$S'[x(\tau)] = \int\limits_0^{\hbar\beta} \frac{m}{2}\left[\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + \omega^2 x^2\right] d\tau. \tag{6.30}$$

Dit is onze probeer-actie. De vrije energie van dit systeem hebben we uitgerekend in het voorgaande hoofdstuk, we vinden

$$F' = k_B T \ln\left[2\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)\right] \tag{6.31}$$

wat dus nog afhangt van de aanpasbare parameter ω.

Nu het echte systeem en ons modelsysteem zijn gespecifieerd, kunnen we dit allemaal invullen in de Jensen-Feynman ongelijkheid. We hebben het verschil tussen beide acties nodig:

$$S'[x(\tau)] - S[x(\tau)] = \int\limits_0^{\hbar\beta} \left(\frac{m\omega^2}{2}x^2 - \lambda x^4\right) d\tau \tag{6.32}$$

De vrije energie wordt dan

$$F \leqslant \frac{1}{\beta}\ln\left[2\sinh\left(\beta\hbar\omega/2\right)\right] - \frac{1}{\hbar\beta}\int\limits_0^{\hbar\beta} \left\langle\left\langle \frac{m\omega^2}{2}x(\tau)^2 - \lambda x(\tau)^4 \right\rangle\right\rangle_{S'} d\tau \tag{6.33}$$

We moeten, om dit verder te kunnen uitwerken, de verwachtingswaarde van de plaats op tijdstip τ kunnen uitrekenen, meerbepaald $\left\langle\left\langle x(\tau)^2\right\rangle\right\rangle_{S'}$ en $\left\langle\left\langle x(\tau)^4\right\rangle\right\rangle_{S'}$

6.3.3 Feynman-Hellmann theorema

Dit is een handig theorema dat we vaak gebruiken om een kwantumstatistische verwachtingswaarde in verband te brengen met een andere die we al kennen. Het zegt eigenlijk dat we afleiden naar een parameter en het nemen van de kwantumstatistische verwachtingswaarde mogen omwisselen,

$$\frac{d}{d\alpha}\left\langle\left\langle f(\alpha)\right\rangle\right\rangle = \left\langle\left\langle \frac{df}{d\alpha}\right\rangle\right\rangle. \tag{6.34}$$

Stel nu dat we de kwantumstatistische verwachtingswaarde

$$f(k) = \left\langle\left\langle \exp\left\{ikx(\tau_0)\right\}\right\rangle\right\rangle_{S'} \tag{6.35}$$

kennen, dan kunnen we hiermee ook $\left\langle\left\langle x(\tau_0)\right\rangle\right\rangle_{S'}$ op het imaginair tijdstip τ_0 uitrekenen:

$$\left\langle\left\langle x(\tau_0)\right\rangle\right\rangle = -i\,\frac{d}{dk}\left\langle\left\langle \exp\left\{ikx(\tau_0)\right\}\right\rangle\right\rangle_{S'}\Bigg|_{k=0}. \tag{6.36}$$

Door meermaals af te leiden kunnen we dan ook de hogere machten vinden:

$$\left\langle\left\langle x(\tau_0)^2\right\rangle\right\rangle = -\,\frac{d^2}{dk^2}\left\langle\left\langle \exp\left\{ikx(\tau_0)\right\}\right\rangle\right\rangle_{S'}\Bigg|_{k=0}, \tag{6.37}$$

en

$$\left\langle\left\langle x(\tau_0)^4\right\rangle\right\rangle = \frac{d^4}{dk^4}\left\langle\left\langle \exp\left\{ikx(\tau_0)\right\}\right\rangle\right\rangle_{S'}\Bigg|_{k=0}. \tag{6.38}$$

