

# Semiklassische Phasenraumpropagatoren

Diplomarbeit von

**Frank Keck**

Durchgeführt am  
Fachbereich Physik  
der Universität Kaiserslautern

Unter Anleitung von Herrn  
**Prof. Dr. H. J. Korsch**

Kaiserslautern, Januar 1999



# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>1 Grundlagen</b>	<b>7</b>
1.1 Klassische Mechanik . . . . .	7
1.2 Quantenmechanik . . . . .	12
1.3 Semiklassik . . . . .	15
<b>2 Semiklassische Theorie nach Miller und Weissman</b>	<b>19</b>
2.1 Korrespondenzrelationen nach Miller . . . . .	19
2.1.1 Herleitung der Korrespondenzrelationen . . . . .	19
2.2 Die kohärente Transformation . . . . .	25
2.3 Matricelemente zwischen kohärenten Zuständen . . . . .	26
2.3.1 Betrachtung einer Kette kanonischer Transformationen . . . . .	26
2.3.2 Spezialfall . . . . .	28
2.3.3 Die dynamische Transformation . . . . .	29
2.4 Zusammenfassung . . . . .	30
<b>3 Der Herman-Kluk-Propagator</b>	<b>31</b>
3.1 Zeitentwicklung kohärenter Zustände . . . . .	31
3.1.1 Stationäre Phase bzw. steepest descent . . . . .	34
3.1.2 Methode 1: Sukzessive Integration der $\eta_j$ . . . . .	36
3.1.3 Kontinuierliche Variablen . . . . .	37
3.1.4 Die Wirkung . . . . .	41
3.1.5 Methode 2: Simultane Durchführung aller Integrationen . . . . .	42
3.2 Zum klassischen Äquivalent eines Hamiltonoperators . . . . .	47
3.3 Ein Maß für den Fehler . . . . .	48
3.4 Der Herman-Kluk-Propagator . . . . .	50
3.5 Eigenschaften des Herman-Kluk-Propagators . . . . .	54
3.5.1 Unitarität . . . . .	54

3.5.2	Zeitumkehr . . . . .	59
3.5.3	Van Vleck-Gutzwiller-Propagator . . . . .	61
3.6	Der Harmonische Oszillator . . . . .	62
3.7	Zusammenfassung . . . . .	66
<b>4</b>	<b>Numerische Methoden</b>	<b>67</b>
4.1	Berechnung des Integranden . . . . .	67
4.2	Integration . . . . .	69
4.3	Bestimmung der Energieeigenwerte . . . . .	74
4.3.1	Fouriertransformation . . . . .	74
4.3.2	Matrixdiagonalisierung . . . . .	75
4.3.3	Filterdiagonalisierung . . . . .	76
4.4	Zusammenfassung . . . . .	78
<b>5</b>	<b>Anwendungen</b>	<b>79</b>
5.1	Der Harmonische Oszillator . . . . .	79
5.2	Vergleich mit JWKB-Methoden . . . . .	84
5.3	Semiklassischer Limes . . . . .	88
5.4	Untersuchung von Energiesplittings . . . . .	89
5.5	Untersuchung von Resonanzen . . . . .	94
5.6	Zeitabhängige Systeme . . . . .	95
5.7	Zusammenfassung . . . . .	97
	<b>Zusammenfassung</b>	<b>99</b>
<b>A</b>	<b>Mathematischer Anhang</b>	<b>101</b>
A.1	Reelle und komplexe Gaußintegrale . . . . .	101
A.2	Stationäre Phase und „steepest descent“ . . . . .	101
A.2.1	Stationäre Phase . . . . .	101
A.2.2	Die Methode des „steepest descent“ . . . . .	103
<b>B</b>	<b>Berechnung der Quasienergien eines explizit zeitabhängigen Hamilton-operators</b>	<b>105</b>

# Einleitung

Die Untersuchung von semiklassischen Näherungen des Zeitentwicklungsoperators in der Quantenmechanik ist sowohl von fundamentalem als auch von didaktischem Interesse [Sep96, Gro99]. Das fundamentale Interesse ist in der Beschreibung des Zusammenhangs zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik begründet, das didaktische erklärt sich aus dem anschaulichen Zugang, den die Beschreibung von quantenmechanischen Prozessen durch klassische Größen liefert. Besonders klar wird dieser Zusammenhang, wenn eine Phasenraumdarstellung der Quantenmechanik betrachtet wird. Eine erste semiklassische Näherung für den Propagator im Phasenraum, den sogenannten „coherent state“-Propagator, wurde von Klauder [Kla78, Kla79, Kla87] vorgestellt. Weissman [Wei82] motivierte diese Näherung durch die Erweiterung der semiklassischen Korrespondenzrelationen [Mil74] auf den Begriff der kohärenten Variablen. In späteren Veröffentlichungen wie zum Beispiel [Xav96a, Gro98a] wird auf eine rigorose Herleitung mittels Pfadintegralmethoden verwiesen, die aber bis zum heutigen Tage nicht verwirklicht wurde. Ein zentraler Punkt dieser Arbeit wird es sein, zum ersten Mal diese alternative Herleitung vollständig zu präsentieren.

Die Eigenschaften der semiklassischen Näherung des Phasenraumpropagators wurden für eine Reihe fundamentaler Quantenprozesse untersucht. Beispiele hierzu sind in den Veröffentlichungen [Xav96a, Xav96b, Xav97, Gro98a] zu finden.

Ausgehend von der semiklassischen Näherung des Phasenraumpropagators ergibt sich durch eine Ortsraumdarstellung desselben der Herman-Kluk-Propagator [Her84, Her86, Klu86, Gro97, Gue98, Gro98b]. Dieser gehört zur Klasse der Anfangswertdarstellungen („initial value representations“, IVRs) [Kay94a, Kay94b, Kay97], die die sonst bei semiklassischen Näherungen auftretenden Schwierigkeiten wie Kaustiken, Singularitäten und beidseitige Randbedingungen für die zugrundeliegenden klassischen Bahnen umgehen. Dies erlaubt ihre Anwendung auch auf Quantensysteme, deren klassisches Äquivalent chaotische Phasenraumbereiche enthält [Sch98]. Erste Untersuchungen hierzu wurden in unserer Arbeitsgruppe Ende 1997 durchgeführt. Die Frage nach der Klärung grundsätzlicher Eigenschaften des verwendeten Propagators und der verwendeten Methode sowie die Beleuchtung des theoretischen Hintegrunds lieferten die Anregung für diese Arbeit.

## Zu dieser Arbeit

In dieser Arbeit wird die semiklassische Näherung für den Phasenraumpropagator und hierauf aufbauend der Herman-Kluk-Propagator hergeleitet und ihre Eigenschaften untersucht. Im einzelnen gliedert sich die Arbeit folgendermaßen:

- In einem ersten, einführenden Kapitel werden kurz die grundlegenden Begriffe aus den drei Gebieten der klassischen Mechanik, der Quantenmechanik und der Semiklassik erläutert.
- Das zweite Kapitel gibt einen Überblick über die semiklassische Theorie nach Miller und Weissman. Der zentrale Begriff ist hierbei der der Korrespondenzrelation, der einen direkten Zusammenhang zwischen klassischen Größen (erzeugenden Funktionen) und unitären Transformationen in der Quantenmechanik liefert. Ein Spezialfall dieser Korrespondenz ist der Zusammenhang zwischen der Zeitentwicklung eines quantenmechanischen kohärenten Zustands und der Evolution klassischer Bahnen.
- Im zentralen dritten Abschnitt wird erstmalig eine vollständige Herleitung des Phasenraumpropagators mittels Pfadintegralmethoden gegeben. Aus dieser Herleitung wird klar, daß eines der Probleme der Semiklassik in der Frage liegt, welche Hamiltonfunktion einem gegebenen Hamiltonoperator zuzuordnen ist. Auch der durch die semiklassischen Näherung eingeführte Fehler wird diskutiert. Anschließend wird aus dem „coherent state“-Propagator der Herman-Kluk-Propagator hergeleitet und dessen Eigenschaften besprochen.
- Das vierte Kapitel beschreibt in Vorgriff auf den letzten Abschnitt die numerische Implementierung des Herman-Kluk-Propagators und verschiedene Methoden zur Gewinnung von Energieeigenwerten eines Quantensystems. Hierzu wird eine phasenraumsensitive Integrationsroutine vorgestellt.
- Abschließend werden die Ergebnisse der numerischen Anwendung des Propagators auf verschiedene, charakteristische Quantensysteme vorgestellt und sowohl mit der exakten Quantenmechanik, als auch mit anderen semiklassischen Methoden verglichen. Dabei werden sowohl die Stärken, als auch die Schwächen dieser Methode deutlich werden.

# Kapitel 1

## Grundlagen

Dieses einführende Kapitel gibt einen kurzen Überblick über die im weiteren Verlauf der Arbeit benötigten grundlegenden Begriffe aus der klassischen Mechanik [Gol80, Nol97, Sch96], der Quantenmechanik [Coh97, Gra88, Mes91, Nol96, Sch88] und der Semiklassik [Mas81, Chi91]. Für weitere Informationen sei auf die angegebenen Lehrbücher verwiesen. Dem mathematisch versierteren Leser seien hierbei die Darstellungen von Cohen-Tannoudji [Coh97] und Scheck [Sch96] ans Herz gelegt. Goldstein [Gol80] und Grawert [Gra88] hingegen geben einen mehr anschaulichen Zugang zu den jeweils beschriebenen Gebieten. Ein gut verständlicher Mittelweg ist durch die Werke von Nolting [Nol96, Nol97] gegeben.

### 1.1 Klassische Mechanik

Eine der ersten Fragen, die in den Anfängen der Physik gestellt wurde, war die nach der Möglichkeit der Beschreibung der Bewegung makroskopischer Körper. Im Laufe der Jahrhunderte wurden hierzu vier im wesentlichen äquivalente Beschreibungsmöglichkeiten und Formalismen entwickelt:

- Newtonsche Theorie
- Lagrangesche Theorie
- Hamiltonsche Theorie
- Hamilton-Jacobi Theorie.

Wir wollen hier nur kurz auf die Beschreibungen von Lagrange und Hamilton eingehen.

#### Lagrangesche Beschreibung

Eine in sich konsistente Beschreibung der klassischen Mechanik kann auf dem Hamiltonschen Prinzip aufgebaut werden. Wir wollen zunächst die Frage klären, welchen Weg

ein Teilchen einschlagen wird, wenn es in der Zeit  $t = t_2 - t_1$  vom Startpunkt  $q_1$  zum Endpunkt  $q_2$  gelangen muß. Hierzu betrachten wir das Wirkungsfunktional  $S(q)$ :

$$S(q) = \int_{t_1}^{t_2} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt. \quad (1.1)$$

Dabei ist  $q(t)$  eine Bahn, die die Randbedingungen  $q(t_1) = q_1$  und  $q(t_2) = q_2$  erfüllt, und  $L(q(t), \dot{q}(t), t)$  ist die Lagrangefunktion. Sie ist gegeben durch die Differenz aus kinetischer und potentieller Energie des betrachteten Systems

$$L(q(t), \dot{q}(t), t) = T(q(t), \dot{q}(t), t) - V(q(t), \dot{q}(t), t). \quad (1.2)$$

Das Hamiltonsche Prinzip besagt nun, daß die reale Bewegung eines Körpers zwischen den beiden Punkten  $q_1$  und  $q_2$  so abläuft, daß das Wirkungsfunktional  $S(q)$  extremal wird. Für die klassische Bahn nimmt  $S(q)$  also ein Extremum an, und notwendig hierfür ist das Verschwinden der ersten Variation von  $S(q)$ :

$$\delta S(q) = 0. \quad (1.3)$$

Durch Variation von Gleichung (1.1) erhalten wir dann unter Berücksichtigung der festen Endpunkte, das heißt  $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ , die Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0. \quad (1.4)$$

Wir haben uns hierbei auf Systeme ohne Zwangsbedingungen beschränkt. Die Euler-Lagrange-Gleichungen sind Differentialgleichungen zweiter Ordnung, und ihre Lösung  $q(t)$  beschreibt mit den Randbedingungen  $q(t_1) = q_1$  und  $q(t_2) = q_2$  die klassische Bahn.

### Hamiltonsche Beschreibung

Die Äquivalenz zwischen Differentialgleichungen zweiter Ordnung und einem System aus doppelt so vielen Differentialgleichungen erster Ordnung machen wir uns zunutze, um eine alternative Beschreibung der klassischen Mechanik zu erhalten. Zunächst führen wir die sogenannte Hamiltonfunktion  $H(p(t), q(t), t)$  ein. Sie geht durch eine Legendretransformation, die die Geschwindigkeit  $\dot{q}$  durch den kanonischen Impuls  $p = \partial L / \partial \dot{q}$  ersetzt, aus der Lagrangefunktion  $L$  hervor:

$$H(p(t), q(t), t) = p(t)\dot{q}(t) - L(q(t), \dot{q}(t), t). \quad (1.5)$$

Die Variablen Impuls  $p$  und Ort  $q$  sind – im Gegensatz zu  $\dot{q}$  und  $q$  – unabhängig. Aus dem Hamiltonschen Prinzip folgen dann wiederum durch Variation des Wirkungsfunktionals  $S(q)$  die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad \text{und} \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}. \quad (1.6)$$



Aus den Euler-Lagrangeschen Gleichungen werden also doppelt so viele Differentialgleichungen erster Ordnung, die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen. Die Lösung dieses Systems beschreibt eine Bahn im Phasenraum, der von den Impuls- und den Ortsachsen aufgespannt wird.

An diesem Punkt stellt sich die Frage, welche Vorteile die Hamiltonsche Theorie gegenüber ihren Vorgängern bietet. Sie liefert keine „neue“ Physik in dem Sinne, daß sie eine Erweiterung des Anwendungsbereichs der Lagrange-Formulierung erlaubt. Sie bietet aber ein „natürliches Sprungbrett“ zum Übergang in die Quantenmechanik. Beide Theorien (Quantenmechanik und Hamiltonsche Mechanik) können durch eine ähnliche mathematische Struktur beschrieben werden, was sich in der Äquivalenz zwischen Poissonklammern und den später noch zu erläuternden Kommutatoren ausdrückt.

### Poissonklammern

Um dies zu verdeutlichen, führen wir zunächst die Poissonklammer zweier Funktionen  $f(p, q)$  und  $g(p, q)$  ein:

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q}. \quad (1.7)$$

Hierbei müssen wir anmerken, daß die Definition (1.7) nicht in allen Lehrbüchern einheitlich ist. Sie kann sich noch um ein Vorzeichen unterscheiden. Aus der Definition folgen unmittelbar die Beziehungen  $\{q, q\} = 0$ ,  $\{p, p\} = 0$  und  $\{q, p\} = 1$ , die als fundamentale Poisson-Klammern bezeichnet werden. Durch die Einführung dieser Struktur kann die Zeitableitung einer Größe  $A(p, q, t)$  geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A(p, q, t) &= \frac{\partial A}{\partial q} \frac{dq}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial A}{\partial t} \\ &= \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial A}{\partial t} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Spezialfälle dieser Beziehung sind die Bewegungsgleichungen in der Form

$$\frac{dp}{dt} = \{p, H\} \quad \text{und} \quad \frac{dq}{dt} = \{q, H\}. \quad (1.9)$$

Klar ist, daß Konstanten  $K$  der Bewegung die Beziehung  $\{K, H\} = 0$  erfüllen.

Der Vorteil der Poissonklammer ist nun, daß ihr Wert unabhängig von dem Satz kanonischer Variablen ist, mit deren Hilfe sie ausgewertet wird. Dabei bezeichnen wir einen Variablensatz  $(p, q)$  dann als kanonisch, wenn für sie eine Hamiltonfunktion  $H$  existiert, so daß die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen gelten. Es stellt sich nun also die Frage, wie man ein gegebenes Problem in einem Variablensatz  $(p, q)$  auf einen zweiten kanonischen Variablensatz  $(P, Q)$  transformiert, so daß die Bewegungsgleichungen möglichst einfach werden.

## Erzeugende Funktionen

Zunächst führen wir den Begriff der Phasentransformation [Nol97] ein. Unter einer Phasentransformation versteht man eine Punkttransformation im Phasenraum:

$$Q = Q(p, q, t) \quad P = P(p, q, t). \quad (1.10)$$

Hierbei geht die Hamiltonfunktion  $H(p, q, t)$  in die Hamiltonfunktion  $\tilde{H}(P, Q, t)$  über. Wir bezeichnen die Transformation (1.10) als kanonisch, falls sich die Form der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen in den neuen Variablen  $(P, Q)$  und mit der neuen Hamiltonfunktion  $\tilde{H}(P, Q, t)$  nicht ändert. Es kann gezeigt werden, daß jede kanonische Transformation aus einer erzeugenden Funktion, die sowohl von einer „alten“ Variable  $(p, q)$  als auch einer „neuen“ Variable  $(P, Q)$  abhängt, gewonnen werden kann. Auf die Beschreibung der jeweils nur von einem Variablensatz abhängigen Generatoren  $F_5(p, q, t)$  und  $F_6(P, Q, t)$  soll hier verzichtet werden.

Da es vier verschiedene Kombinationen der alten und neuen Orts- und Impulsvariablen gibt, existieren auch vier verschiedene Typen von erzeugenden Funktionen oder Generatoren, die in der Literatur mit  $F_1$  bis  $F_4$  bezeichnet werden. Es gelten die Beziehungen

$$\begin{aligned} F_1(q, Q, t) : \quad p &= \frac{\partial F_1}{\partial q} & P &= -\frac{\partial F_1}{\partial Q} \\ F_2(q, P, t) : \quad p &= \frac{\partial F_2}{\partial q} & Q &= \frac{\partial F_2}{\partial P} \\ F_3(p, Q, t) : \quad q &= -\frac{\partial F_3}{\partial p} & P &= -\frac{\partial F_3}{\partial Q} \\ F_4(p, P, t) : \quad q &= -\frac{\partial F_4}{\partial p} & Q &= \frac{\partial F_4}{\partial P}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Die Generatoren  $F_i$  können jeweils durch eine Legendretransformation ineinander überführt werden. Da diese im zweiten Kapitel noch eine wichtige Rolle spielen werden, seien sie hier kurz angeführt:

$$\begin{aligned} F_2(q, P, t) &= F_1(q, Q(q, P, t), t) + PQ(q, P, t) \\ F_3(p, Q, t) &= F_1(q(p, Q, t), Q, t) - pq(p, Q, t) \\ F_4(p, P, t) &= F_1(q(p, P, t), Q(p, P, t), t) + PQ(p, P, t) - pq(p, P, t). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Die übrigen Transformationsformeln lassen sich aus diesen dreien direkt bestimmen.