Enig rekenwerk, dat we voor de lezer laten (of hem/haar verwijzen naar de boekskes), laat ons inderdaad toe om deze verwachtingswaarde uit te rekenen. Inderdaad, de actiefunctionaal is kwadratisch, dus is er in principe geen probleem. Er geldt:

$$\left\langle\left\langle \exp\left\{ikx(\tau_0)\right\}\right\rangle\right\rangle_{S'} = \exp\left\{-\frac{\hbar k^2}{4m\omega}\coth(\hbar\omega\beta/2)\right\} \tag{6.39}$$

Het Feynman-Hellmann theorema leert ons dan dat

$$\left\langle\left\langle x(\tau_0)^2\right\rangle\right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\coth(\hbar\omega\beta/2) \tag{6.40}$$

Dit is het resultaat dat we al eerder bekwamen voor $\left\langle\left\langle x^2\right\rangle\right\rangle$, uitdrukking (5.41). Dat kan de lezer(es) die ontstemd is over het feit dat we (6.39) niet expliciet bewijzen moeten geruststellen. Nochtans, in principe mochten we er niet van uitgaan dat dit hetzelfde zou zijn, vermits de verwachte gemiddelde uitwijking niet gelijk hoeft te zijn aan de verwachte gemiddelde uitwijking *op tijdstip* τ.

Maar aangezien $\langle\langle \exp\{ikx(\tau_0)\}\rangle\rangle_{S'}$ geen τ_0 afhankelijkheid meer heeft, blijkt dit wel te zijn. Analoog vinden we

$$\left\langle\left\langle x(\tau_0)^4\right\rangle\right\rangle = \frac{3}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \coth^2(\hbar\omega\beta/2) \tag{6.41}$$

6.3.4 Variationele bovengrens

Het feit dat de gezochte kwantumstatistische verwachtingswaarden $\left\langle\left\langle x(\tau_0)^2\right\rangle\right\rangle$ en $\left\langle\left\langle x(\tau_0)^4\right\rangle\right\rangle$ niet afhangen van τ_0, vereenvoudigt ons werk:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar\beta}\langle\langle S' - S\rangle\rangle_{S'} &= \frac{1}{\hbar\beta}\int_0^{\hbar\beta}\left\langle\left\langle \frac{m\omega^2}{2}x(\tau)^2 - \lambda x(\tau)^4\right\rangle\right\rangle_{S'} d\tau \\ &= \frac{m\omega^2}{2}\left\langle\left\langle x^2\right\rangle\right\rangle_{S'} - \lambda\left\langle\left\langle x^4\right\rangle\right\rangle_{S'}. \end{aligned} \tag{6.42}$$

Door (6.40) en (6.41) in te vullen kunnen we de variationele bovengrens uitrekenen. We vinden:

$$F \leqslant \frac{1}{\beta}\ln\left[2\sinh\left(\beta\hbar\omega/2\right)\right] - \frac{\hbar\omega}{4}\coth(\hbar\omega\beta/2) + \frac{3\lambda}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \coth^2(\hbar\omega\beta/2). \tag{6.43}$$

In tegenstelling tot het variatieprincipe uit de kwantummechanica, hebben we nu een afschatting niet enkel voor de grondtoestand (bij temperatuur nul of $\beta \to \infty$), maar voor alle temperaturen. Dat is nieuw! We hebben nog wel een variationele parameter ω te bepalen. Aangezien de ongelijkheid opgaat voor alle ω, kunnen we de scherpste bovengrens vinden door de uitdrukking in het linkerlid minimaal te maken als functie van ω.