Durch eine geeignete Wahl der kanonischen Transformation kann die Integration der Bewegungsgleichungen stark vereinfacht und in einigen Fällen sogar überflüssig gemacht werden. Ein Beispiel hierfür ist das Problem des Harmonischen Oszillators  $H = p^2/(2m) + m\omega^2 q^2/2$ , das durch die erzeugende Funktion  $F_1(q, Q) = m\omega q^2 \cot(Q)/2$  äußerst einfach gelöst werden kann. In den neuen Variablen lautet die Hamiltonfunktion  $\tilde{H}(P, Q, t) = \omega P$ , das heißt, die Variable  $Q$  ist nun zyklisch. Der zugehörige kanonische Impuls  $P$  ist damit konstant. Wie für eine gegebene Aufgabenstellung eine passende Transformation gefunden werden kann, ist ein zentraler Punkt der Hamilton-Jacobi-Theorie. Diese soll aber hier nicht näher erläutert werden.

## Der Satz von Liouville

Bisher betrachteten wir nur einzelne Bahnen im Phasenraum. Der Satz von Liouville liefert nun eine Aussage über die Dichteverteilung eines ganzen Ensembles von Bahnen im Phasenraum.

Er besagt, daß sich die Dichte  $\rho$  der Punkte im Phasenraum zeitlich nicht ändert, das heißt

$$\frac{d\rho}{dt} = \{\rho, H\} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0. \quad (1.13)$$

Der Satz von Liouville ist somit die Bewegungsgleichung der Phasenraumdichte. Er basiert auf der Invarianz des Phasenraummaßes unter kanonischen Transformationen. Auf eine andere Art formuliert heißt das, daß die Determinante der Jacobimatrix einer kanonischen Transformationen eins ist.

Betrachten wir den Fall statistischen Gleichgewichts ( $\partial\rho/\partial t = 0$ ), so folgt

$$\{\rho, H\} = 0. \quad (1.14)$$

Eine Konsequenz dieser Aussage ist, daß sich Bahnen im Phasenraum nicht schneiden können. Dies wird später im Zusammenhang mit dem Begriff der Kaustiken wichtig werden.

Zum Abschluß dieses kurzen Einblicks in die klassische Mechanik sei noch kurz auf die vorher erwähnte ähnliche mathematische Struktur von Quantenmechanik und Hamiltonscher klassischer Mechanik eingegangen.

## Das Korrespondenzprinzip

Der Übergang von der klassischen Mechanik in die Quantenmechanik ist folgendermaßen möglich:

- Meßbaren, physikalischen Größen  $A$ , sogenannten Observablen, werden in der Quantenmechanik hermitesche, lineare Operatoren  $\hat{A}$  zugeordnet, die auf dem Hilbertraum aller möglichen Zustände definiert sind.
- Die Meßwerte entsprechen dann den Eigenwerten bzw. den Erwartungswerten dieser Operatoren.
- Die fundamentale Poissonklammer  $\{q, p\} = 1$  wird ersetzt durch den Kommutator  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ , wobei  $\hbar$  das Plancksche Wirkungsquantum ist.
- Der Hamiltonfunktion  $H(p, q, t)$  ordnet man den Hamiltonoperator  $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t)$  zu.
- Die Bewegungsgleichung einer Observable wird zu  $d\hat{A}/dt = [\hat{A}, \hat{H}]/(i\hbar) + \partial\hat{A}/\partial t$ .

An diesem Punkt angekommen, empfiehlt es sich, einige Worte über die Grundlagen der Quantenmechanik zu verlieren.

## 1.2 Quantenmechanik

### Die Schrödingergleichung

Ein physikalisches System wird beschrieben durch eine Wellenfunktion  $\psi(q, t) = \langle q | \psi(t) \rangle$ , die Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = \hat{H} \psi(q, t) \quad (1.15)$$

ist. Hierbei ist  $\hat{H}$  der das System charakterisierende Hamiltonoperator, der im Fall eines Systems ohne elektromagnetischem Potential  $\hat{A}$  und nicht geschwindigkeitsabhängigem Potential  $\hat{V}$  die Form

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{q}, t) \quad (1.16)$$

besitzt. Die Größen  $\hat{p}$  und  $\hat{q}$  sind nun nicht mehr klassische Variablen, sondern, wie am Ende des Abschnitts über klassische Mechanik schon angedeutet, Operatoren. Aus der postulierten Vertauschungsrelation

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \quad (1.17)$$

folgen zum Beispiel für die Darstellung der Operatoren im Ortsraum, das heißt bezüglich einer Basis aus Eigenfunktionen des Ortsoperators  $\hat{q}$ , die Beziehungen

$$\hat{q} = q \quad \text{und} \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}. \quad (1.18)$$

### Meßwerte und Meßwahrscheinlichkeiten

Die Lösung  $\psi(q, t)$  der Schrödingergleichung wird als Amplitude einer Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(q, t)$  interpretiert

$$\rho(q, t) = |\psi(q, t)|^2, \quad (1.19)$$

wobei  $\rho(q, t)$  die Wahrscheinlichkeit angibt, bei einer Ortsmessung zur Zeit  $t$  das Teilchen am Ort  $q$  zu finden.

Betrachten wir nun andere physikalische Observablen  $A$  außer dem Ort, so sind deren mögliche Meßwerte Lösungen der Eigenwertgleichung

$$\hat{A} |\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle. \quad (1.20)$$

Die Eigenzustände  $\{|\phi_n\rangle\}$  bilden hierbei im allgemeinen ein vollständiges, orthonormiertes System. In dieser Basis kann ein physikalischer Zustand  $|\psi(t)\rangle$  entwickelt werden:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) |\phi_n\rangle \quad \text{mit} \quad c_n(t) = \langle \phi_n | \psi(t) \rangle. \quad (1.21)$$

Das Spektrum, das heißt die Menge der Eigenwerte von  $\hat{A}$ , wurde hierbei zur Vereinfachung der Notation als diskret vorausgesetzt. Aus dieser Darstellung wird klar, daß der Meßwert  $a_n$  im Zustand  $|\psi(t)\rangle$  mit der Wahrscheinlichkeit  $|c_n(t)|^2$  gemessen wird.

## Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

Ist der Hamiltonoperator  $\hat{H}$  nicht explizit von der Zeit  $t$  abhängig, so kann die zeitabhängige Schrödingergleichung durch den Ansatz

$$\psi(q, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \phi(q) \quad (1.22)$$

in einen Orts- und Zeitanteil separiert werden. Der Ortsanteil  $\phi(q)$  erfüllt dann die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\hat{H}\phi(q) = E\phi(q). \quad (1.23)$$

Eine Lösung der Schrödingergleichung in der Form (1.22) bezeichnet man als stationäre Lösung zur Eigenenergie  $E$ .

Die Menge aller Eigenenergien eines gegebenen Hamiltonoperators bezeichnet man als Spektrum. Es setzt sich zumeist aus einem diskreten Anteil für die im Potential  $\hat{V}$  gebundenen Zustände und einem kontinuierlichen Anteil für die Streuzustände zusammen.

## Der Propagator $\hat{U}(t)$

Hat man die Wellenfunktion  $|\psi(t)\rangle$  zu einem festen Zeitpunkt, zum Beispiel  $t = 0$ , gegeben, so stellt sich die Frage, wie sich diese im Laufe der Zeit entwickelt. Der den Anfangszustand  $|\psi(0)\rangle$  auf seine Zeitentwicklung  $|\psi(t)\rangle$  abbildende Operator heißt Zeitentwicklungsoperator oder Propagator  $\hat{U}(t)$ :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \quad (1.24)$$

mit der Anfangsbedingung

$$\hat{U}(0) = \mathbb{1}. \quad (1.25)$$

Da die Bewegungsgleichung des Zustands aber gerade die Schrödingergleichung ist, erfüllt  $\hat{U}(t)$  die Beziehung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t) = \hat{H}(t) \hat{U}(t). \quad (1.26)$$

Diese Differentialgleichung ist äquivalent zur Integralgleichung

$$\hat{U}(t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(\tau) \hat{U}(\tau) d\tau, \quad (1.27)$$

und damit erhält man den Propagator durch Iteration in Form der Dyson-Reihe

$$\hat{U}(t) = \hat{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(\tau) d\tau\right). \quad (1.28)$$

Der Operator  $\hat{T}$  ist hierbei der Zeitordnungsoperator. Im zeitunabhängigen Fall läßt sich  $\hat{U}(t)$  weiter auswerten. Der Zeitordnungsoperator  $\hat{T}$  ist dann ohne Wirkung, und es folgt unmittelbar

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right). \quad (1.29)$$

Beschränkt man sich auf Hamiltonoperatoren  $\hat{H}$  mit diskretem Spektrum  $\{E_n\}$  und Eigenzuständen  $\{|\phi_n\rangle\}$ , so kann man die Spektraldarstellung von  $\hat{U}(t)$  schreiben als

$$\hat{U}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) \hat{P}_n, \quad (1.30)$$

wobei  $\hat{P}_n = |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$  der Projektor auf den  $n$ -ten Eigenzustand ist. Es sei noch angemerkt, daß  $\hat{U}(t)$  ein unitärer Operator ist, der die Zeitumkehrrelation

$$\hat{U}^{-1}(t) = \hat{U}(-t) \quad (1.31)$$

erfüllt.

### Kohärente Zustände

Zum Abschluß dieser Einführung in die Quantenmechanik soll noch kurz auf besondere quantenmechanische Zustände, die erstmals 1926 von Schrödinger [Sch26] eingeführten kohärenten Zustände, eingegangen werden. Ein kohärenter Zustand  $|z\rangle$  ist ein normierter Eigenzustand zum Vernichtungsoperator  $\hat{a}$ :

$$\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle. \quad (1.32)$$

Der Vernichtungsoperator  $\hat{a}$  ist definiert durch

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{\hat{q}}{b} + i\frac{\hat{p}}{c} \right). \quad (1.33)$$

Zur Vereinfachung der Notation wurden die Abkürzungen  $b = 1/\sqrt{m\omega}$  und  $c = 1/b = \sqrt{m\omega}$  eingeführt. Der Vernichtungsoperator  $\hat{a}$  ist mit einem Harmonischen Oszillator  $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + m\omega^2\hat{q}^2/2 = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2)$  assoziiert. Man kann zeigen [Lou73], daß jeder kohärente Zustand  $|z\rangle$  gegeben ist durch die Beziehung

$$|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle, \quad (1.34)$$

wobei  $|0\rangle$  der Grundzustand des angesprochenen harmonischen Oszillators ist. Aus (1.34) folgert man unmittelbar, daß zwei verschiedene kohärente Zustände  $|z_2\rangle$  und  $|z_1\rangle$  nicht orthogonal sind, es gilt vielmehr

$$\langle z_2 | z_1 \rangle = e^{-\frac{1}{2}|z_2|^2 + z_2^* z_1 - \frac{1}{2}|z_1|^2}. \quad (1.35)$$

Nichtsdestotrotz bilden sie eine übervollständige Basis des Hilbertraums aller möglichen Zustände, das heißt

$$\mathbb{1} = \int \frac{d^2z}{\pi} |z\rangle\langle z|. \quad (1.36)$$

Interessant ist noch anzumerken, daß kohärente Zustände minimale Unschärfe besitzen, das heißt, sie erfüllen die Beziehung

$$\Delta p \Delta q = \frac{\hbar}{2} \quad (1.37)$$

mit  $\Delta p = \sqrt{\hbar\omega/2}$  und  $\Delta q = \sqrt{\hbar/(2\omega)}$ . Den komplexen Eigenwert  $z$  aus Gleichung (1.32) zerlegen wir nun in Real- und Imaginärteil:

$$z = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{q}{b} + i \frac{p}{c} \right). \quad (1.38)$$

Dabei sind  $q$  und  $p$  reelle Größen. Man kann beweisen, daß  $q$  und  $p$  gerade dem Orts- und Impulserwartungswert des kohärenten Zustandes  $|z\rangle$  entsprechen. Daher ist auch die Schreibweise  $|z\rangle = |p, q\rangle$  üblich. In der Ortsdarstellung

$$\langle x|z\rangle = (\pi\hbar b^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{1}{2\hbar b^2}(x-q)^2 + \frac{i}{\hbar}px - \frac{i}{\hbar}\frac{pq}{2}\right) \quad (1.39)$$

entspricht ein kohärenter Zustand im wesentlichen einem Gaußpaket.

### 1.3 Semiklassik

Die Semiklassik liefert einen durch die klassische Mechanik motivierten Zugang zur Quantenmechanik. Ziel ist es, quantenmechanische Größen wie zum Beispiel Wellenfunktionen durch klassische Größen auszudrücken. Wegen der späteren Verwendung wird kurz auf die semiklassische Methode der JWKB-Näherung [Wen26, Kra26] eingegangen und zuvor eine allgemeinere Methode beschrieben. Für einen weiteren Überblick sei auf die Literatur [Mas81, Chi91] verwiesen.

#### Allgemeiner semiklassischer Ansatz

Um für ein quantenmechanisches Problem eine semiklassische Näherung zu erhalten, müssen die folgenden vier Schritte durchgeführt werden:

- Zunächst werden die diskreten Quantenzahlen wie zum Beispiel die Drehimpulsquantenzahl  $l$  durch kontinuierliche Variablen ersetzt. Hierbei gehen Summen über Quantenzahlen in Integrale, genauer in Summen über Integrale, über die kontinuierlichen Größen über. Die Ersetzung der Summen durch Integrale ist dabei nicht willkürlich, sondern durch die Poissonsche Summationsformel gegeben. Dieser Schritt ist exakt.

- Die durch den ersten Schritt erhaltenen Integrale werden mittels der Methode der stationären Phase ausgewertet.
- Durch die Erweiterung der Lösungsmenge der klassischen, reellen Bewegungsgleichungen auf komplexe Lösungen können auch klassisch verbotene Prozesse wie zum Beispiel der Tunneleffekt näherungsweise beschrieben werden.
- Abschließend müssen noch eventuell auftretende Singularitäten in den durch obige Schritte gewonnenen Lösungen diskutiert werden. Ein Beispiel hierfür ist die Singularität der JWKB-Wellenfunktion erster Ordnung an klassischen Umkehrpunkten. Dieser Schritt ist in der Literatur unter dem Begriff der Uniformisierung bekannt.

### JWKB-Näherung

Diese von Jeffreys, Wentzel, Kramers und Brillouin entwickelte Methode liefert eine Näherungslösung für die quantenmechanische Wellenfunktion. Durch Einführung des klassischen Impulses

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (1.40)$$

kann die zeitunabhängige Schrödingergleichung mit  $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$  geschrieben werden als

$$\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + p^2(x) \psi(x) = 0. \quad (1.41)$$

Im feldfreien Fall ist der Impuls  $p$  konstant, und die Wellenfunktion hat die Form einer ebenen Welle

$$\psi(x) = Ae^{\pm \frac{i}{\hbar} px}. \quad (1.42)$$

Die JWKB-Methode geht nun von einem Ansatz

$$\psi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \quad (1.43)$$

für die Wellenfunktion aus, wobei die Größe  $S(x)$  die Dimension einer Wirkung besitzt.  $S(x)$  wird in eine Potenzreihe nach  $\hbar$  entwickelt

$$S(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n S_n(x) \quad (1.44)$$

und in die Schrödingergleichung eingesetzt. Die verschiedenen Ordnungen der JWKB-Näherung erhält man durch Koeffizientenvergleich der Potenzen  $\hbar^n$ . In nullter Näherung ergibt sich gerade die klassische Wirkung

$$S_0(x) = \int_{x_0}^x p(x') dx'. \quad (1.45)$$



Hieraus begründet sich auch die Aussage, daß die klassische Mechanik den  $\hbar \rightarrow 0$  - Grenzfall der Quantenmechanik darstellt, da in diesem Limes nur der Koeffizient  $S_0(x)$ , also die klassische Wirkung, bei der Potenzreihenentwicklung des Exponenten  $S(x)$  übrigbleibt.

Der Entwicklungskoeffizient von  $\hbar$  liefert die Bestimmungsgleichung für  $S_1(x)$ :

$$\frac{d}{dx} S_1(x) = \frac{i}{2} \frac{\frac{d^2}{dx^2} S_0(x)}{\frac{d}{dx} S_0(x)} = \frac{i}{2} \frac{d}{dx} \ln \left( \frac{dS_0(x)}{dx} \right). \quad (1.46)$$

Zusammen mit (1.45) erhält man dann direkt

$$S_1(x) = \frac{i}{2} \ln(p(x)). \quad (1.47)$$

Somit lautet die Wellenfunktion in der ersten Ordnung der JWKB-Näherung

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left( A_1 \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' \right) + A_2 \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' \right) \right). \quad (1.48)$$

In Bereichen, in denen keine klassischen Bahnen existieren, wird der Impuls  $p(x)$  imaginär, und  $\psi(x)$  reduziert sich, wie in der Quantenmechanik gefordert, auf eine abfallende Exponentialfunktion.

Die Frage nach der Gültigkeit der Näherung (1.48) läßt sich rasch beantworten: Aus Gleichung (1.48) ist direkt ersichtlich, daß die Näherung an klassischen Umkehrpunkten zusammenbricht. Dort verschwindet nämlich der Impuls  $p(x)$ , und die Näherungslösung wird singulär. Allgemeiner kann gezeigt werden, daß (1.48) nur dann eine brauchbare Approximation darstellt, wenn im betrachteten Bereich die Beziehung

$$\hbar \left| \frac{dp(x)}{dx} \right| \ll |p(x)|^2 \quad (1.49)$$

gilt. Dies ist äquivalent dazu, daß die de-Broglie-Wellenlänge  $\lambda = h/p$  des betrachteten Teilchens nur langsam über dem betrachteten Bereich variiert.

Der Versuch der Fortsetzung der Approximation (1.48) über klassische Umkehrpunkte hinaus führt zu einem Phasenkorrekturterm im Exponenten. Dieser ist mit dem Begriff des Maslov-Index [Mas72] verknüpft. In einem späteren Kapitel werden wir ein semiklassisches Verfahren kennenlernen, das diese Probleme umgeht.



# Kapitel 2

## Semiklassische Theorie nach Miller und Weissman

Wie bereits Dirac im Vorwort zu seinem Lehrbuch über Quantenmechanik [Dir58] schreibt, äußert sich der Zusammenhang zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik in der Beziehung zwischen kanonischen Transformationen auf der einen und unitären Transformationen auf der anderen Seite. Dieser Zusammenhang wird in diesem Kapitel sowohl für kanonische als auch für kohärente Variablen näher beleuchtet. Die erste Herleitung des in Kapitel (2.1) dargestellten Abschnitts wurde von Miller [Mil74] gegeben.

### 2.1 Korrespondenzrelationen nach Miller

Wie wir im ersten Kapitel gesehen haben, ist eine Stärke der klassischen Mechanik die Möglichkeit, mittels kanonischer Transformationen von einem Koordinatensatz auf einen anderen zu wechseln, ohne die Form der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen zu verändern. Bei geeigneter Wahl der neuen Koordinaten werden diese besonders einfach und somit leicht lösbar. Im Zentrum der Transformationen stehen deren Generatoren bzw. erzeugende Funktionen  $F_i$ , die die Koordinatensätze miteinander verknüpfen. Sie treten nur als Hilfsmittel dahingehend in Erscheinung zu gewährleisten, daß der neue Koordinatensatz kanonisch ist. Ihre tiefere Bedeutung wird durch den folgenden Abschnitt deutlich werden.