Laten we dit eerst eens doen voor lage temperaturen, $\beta \to \infty$:

$$F_{\beta\to\infty} \leqslant \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{3\lambda}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \tag{6.44}$$

Het rechterlid wordt maximaal bij

$$\beta \to \infty : \omega = 6^{1/3}\left(\frac{\hbar\lambda}{m^2}\right)^{1/3} \tag{6.45}$$

waarmee de grondtoestandsenergie wordt afgeschat als

$$E_G = F_{\beta\to\infty} = \left(\frac{3}{4}\right)^{4/3}\hbar\left(\frac{\hbar\lambda}{m^2}\right)^{1/3} \tag{6.46}$$

Dit is hetzelfde resultaat als wat we zouden bekomen met behulp van de 'gewone' variatierekening uit de kwantummechanica, als we een gaussische golffunctie

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\left\{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right\} \tag{6.47}$$

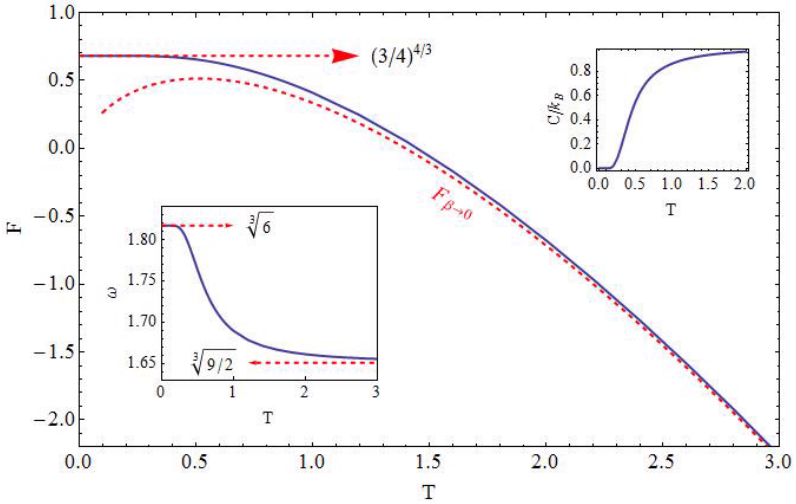
gebruiken, de grondtoestandsgolffunctie van ons probeersysteem met actie S'. Maar het Feynman-Jensen principe biedt meer, we hebben nu ook een afschatting voor elke temperatuur. Bijvoorbeeld, als de temperatuur groot wordt ($\beta \to 0$), dan vinden we in eenheden $\hbar = \lambda = m = 1$:

$$\beta \to 0 : \omega = \sqrt[3]{\frac{9}{2}} \tag{6.48}$$

In deze limiet gaat de vrije energie als

$$F_{\beta\to 0} \approx -T\left(\log(T) + \frac{1}{6} - \frac{1}{3}\log\left(9/2\right)\right). \tag{6.49}$$

Voor de intermediaire temperaturen zullen we de minimisatie numeriek moeten doen, want er komt een transcendente vergelijking. Wil je dat niet doen, ook goed, dan gebruik je een of andere interpolatie van ω tussen lage en hoge temperatuur: het zal ook een bovengrens zijn, zij het een minder goede. Hiermee zie je ook meteen het nadeel van (elke) variationale methode: je hebt wel een bovengrens, maar zolang er nog geen ondergrens is heb je geen idee hoe dicht je bij de echte waarde zit.



Bovenstaande figuur toont het resultaat voor de vrije energie F en de parameter ω, in de eenheden met $\hbar = \lambda = m = 1$ (dit wil zeggen dat ω in eenheden $(\hbar\lambda/m^2)^{1/3}$ staat, en dat T in eenheden $(\hbar^4\lambda/m)^{1/3}/k_B$ staat). Ook wordt de soortelijke warmte getoond, in eenheden k_B, als functie van de temperatuur. Die kunnen we vinden via de formule $C = -T \times \partial^2 F/\partial T^2$. De soortelijke warmte begint bij nul, en stijgt naar k_B, mooi wat we verwachten. Ook zo'n resultaat kan je natuurlijk niet bekomen met het ordinaire variatieprincipe uit de kwantummechanica.