#### 2.1.1 Herleitung der Korrespondenzrelationen

Betrachtet man zwei Sätze von hermiteschen Variablen  $(p, q)$  und  $(P, Q)$ , das heißt kanonische Variablen, deren in der Quantenmechanik zugeordnete Operatoren hermitesch sind, so ergeben sich vier verschiedene gemischte Matrixelemente zwischen Eigenzuständen dieser Repräsentationen:

$$\langle q|Q\rangle \langle q|P\rangle \langle p|Q\rangle \langle p|P\rangle . \quad (2.1)$$

Das Betragsquadrat  $|\langle a|B\rangle|^2$  des Matrixelements  $\langle a|B\rangle$  gibt gerade die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand  $|B\rangle$  in den Zustand  $|a\rangle$  an und umgekehrt.

Ein Beispiel für ein kanonisches Variablenpaar sind Ort  $q$  und Impuls  $p$ . Obige Matrixelemente können als komplexe Zahlen in der folgenden Form dargestellt werden:

$$\begin{aligned}\langle q|Q\rangle &= A_1(q, Q) \exp\left(\frac{i}{\hbar}f_1(q, Q)\right) \\ \langle q|P\rangle &= A_2(q, P) \exp\left(\frac{i}{\hbar}f_2(q, P)\right) \\ \langle p|Q\rangle &= A_3(p, Q) \exp\left(\frac{i}{\hbar}f_3(p, Q)\right) \\ \langle p|P\rangle &= A_4(p, P) \exp\left(\frac{i}{\hbar}f_4(p, P)\right),\end{aligned}\tag{2.2}$$

wobei die Phasen  $f_i$  reell und die Amplituden  $A_i$  modulo einem konstanten Phasenfaktor reell und im folgenden zu bestimmen sind. Hierzu wird zunächst der das Überlappmatrixelement zwischen Eigenzuständen klassisch kanonisch konjugierter Variablen benötigt. Aus der Kommutatorrelation  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$  für klassisch kanonisch konjugierte Variablen folgt für diesen

$$\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}qp\right).\tag{2.3}$$

Dieses Ergebnis ist dem Leser zum Beispiel in Form der ebenen Welle wohlbekannt. Den physikalisch irrelevanten Phasenfaktor  $1/\sqrt{i}$  haben wir dabei zur Vereinfachung der späteren Rechnung eingeführt. Gleichung (2.3) gilt nun nicht nur für den Variablensatz  $(p, q)$ , sondern für jeden kanonischen Satz, insbesondere für  $(P, Q)$ . Wir haben also zusätzlich

$$\langle Q|P\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}QP\right).\tag{2.4}$$

Das Matrixelement  $\langle q|Q\rangle$  werden wir nun auf zwei Arten auswerten. Hierzu rufen wir uns in Erinnerung, daß der Identitätsoperator geschrieben werden kann als

$$\mathbb{1} = \int dp |p\rangle\langle p| = \int dP |P\rangle\langle P|.\tag{2.5}$$

In dieser Form fügen wir nun die Identität in das Matrixelement  $\langle q|Q\rangle$  ein. Wir erhalten:

$$\begin{aligned}\langle q|Q\rangle &= \int dp \langle q|p\rangle\langle p|Q\rangle = \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}qp\right) \langle p|Q\rangle \\ \langle q|Q\rangle &= \int dP \langle q|P\rangle\langle P|Q\rangle = \int dP \frac{1}{\sqrt{-2\pi i\hbar}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}QP\right) \langle q|P\rangle.\end{aligned}\tag{2.6}$$

Mittles des Ansatzes (2.2) schreibt sich dies nun in der Form

$$\begin{aligned}
 A_1(q, Q) \exp\left(\frac{i}{\hbar} f_1(q, Q)\right) &= \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} qp\right) A_3(p, Q) \exp\left(\frac{i}{\hbar} f_3(p, Q)\right) \\
 A_1(q, Q) \exp\left(\frac{i}{\hbar} f_1(q, Q)\right) &= \int dP \frac{1}{\sqrt{-2\pi i \hbar}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} QP\right) A_2(q, P) \exp\left(\frac{i}{\hbar} f_2(q, P)\right).
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

Diese beiden Integrale werten wir nun näherungsweise mittels der Methode der stationären Phase (vergleiche Kapitel A.2.1) aus. Die eingeführte Näherung wird im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  korrekt. Die Bedingungen für die stationären Punkte lauten

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f_3}{\partial p} + q &= 0 \\
 \frac{\partial f_2}{\partial P} - Q &= 0.
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

Hieraus ergibt sich dann für die Amplituden

$$\begin{aligned}
 A_1(q, Q) &= A_3(p, Q) \left(\frac{\partial^2 f_3(p, q)}{\partial p^2}\right)^{-1/2} \\
 A_1(q, Q) &= A_2(q, P) \left(-\frac{\partial^2 f_2(q, P)}{\partial P^2}\right)^{-1/2}
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

und die Phasen

$$\begin{aligned}
 f_1(q, Q) &= f_3(p, Q) + pq \\
 f_1(q, Q) &= f_2(q, P) - PQ.
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Hierbei sind wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit davon ausgegangen, daß jeweils nur ein Punkt stationärer Phase existiert. Die Gleichungen (2.8) und (2.10) lassen nun schon erahnen, welche Verbindung hier zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik entsteht. Es scheint, als würden die Phasen  $f_i$  die gleichen Relationen erfüllen wie die klassischen Generatoren  $F_i$ . Um dies zu untermauern, führen wir analoge Überlegungen für die nun folgenden Matrixelemente durch. Zusätzlich zu (2.8) und (2.10) lassen sich aus den Identitäten

$$\begin{aligned}
 \langle q|P\rangle &= \int dQ \langle q|Q\rangle \langle Q|P\rangle \\
 \langle q|P\rangle &= \int dp \langle q|p\rangle \langle p|P\rangle \\
 \langle p|Q\rangle &= \int dq \langle p|q\rangle \langle q|Q\rangle \\
 \langle p|Q\rangle &= \int dP \langle p|P\rangle \langle P|Q\rangle \\
 \langle p|P\rangle &= \int dq \langle p|q\rangle \langle q|P\rangle \\
 \langle p|P\rangle &= \int dQ \langle p|Q\rangle \langle Q|P\rangle
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

weitere Beziehungen zwischen den Phasenfunktionen  $f_i$  herleiten. Wiederum durch Anwendung der Methode der stationären Phase erhalten wir

$$\begin{aligned}
f_2(q, P) &= f_1(q, Q) + QP \\
f_2(q, P) &= f_4(p, P) + qp \\
f_3(p, Q) &= f_1(q, Q) - qp \\
f_3(p, Q) &= f_4(p, P) - QP \\
f_4(p, P) &= f_2(q, P) - qp \\
f_4(p, P) &= f_3(p, Q) + QP.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Die zugehörigen Bedingungen für die stationäre Phase sind

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f_1}{\partial Q} + P &= 0 \\
\frac{\partial f_4}{\partial p} + q &= 0 \\
\frac{\partial f_1}{\partial q} - p &= 0 \\
\frac{\partial f_4}{\partial P} - Q &= 0 \\
\frac{\partial f_2}{\partial q} - p &= 0 \\
\frac{\partial f_3}{\partial Q} + P &= 0.
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Wie man nun sieht, erfüllen die Phasenfunktionen  $f_i$  im Rahmen der stationären Phase exakt die gleichen Beziehungen wie die klassischen erzeugenden Funktionen  $F_i$  (1.11) und können damit mit diesen identifiziert werden. **Die Phasenfunktionen  $f_i$  sind im klassischen Limes die klassischen erzeugenden Funktionen  $F_i$ .**

Unbestimmt bleiben weiterhin die Amplituden  $A_i$ . Zwar liefern die Gleichungen (2.11) sechs weitere Beziehungen für diese, sie können hieraus aber noch nicht eindeutig bestimmt werden. Betrachten wir hierzu einmal die Gleichung

$$\langle p|q \rangle = \int dQ \langle p|Q \rangle \langle Q|q \rangle \tag{2.14}$$

etwas näher. Die Beziehungen (2.2) und (2.3) eingesetzt liefert

$$\frac{1}{\sqrt{-2\pi i \hbar}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} qp\right) = \int dQ A_1^*(q, Q) A_3(p, Q) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(f_3(p, Q) - f_1(q, Q))\right). \tag{2.15}$$

Werten wir auch dieses Integral durch die Methode der stationären Phase aus, so erhalten wir

- für die Amplitude

$$\frac{1}{2\pi \hbar} = A_1^*(q, Q) A_3(p, Q) \left( \frac{\partial^2 f_3}{\partial Q^2} - \frac{\partial^2 f_1}{\partial Q^2} \right)^{-1/2}, \tag{2.16}$$

- für die Phase

$$-qp = f_3(p, Q) - f_1(q, Q) \quad (2.17)$$

und

- als Bedingung

$$\frac{\partial f_3}{\partial Q} - \frac{\partial f_1}{\partial Q} = 0. \quad (2.18)$$

Gleichung (2.16) kann nun genutzt werden, um zusammen mit den Beziehungen (2.9) die Amplituden  $A_i$  vollständig zu bestimmen. Aus den beiden genannten Gleichungen folgt unmittelbar

$$|A_1(q, Q)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \left( -\frac{\partial^2 f_1}{\partial q^2} \right)^{1/2} \left( \frac{\partial^2 f_3}{\partial Q^2} - \frac{\partial^2 f_1}{\partial Q^2} \right)^{1/2} \quad (2.19)$$

Hierbei müssen wir berücksichtigen, von welchen Variablen die jeweiligen Funktionen abhängen ( $f_1 = f_1(q, Q)$ ,  $f_3 = f_3(p, Q)$ ). Differenzieren wir die Bedingung der stationären Phase (2.18) nach  $Q$ , so erhalten wir eine Beziehung zwischen den zweiten  $Q$ -Ableitungen von  $f_1$  und  $f_3$ :

$$\frac{\partial^2 f_3(p, Q)}{\partial Q^2} = \frac{\partial^2 f_1(q, Q)}{\partial Q^2} + \frac{\partial^2 f_1(q, Q)}{\partial q \partial Q} \frac{\partial q}{\partial Q}. \quad (2.20)$$

Aus der Gleichung  $p = \partial f_1(q, Q)/\partial q$  folgt im Falle  $p = \text{const.}$  die Beziehung

$$\frac{\partial q}{\partial Q} = -\frac{\partial^2 f_1(q, Q)}{\partial q \partial Q} / \frac{\partial^2 f_1(q, Q)}{\partial q^2}. \quad (2.21)$$

Setzen wir dies in Gleichung (2.19) ein, so ergibt sich

$$|A_1(q, Q)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 f_1(q, Q)}{\partial q \partial Q}. \quad (2.22)$$

Auf vollkommen analoge Weise erhalten wir für  $A_2$  bis  $A_4$

$$\begin{aligned} |A_2(q, P)|^2 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 f_2(q, P)}{\partial q \partial P} \\ |A_3(p, Q)|^2 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 f_3(p, Q)}{\partial p \partial Q} \\ |A_4(p, P)|^2 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 f_4(p, P)}{\partial p \partial P}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Damit sind die Amplituden  $A_i$  bis auf einen Phasenfaktor eindeutig bestimmt. Obwohl diese Phase physikalisch irrelevant ist, läßt sie sich im Rahmen dieses Kapitels konsistent festlegen. Betrachten wir nämlich die Transformationen, die in der klassischen Mechanik als Identitäts-Transformationen bezeichnet werden,

$$F_2(q, P) = qP \quad \text{und} \quad F_3(p, Q) = -pQ, \quad (2.24)$$

so erhalten wir genau dann die Gleichungen (2.3) und (2.4), wenn wir

$$\begin{aligned} A_2(q, P) &= \left( \frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 f_2(q, P)}{\partial q \partial P} \right)^{1/2} \\ A_3(p, Q) &= \left( \frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 f_3(p, Q)}{\partial p \partial Q} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (2.25)$$

wählen. Aus Gleichung (2.9) folgt dann

$$\begin{aligned} A_1(q, Q) &= \left( \frac{1}{-2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 f_1(q, Q)}{\partial q \partial Q} \right)^{1/2} \\ A_4(p, P) &= \left( \frac{1}{-2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 f_4(p, P)}{\partial p \partial P} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Zusammenfassend erhalten wir also in semiklassischer Näherung für die Übergangsmatrixelemente zwischen Eigenzuständen hermitescher Variablen

$$\begin{aligned} \langle q|Q \rangle &= \left( -\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial F_1(q, Q)}{\partial q \partial Q} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{iF_1(q, Q)}{\hbar} \right) \\ \langle q|P \rangle &= \left( \frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial F_2(q, P)}{\partial q \partial P} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{iF_2(q, P)}{\hbar} \right) \\ \langle p|Q \rangle &= \left( \frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial F_3(p, Q)}{\partial p \partial Q} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{iF_3(p, Q)}{\hbar} \right) \\ \langle p|P \rangle &= \left( -\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial F_4(p, P)}{\partial p \partial P} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{iF_4(p, P)}{\hbar} \right). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Hierbei haben wir die Phasenfunktionen  $f_i$  durch die klassischen Generatoren  $F_i$  ersetzt.

Bisher betrachteten wir nur Übergangsmatrixelemente zwischen Eigenzuständen hermitescher Variablen, das heißt zwischen Variablen, deren quantenmechanisches Analogon hermitesche Operatoren sind. Da sich unsere weiteren Überlegungen im dritten Kapitel aber auf Übergangsmatrixelemente zwischen kohärenten Zuständen beziehen werden, ist es notwendig, auch deren semiklassisches Äquivalent zu diskutieren. Erste Ansätze hierzu wurden von Heller [Hel77] entwickelt und später von Weissman [Wei82] vervollständigt. Diese Ideen sollen die Thematik der folgenden Abschnitte sein.



## 2.2 Die kohärente Transformation

Ausgehend von den hermiteschen Variablen  $(p, q)$  kann man mittels der folgenden Definitionen einen neuen kanonischen Variablensatz  $(P, Q)$  erzeugen:

$$\begin{aligned} Q &= \left(\frac{1}{2i}\right)^{1/2} \left(\frac{q}{b} - i\frac{p}{c}\right) \\ P &= \left(\frac{1}{2i}\right)^{1/2} \left(\frac{q}{b} + i\frac{p}{c}\right). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Hierbei ist  $b = 1/c = 1/\sqrt{m\omega}$ . Die Kanonizität des neuen Variablensatzes kann leicht mit Hilfe der fundamentalen Poissonklammern verifiziert werden. Aufgrund der Analogie zur Definition der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$  bezeichnet man obige Transformation als kohärente Transformation. Ersetzen wir nämlich in Gleichung (2.28)  $(p, q)$  durch die ihnen zugeordneten quantenmechanischen Operatoren  $(\hat{p}, \hat{q})$ , so folgt unmittelbar

$$\hat{Q} = (-i\hbar)^{1/2}\hat{a}^\dagger \quad \hat{P} = (-i\hbar)^{1/2}\hat{a}. \quad (2.29)$$

In natürlicher Weise läßt sich die kohärente Transformation aus einer erzeugenden Funktion gewinnen. Ihr Generator in der  $F_1(q, Q)$ -Form ist

$$F_1(q, Q) = i \left[ -\frac{q^2}{2b^2} + (2i)^{1/2} \frac{q}{b} Q - \frac{i}{2} Q^2 \right]. \quad (2.30)$$

Drücken wir  $Q$  und  $P$  durch reelle Variablen  $q_r$  und  $p_r$  aus

$$\begin{aligned} Q &= \left(\frac{1}{2i}\right)^{1/2} \left(\frac{q_r}{b} - i\frac{p_r}{c}\right) \\ P &= \left(\frac{1}{2i}\right)^{1/2} \left(\frac{q_r}{b} + i\frac{p_r}{c}\right), \end{aligned} \quad (2.31)$$

so ergibt sich für Gleichung (2.30)

$$F_1 = i \left[ -\frac{(q - q_r)^2}{2b^2} - i \left( p_r q - \frac{p_r q_r}{2} \right) + \frac{1}{2} |Q|^2 \right]. \quad (2.32)$$

Aufgrund der Eigenschaft (2.29) sind die Eigenzustände der Operatoren  $\hat{Q}$  und  $\hat{P}$  schon aus dem ersten Kapitel bekannt, es handelt sich um die kohärenten Zustände. Vergleich der dort gewonnenen Gleichung (1.39)

$$\langle q|z\rangle = (\pi\hbar b^2)^{-1/4} \exp \left( -\frac{1}{2\hbar b^2} (q - q_r)^2 + \frac{i}{\hbar} p_r q - \frac{i}{\hbar} \frac{p_r q_r}{2} \right) \quad (2.33)$$

mit (2.32) liefert

$$\langle Q|q\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{-2\pi i \hbar}} \left( \frac{\partial^2 F_1}{\partial Q \partial q} \right)^{1/2} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} F_1 - \frac{1}{2\hbar} |Q|^2 \right). \quad (2.34)$$

Allgemein gilt für die Übergangsmatrixelemente einer kohärenten Transformation

$$\langle u|v\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{-2\pi i}} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial u \partial v} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} F - \frac{1}{2\hbar} |x|^2 \right), \quad (2.35)$$

wobei  $F$  der Generator ist, der  $u$  als alte und  $v$  als neue Variable enthält und  $x$  der kohärenten Variable entspricht. Damit ist nun auch der semiklassische Ausdruck zwischen Eigenzuständen von Operatoren, die kohärenten und hermiteschen Variablen zugeordnet sind, bekannt.

## 2.3 Matrixelemente zwischen kohärenten Zuständen

Um einen Ausdruck für die Übergangsmatrixelemente zwischen kohärenten Zuständen zu gewinnen, bedarf es einiger Vorüberlegungen. Der Gang der Handlung wird der folgende sein: Zunächst wird eine allgemeine Formel zur Berechnung von Matrixelementen, die einer Kette von kanonischen Transformationen entsprechen, hergeleitet und anschließend das so gewonnene Ergebnis auf einen Spezialfall angewendet, aus dem sich das gewünschte Übergangsmatrixelement ergibt.