Adversity is the first path to truth. – Lord Byron

Remember when life's path is steep to keep your mind even. – Horace

Most safely shall you tread the middle path.– Ovid

A straight path never leads anywhere except to the objective. – Andre Gide

Belief like any other moving body follows the path of least resistance. – Samuel Butler

To have his path made clear for him is the aspiration of every human being in our beclouded and tempestuous existence. – Joseph Conrad

Free will is an illusion. People always choose the perceived path of greatest pleasure. – Scott Adams

Bijlage A

Appendix: dichtheidsmatrices

Om ons wat beter vertrouwd te maken met dichtheidsmatrices, geven we een simpel voorbeeld: het tweeniveausysteem. Een spin-1/2 deeltje kan in de op-toestand $|\uparrow\rangle$ of in de neer-toestand $|\downarrow\rangle$ zitten, of in eender welke superpositie ervan. In deze basis kunnen we de operator $\hat{\rho}$ als matrix voorstellen,

$$\rho = \begin{pmatrix} \langle\uparrow|\,\hat{\rho}\,|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\,\hat{\rho}\,|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|\,\hat{\rho}\,|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\,\hat{\rho}\,|\downarrow\rangle \end{pmatrix} \tag{A.1}$$

We onderzoeken hoe dit er uit ziet in verschillende situaties.

1. Stel, in een eerste situatie, dat we een bundel maken atomen die met 100% kans spin-op $|\uparrow\rangle$ zijn. Telkens als we met 100% zekerheid in een bepaalde kwantumtoestand zitten, dan zeggen we dat het systeem in een "pure" toestand zit: er is geen statistische middeling te nemen. Dan is de dichtheidsmatrix

$$\hat{\rho}_1 = 100\% \times |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + 0\% \times |\downarrow\rangle\langle\downarrow|\,, \tag{A.2}$$

Deze operator heeft in de basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ een matrixrepresentatie

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{A.3}$$

Je kan een pure toestand herkennen doordat $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\log(\hat{\rho})] = 0$.

2. In het tweede voorbeeld heb je een 50%-50% kansverdeling om een atoom in spin-op of spin-neer toestand te vinden:

$$\hat{\rho}_2 = 0.5\,|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + 0.5\,|\downarrow\rangle\langle\downarrow|\,, \tag{A.4}$$

met als matrixvoorstelling in de $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ basis:

$$\rho_2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}. \tag{A.5}$$

3. Maar soms zijn spin-op en spin-neer niet de toestanden waarop we de kansverdeling gaan enten. Stel bijvoorbeeld dat we met 100% zekerheid een atoom in een superpositie $|+\rangle = (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ maken. Dan is er 0% kans dat het atoom in de orthogonale toestand $|-\rangle = (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$. Dit is dus opnieuw een pure toestand. In de basis $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ is de dichtheidsmatrix diagonaal, en bevat $p_+ = 1$ en $p_- = 0$ op de diagonaal, zoals in het eerste voorbeeld. Maar werken we in de basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, dan ziet de dichtheidsmatrix er ingewikkelder uit. Het is niet moeilijk uit te rekenen dat in dat geval de dichtheidsmatrix gegeven wordt door

$$\hat{\rho}_3 = 100\% \times \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) (\langle\uparrow| + \langle\downarrow|) \tag{A.6}$$

waarmee

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \tag{A.7}$$

Gevallen 2 en 3 geven dus verschillende dichtheidsmatrices. Voor sommige observabelen maakt dit geen verschil: meet je hoeveel atomen er $|\uparrow\rangle$ hebben, door een bundel atomen langs een Stern-Gerlach filter te sturen (die dus alleen spin-op doorlaat), dan ga je zowel in geval 2 als in geval 3 vinden dan 50% van de atomen er door komen. De observabele 'meet spin-op' is immers

$$\hat{A}_{op} = |\uparrow\rangle \langle\uparrow|$$

waarmee

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_2 \hat{A}_{op}\right] &= \mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\right] = 1/2 \end{aligned} \tag{A.8}$$

en

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_3 \hat{A}_{op}\right] &= \mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}\right] = 1/2 \end{aligned} \tag{A.9}$$

Hier geeft de verwachtingswaarde over kwantummechanische superpositie hetzelfde soort resultaat als de uitmiddeling over de statistische verdeling. Maar dit is niet zo voor eender welke andere observabele! Nu laten we de bundel atomen door een Stern-Gerlach filter gaan die enkel atomen met spin in de (-x)-richting doorlaat. Herinner je dat $|-\rangle = (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ precies deze toestand voorstelt. Ons apparaat heeft dus als operator

$$\hat{A}_{(-x)} = |-\rangle \langle-| \tag{A.10}$$

In de basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ heeft dit als matrixvoorstelling

$$A_{(-x)} = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \tag{A.11}$$

Wanneer we de bundel uit experiment 2 door deze filter sturen, komt de helft van de atomen er door:

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_2 \hat{A}_{(-x)}\right] &= \mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} 1/4 & -1/4 \\ -1/4 & 1/4 \end{pmatrix}\right] = 1/2 \end{aligned} \tag{A.12}$$

maar wanneer we de bundel uit experiment 3 door deze filter sturen, komen er helemaal geen atomen door:

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_3 \hat{A}_{(-x)}\right] &= \mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\right] = 0 \end{aligned} \tag{A.13}$$

In experiment 3 hebben we geen statistische middeling, want het is een pure toestand zoals vermeld. Er is enkel de kwantummechanische verwachtingswaarde te nemen, en die geeft nul. In het experiment 2 hebben we de verwachtingswaarden te nemen (over $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$) en dan nog eens een gemiddelde over $p_\uparrow = 0.5$, $p_\downarrow = 0.5$. Het was geen pure toestand, en een dubbele uitmiddeling is nodig: de verwachtingswaarde én de statistische fysica middeling. De verwachtingswaarde is een middeling die de onzekerheid ten gevolge van de collaps van de golffunctie bij het meetproces in rekening brengt (in zekere zin kan je zeggen dat dit komt doordat je de entanglement met het meetapparaat niet in rekening brengt). De statistische middeling gaat dan weer de onzekerheid over welke pure kwantumtoestand je hebt in rekening brengen, en dit is een gevolg van thermische fluctuaties doordat we energie-uitwisselingen met de rest van de wereld niet mee in de beschrijving opnemen.

Merk op dat we bij bovenstaande voorbeelden geen Boltzman factor hebben. We hebben niet verondersteld dat onze bundel atomen wordt gemaakt in thermisch evenwicht met een groot reservoir op een bepaalde temperatuur. Gesteld dat $[S_z, H] = 0$, dus dat $|\uparrow\rangle$ en $|\downarrow\rangle$ ook goede eigentoestanden van de Hamiltoniaan zijn (met eigenwaarden of energieën $E_\uparrow$ en $E_\downarrow$), dan zou er komen voor de verdeling bij thermisch evenwicht

$$\hat{\rho}_{th} = e^{-E_\uparrow/(k_B T)} |\uparrow\rangle \langle\uparrow| + e^{-E_\downarrow/(k_B T)} |\downarrow\rangle \langle\downarrow| \tag{A.14}$$

waaruit

$$\rho_{th} = \begin{pmatrix} e^{-E_\uparrow/(k_B T)} & 0 \\ 0 & e^{-E_\downarrow/(k_B T)} \end{pmatrix} \tag{A.15}$$

Als je in de energie-eigentoestanden werkt, dan is de dichtheidsmatrix voor thermisch evenwicht diagonaal, maar als je een andere basis kiest, bvb. $|+\rangle$ en $|-\rangle$, dan is dezelfde dichtheidsmatrix niet meer diagonaal:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{th} &= \frac{e^{-E_\uparrow/(k_BT)} + e^{-E_\downarrow/(k_BT)}}{2}\left(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|\right) \\ &\quad + \frac{e^{-E_\uparrow/(k_BT)} - e^{-E_\downarrow/(k_BT)}}{2}\left(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|\right) \qquad \text{(A.16)}\end{aligned}$$

Zo zie je het nut om te werken in de basis van energie-eigentoestanden als er thermisch evenwicht is. Maar, zoals blijkt uit voorbeelden 1-3, *een systeem hoeft helemaal niet in thermisch evenwicht te zijn* om beschreven te worden met dichtheidsmatrices. Een experimentator kan gerust een andere kansverdeling ineen draaien bij het prepareren van een bundel atomen, door een combinatie van filters en mengers en Rabi shifters en al dat moois dat ze ter beschikking hebben op een doorsnee optische tafel.