### 2.3.1 Betrachtung einer Kette kanonischer Transformationen

Es seien  $G_j$  die Generatoren kanonischer Transformationen und  $G^{(n)}$  der Generator der Transformation, der der Hintereinanderausführung aller  $G_j$  entspricht, d. h.

$$\begin{aligned} (p_1, q_1) &\xrightarrow{G_1} (p_2, q_2) \xrightarrow{G_2} \dots \xrightarrow{G_{n-1}} (p_n, q_n) \\ (p_1, q_1) &\xrightarrow{G^{(n)}} (p_n, q_n). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Die Behauptung ist nun, daß bei der Berechnung des Matrixelements zwischen Eigenzuständen des ersten Variablensatzes  $(p_1, q_1)$  und Eigenzuständen des letzten Variablensatzes  $(p_n, q_n)$  die Kette der Transformationen  $G_j$  durch  $G^{(n)}$  ersetzt werden kann, das heißt

$$\int \left[ \prod_{j=1}^{n-1} \langle b_j | b_{j+1} \rangle \right] \prod_{j=2}^{n-1} db_j = \langle b_1 | b_n \rangle. \quad (2.37)$$

Hierbei wird jedes Übergangsmatrixelement in der Gleichung ersetzt durch seine semiklassische Näherung. Setzen wir diese in Gleichung (2.37) ein, so erhalten wir die zu beweisende Gleichung

$$\int \left[ \prod_{j=1}^{n-1} \left( -\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 G_j}{\partial b_j \partial b_{j+1}} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} G_j \right) \right] \prod_{j=2}^{n-1} db_j = \left( -\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 G^{(n)}}{\partial b_1 \partial b_n} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} G^{(n)} \right) \quad (2.38)$$

mit  $n > 2$ . Die  $b_j$  stehen dabei wahlweise für eine „Orts“- oder „Impuls“-Variable:

$$b_j \in \{p_j, q_j\}. \quad (2.39)$$

Alle in Gleichung (2.38) auftretenden Integrale sind mit der Methode der stationären Phase auszuwerten.

Der Beweis der obigen Aussage erfolgt über vollständige Induktion.

- Induktionsanfang:  $n = 3$

Im Fall  $n = 3$  stellt sich unser Problem folgendermaßen dar:

$$\begin{aligned} & \int \left( \frac{\partial^2 G_1}{\partial b_1 \partial b_2} \frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2 \partial b_3} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} (G_1 + G_2) \right) db_2 \\ &= \left( 2\pi i \hbar \frac{\partial^2 G_1}{\partial b_1 \partial b_2} \frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2 \partial b_3} \right)^{1/2} \left( \frac{\partial^2 G_1}{\partial b_2^2} + \frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2^2} \right)^{-1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} (G_1 + G_2) \right) \end{aligned} \quad (2.40)$$

Das Integral wurde hierbei mit der Methode der stationären Phase ausgewertet. Die dazu notwendige Bedingung lautet

$$\frac{\partial G_1}{\partial b_2} + \frac{\partial G_2}{\partial b_2} = 0. \quad (2.41)$$

Somit ist  $b_2$  eine Funktion von  $b_1$  und  $b_3$

$$b_2 = b_2(b_1, b_3). \quad (2.42)$$

Es ist nun zu zeigen, daß der Generator  $G^{(3)}$  gerade die Summe der beiden anderen ist, das heißt

$$G^{(3)} = G_1 + G_2. \quad (2.43)$$

Für die partiellen Ableitungen von  $G^{(3)}$  erhalten wir mit (2.41)

$$\begin{aligned} \frac{\partial G^{(3)}}{\partial b_1} &= \frac{\partial G_1}{\partial b_1} + \frac{\partial b_2}{\partial b_1} \left( \frac{\partial G_1}{\partial b_2} + \frac{\partial G_2}{\partial b_2} \right) = \frac{\partial G_1}{\partial b_1} \\ \frac{\partial G^{(3)}}{\partial b_2} &= \frac{\partial G_1}{\partial b_2} + \frac{\partial G_2}{\partial b_2} = 0 \\ \frac{\partial G^{(3)}}{\partial b_3} &= \frac{\partial G_2}{\partial b_3} + \frac{\partial b_2}{\partial b_3} \left( \frac{\partial G_1}{\partial b_2} + \frac{\partial G_2}{\partial b_2} \right) = \frac{\partial G_2}{\partial b_3} \end{aligned} \quad (2.44)$$

Aus der Bedingung für die stationäre Phase lassen sich die Ableitungen  $\partial b_2 / \partial b_1$  und  $\partial b_2 / \partial b_3$  berechnen. Es folgt unmittelbar

$$\begin{aligned} \frac{\partial b_2}{\partial b_1} &= - \frac{\frac{\partial^2 G_1}{\partial b_1 \partial b_2}}{\frac{\partial^2 G_1}{\partial b_2^2} + \frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2^2}} \\ \frac{\partial b_2}{\partial b_3} &= - \frac{\frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2 \partial b_3}}{\frac{\partial^2 G_1}{\partial b_2^2} + \frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2^2}}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Diese Beziehungen werden benötigt, um  $\frac{\partial^2 G^{(3)}}{\partial b_1 \partial b_3}$  zu berechnen. Im einzelnen ergeben sich die folgenden Schritte:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 G^{(3)}}{\partial b_1 \partial b_3} &= \frac{\partial}{\partial b_1} \left[ \left( \frac{\partial G_1}{\partial b_2} + \frac{\partial G_2}{\partial b_2} \right) \frac{\partial b_2}{\partial b_3} + \frac{\partial G_2}{\partial b_3} \right] \\
&= \left( \frac{\partial G_1}{\partial b_2} + \frac{\partial G_2}{\partial b_2} \right) \frac{\partial^2 b_2}{\partial b_1 \partial b_3} + \frac{\partial b_2}{\partial b_3} \left( \frac{\partial^2 G_1}{\partial b_1 \partial b_2} + \frac{\partial^2 G_1}{\partial b_2^2} \frac{\partial b_2}{\partial b_1} + \frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2^2} \frac{\partial b_2}{\partial b_1} \right) + \frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2 \partial b_3} \frac{\partial b_2}{\partial b_1} \\
&= \frac{\partial G_1}{\partial b_1 \partial b_2} \frac{\partial b_2}{\partial b_3} + \frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2 \partial b_3} \frac{\partial b_2}{\partial b_1} + \left( \frac{\partial^2 G_1}{\partial b_2^2} + \frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2^2} \right) \frac{\partial b_2}{\partial b_1} \frac{\partial b_2}{\partial b_3} \\
&= \left[ -\frac{\partial G_1}{\partial b_1 \partial b_2} \frac{\partial G_2}{\partial b_2 \partial b_3} - \frac{\partial G_1}{\partial b_1 \partial b_2} \frac{\partial G_2}{\partial b_2 \partial b_3} + \frac{\partial G_1}{\partial b_1 \partial b_2} \frac{\partial G_2}{\partial b_2 \partial b_3} \right] \left[ \frac{\partial^2 G_1}{\partial b_2^2} + \frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2^2} \right]^{-1} \\
&= -\frac{\partial G_1}{\partial b_1 \partial b_2} \frac{\partial G_2}{\partial b_2 \partial b_3} \left[ \frac{\partial^2 G_1}{\partial b_2^2} + \frac{\partial^2 G_2}{\partial b_2^2} \right]^{-1} \tag{2.46}
\end{aligned}$$

Setzen wir dieses Resultat in Gleichung (2.40) ein, so ist der Induktionsanfang gezeigt.

- Induktionsvoraussetzung: Die Behauptung sei bewiesen bis  $n - 2$ .
- Induktionsschritt:  $n - 2 \rightarrow n - 1$

$$\begin{aligned}
&\int \left[ \prod_{j=1}^{n-1} \left( -\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 G_j}{\partial b_j \partial b_{j+1}} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} G_j \right) \right] \prod_{j=2}^{n-1} db_j \stackrel{IV}{=} \\
&\int \left( -\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 G^{(n-1)}}{\partial b_1 \partial b_{n-1}} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} G^{(n-1)} \right) \left( -\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 G_{n-1}}{\partial b_{n-1} \partial b_n} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} G_{n-1} \right) db_{n-1} = * \tag{2.47}
\end{aligned}$$

Das nun verbleibende Integral wird analog zum Induktionsanfang ausgewertet. Wir erhalten:

$$* = \left( -\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 G^{(n)}}{\partial b_1 \partial b_n} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} G^{(n)} \right) \tag{2.48}$$

Damit ist alles bewiesen. Wir wissen nun, daß wir auch in der semiklassischen Näherung für die Berechnung eines Übergangsmatrixelementes eine Kette kanonischer Transformationen durch eine einzige ersetzen können.