Bijlage B

Appendix: berekening van $\langle\langle \exp\{ikx(\tau_0)\}\rangle\rangle$

Om dat te kunnen gebruiken, moeten we natuurlijk de kwantumstatistische verwachtingswaarde van $\exp\{ikx(\tau)\}$ kunnen uitrekenen, in het modelsysteem S'. Uitdrukkking (5.51) is

$$\langle\langle \exp\{ikx(\tau_0)\}\rangle\rangle_{S'} = \frac{1}{\mathcal{Z}'}\int dx_a \int\limits_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}x \ \exp\{ikx(\tau_0)\}\exp\{-S'[x(\tau)]/\hbar\}\,. \tag{B.1}$$

Hierin is $\mathcal{Z}' = 1/[2\sinh(\hbar\omega\beta/2)]$ de partitiesom van het modelsysteem, cf. uitdrukking (5.31) voor de harmonische oscillator. Nemen we de twee exponentiëlen samen, dan kunnen we dit schrijven met een effectieve actie,

$$\langle\langle \exp\{ikx(\tau_0)\}\rangle\rangle_{S'} = \frac{1}{\mathcal{Z}'}\int dx_a \int\limits_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}x \ \exp\{-S_{eff}[x(\tau)]/\hbar\}\,, \tag{B.2}$$

gegeven door

$$S_{eff}[x(\tau)] = i\hbar k x(\tau_0) + \int\limits_0^{\hbar\beta} \frac{m}{2}\left[\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + \omega^2 x^2\right] d\tau \tag{B.3}$$

Dit kunnen we schrijven als een door een krachtveld aangedreven harmonische oscillator:

$$S_{eff}[x(\tau)] = \int\limits_0^{\hbar\beta} \frac{m}{2}\left[\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + \omega^2 x(\tau)^2 + F(\tau)x(\tau)\right] d\tau \tag{B.4}$$

met

$$F(\tau) = i\hbar k\delta(\tau - \tau_0) \tag{B.5}$$

De delta functie plukt er de tijd $\tau' = \tau$ uit zodat de integraal

$$\int_0^{\hbar\beta} F(\tau)x(\tau)d\tau = i\hbar k x(\tau_0) \tag{B.6}$$

De padintegraal voor een aangedreven harmonische oscillator kunnen we exact oplossen, want de effectieve actie $S_{eff}[x(\tau')]$ is kwadratisch. Het resultaat laat zich schrijven als

$$\int dx_a \int_{\{x_a,0\}}^{\{x_a,\hbar\beta\}} \mathcal{D}x \;\exp\{-S_{eff}/\hbar\} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\hbar\omega\beta)}}$$
$$\times \exp\left\{\frac{1}{2m\hbar}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \frac{\cosh\left[\omega\left(\beta\hbar/2 - |\tau-\sigma|\right)\right]}{2\omega\sinh(\hbar\beta\omega/2)} F(\tau)F(\sigma)\right\} \tag{B.7}$$

Aangezien $F(\tau)$ delta functies zijn, kunnen we de dubbele integraal over imaginaire tijden uitvoeren, en vinden we

$$\langle\langle \exp\{ikx(\tau_0)\}\rangle\rangle_{S'} = \exp\left\{-\frac{\hbar k^2}{4m\omega}\coth\left[\omega\left(\beta\hbar/2\right)\right]\right\} \tag{B.8}$$