### 2.3.2 Spezialfall

Nach der im vorigen Abschnitt bewiesenen Formel gilt für eine Kette kanonischer Transformationen im Fall  $n = 4$

$$\begin{aligned}
&\int \left( -\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 G_1}{\partial b_1 \partial b_2} \right)^{1/2} \left( -\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 G_3}{\partial b_3 \partial b_4} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} (G_1 + G_3) \right) \langle b_2 | b_3 \rangle db_2 db_3 \\
&= \left( -\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 G}{\partial b_1 \partial b_4} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} G \right). \tag{2.49}
\end{aligned}$$

Diese Gleichung wird nun mit

$$(-2\pi i \hbar)^{1/2} \exp\left(-\frac{|b_1|^2}{2\hbar} - \frac{|b_4|^2}{2\hbar}\right) \quad (2.50)$$

multipliziert. Sie lautet dann

$$\begin{aligned} & \int \left(-\frac{1}{2\pi i}\right)^{1/4} \left(\frac{\partial^2 G_1}{\partial b_1 \partial b_2}\right)^{1/2} \left(-\frac{1}{2\pi i}\right)^{1/4} \left(\frac{\partial^2 G_3}{\partial b_3 \partial b_4}\right)^{1/2} \\ & \exp\left(\frac{i}{\hbar} G_1 - \frac{|b_1|}{2\hbar}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} G_3 - \frac{|b_4|}{2\hbar}\right) \langle b_2 | b_3 \rangle db_2 db_3 \\ & = \left(\frac{\partial^2 G}{\partial b_1 \partial b_4}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} G - \frac{|b_1|^2}{2\hbar} - \frac{|b_4|^2}{2\hbar}\right). \end{aligned} \quad (2.51)$$

Betrachten wir nun die Kette der Transformationen

$$(P_1, Q_1) \xrightarrow[\text{Transformation}]{\text{kohärente}} (p_2, q_2) \xrightarrow[\text{Transformation}]{\text{kanonische}} (p_3, q_3) \xrightarrow[\text{Transformation}]{\text{kohärente}} (P_4, Q_4) \quad (2.52)$$

und identifizieren

$$\begin{aligned} b_1 &= Q_1 & b_2 &= q_2 & b_3 &= q_3 & b_4 &= P_4 \\ G_1 &= -F_1(Q_1, q_2) & G_3 &= F_2(q_3, P_4) & G &= F(Q_1, P_4), \end{aligned} \quad (2.53)$$

so entspricht  $G_1$  einer inversen kohärenten Transformation und  $G_3$  einer kohärenten Transformation. Damit wird aus Gleichung (2.51)

$$\begin{aligned} & \int \langle Q_1 | q_2 \rangle \langle q_2 | q_3 \rangle \langle q_3 | P_4 \rangle dq_2 dq_3 \\ & = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial Q_1 \partial P_4}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} F - \frac{|Q_1|^2}{2\hbar} - \frac{|P_4|^2}{2\hbar}\right) \end{aligned} \quad (2.54)$$

bzw.

$$\langle Q_1 | P_4 \rangle = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial Q_1 \partial P_4}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} F - \frac{|Q_1|^2}{2\hbar} - \frac{|P_4|^2}{2\hbar}\right). \quad (2.55)$$

Es ist noch wichtig darauf hinzuweisen, dass dies die einzig sinnvolle Wahl für eine Kombination der alten Variablen  $(P_1, Q_1)$  und der neuen Variablen  $(P_4, Q_4)$  darstellt, da weder eine linke Eigenfunktion von  $\hat{P}_1$  noch eine rechte Eigenfunktion von  $\hat{Q}_4$  existiert, ergo bleibt nur das oben diskutierte Matricelement übrig, und  $F$  muß ein Generator vom  $F_2$ -Typ sein.

### 2.3.3 Die dynamische Transformation

Als Anwendungsbeispiel soll nun die Transformation diskutiert werden, die der quantenmechanischen Zeitentwicklung entspricht. Bekanntlich wird die Zeitevolution in der klassischen Mechanik durch die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{Q} = \frac{\partial H}{\partial P} \quad \text{und} \quad \dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial Q} \quad (2.56)$$

beschrieben. Der  $F_2$ -Generator für diese Transformation entspricht gerade der klassischen Wirkung inklusive eines Randterms [Gol80]

$$F_2(Q_f, P_i) = \int_0^t P(\tau) \dot{Q}(\tau) - H(Q(\tau), P(\tau), \tau) d\tau + Q_i P_i = S + Q_i P_i. \quad (2.57)$$

Das Übergangsmatrixelement erhalten wir durch Einsetzen dieses Generators  $F_2$  in Gleichung (2.55). Die semiklassische Näherung für die Kreuzkorrelationsfunktion der beiden kohärenten Zustände  $|Q_f\rangle$  und  $|P_i\rangle$  lautet dann

$$\langle Q_f | \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) | P_i \rangle = \left(\frac{\partial^2 S}{\partial Q_f \partial P_i}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S + \frac{i}{\hbar} Q_i P_i - \frac{1}{2\hbar} (|Q_f|^2 + |P_i|^2)\right). \quad (2.58)$$

Wir werden im nächsten Kapitel eine analoge Formel via Pfadintegralmethoden herleiten. Dies ist ein grundlegend anderer Zugang zur Semiklassik, bei dem andere Probleme der Semiklassik in den Vordergrund treten werden.

## 2.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde ein Überblick über die Semiklassik nach Miller und Weissman gegeben. Beide Ansätze gehen vom Begriff der Korrespondenzrelation aus. Eine Korrespondenzrelation ordnet hierbei einer unitären Transformation in der Quantenmechanik eine klassische kanonische Transformation zu. Durch Auswertung dieser Verknüpfung können Näherungslösungen für quantenmechanische Übergangsmatrixelemente gefunden werden. Dabei muß beachtet werden, von welchem Typ die Operatoren sind (hermitesch, „kohärent“) bezüglich deren Eigenzustände die Matrixelemente berechnet werden. Je nach Art dieser Operatoren ist der semiklassische Ansatz verschieden. Zum Abschluß wurde die semiklassische Näherung für die Zeitentwicklung eines kohärenten Zustands bestimmt.

# Kapitel 3

## Der Herman-Kluk-Propagator

In diesem zentralen Kapitel wird zum ersten Mal eine vollständige Herleitung des „coherent state“-Propagators und hieraus des Herman-Kluk-Propagators [Her84] über Pfadintegralmethoden gegeben. Ausgehend von einer Darstellung des Zeitentwicklungsoperators bezüglich einer Basis aus kohärenten Zuständen wird eine Form des Propagators gefunden, die mit der semiklassischen, von Weissman [Wei82] bestimmten übereinstimmt. Aus dieser Form der Herleitung wird klar, daß eines der zentralen Probleme der Semiklassik in der Frage liegt, welche Hamiltonfunktion einem gegebenen Hamiltonoperator zuzuordnen ist. Durch Umschreiben des so erhaltenen Ausdrucks in die Ortsdarstellung und Integration über die Endzustände wird die endgültige Form des Herman-Kluk-Propagators hergeleitet.

Weiterhin werden wir auf die Frage eingehen, wie der Fehler abgeschätzt werden kann, der durch die semiklassische Approximation eingeführt wird. Der darauf folgende Abschnitt wird sich mit den Eigenschaften dieser semiklassischen Näherung (Unitarität, Zeitumkehr) befassen. Abschließend wird der Propagator für den Harmonischen Oszillator ausgewertet, wobei wir sehen werden, daß er für diesen Fall wie erwartet exakt ist.

### 3.1 Zeitentwicklung kohärenter Zustände

Die zeitliche Entwicklung eines kohärenten Zustandes wird durch den quantenmechanischen Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(t)$  beschrieben

$$K(z'', t; z', 0) = \langle z'' | \hat{U}(t) | z' \rangle = \langle z'' | \hat{T} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(\tau) d\tau \right) | z' \rangle, \quad (3.1)$$

wobei  $\hat{T}$  der Zeitordnungsoperator ist. Etwas einfacher wird Gleichung (3.1) für zeitunabhängige Systeme. Sie lautet dann

$$K(z'', t; z', 0) = \langle z'' | \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right) | z' \rangle. \quad (3.2)$$

Die kohärenten Zustände  $|z'\rangle$  und  $|z''\rangle$  sind gegeben durch

$$|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle, \quad (3.3)$$

wobei  $|0\rangle$  der Grundzustand eines Harmonischen Oszillators mit Frequenz  $\omega$  ist. Der Erzeugungsoperator  $\hat{a}^\dagger$  und der Parameter  $z$  werden definiert durch

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{\hat{q}}{b} - i\frac{\hat{p}}{c} \right), \quad z = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{q}{b} + i\frac{p}{c} \right). \quad (3.4)$$

Zur Vereinfachung wurden die Abkürzungen

$$b = \frac{1}{\sqrt{m\omega}} \quad \text{und} \quad c = \frac{1}{b} = \sqrt{m\omega}. \quad (3.5)$$

eingeführt.

Um den Zeitentwicklungsoperator in einer Basis aus kohärenten Zuständen mit Pfadintegralmethoden auszuwerten, teilen wir in Gleichung (3.1) das Zeitintervall  $[0, t]$  in  $N$  Teilintervalle der Länge  $\tau = t/N$ ,  $N \gg 1$ . Bilden wir anschließend den Grenzwert  $N \rightarrow \infty$  respektive  $\tau \rightarrow 0$ , so werden die später eingeführten Näherungen exakt, und zeitabhängige und zeitunabhängige Systeme können analog behandelt werden. Wir beschränken uns deshalb in der weiteren Darstellung aus Gründen der einfacheren Notation auf letztere. Aus der Identität

$$\exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \exp\left(-\frac{i\hat{H}\tau}{\hbar}\right) \right)^N \quad (3.6)$$

folgt für Gleichung (3.2)

$$K(z'', t; z', 0) \approx \langle z_N | \prod_{j=0}^{N-1} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau} | z_0 \rangle. \quad (3.7)$$

Hierbei setzen wir  $|z_0\rangle = |z'\rangle$  und  $|z_N\rangle = |z''\rangle$ . Nach jedem Faktor des obigen Produktes fügen wir nun eine Identität in der Form

$$\mathbb{1} = \int \frac{d^2z}{\pi} |z\rangle\langle z| = \iint \frac{d\text{Re}(z)d\text{Im}(z)}{2\pi i} |z\rangle\langle z| \quad (3.8)$$

ein. Der Propagator wird dann zu

$$K(z'', t; z', 0) = \langle z_N | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau} \prod_{j=1}^{N-1} \left\{ \int \frac{d^2z_j}{\pi} |z_j\rangle\langle z_j| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau} \right\} | z_0 \rangle. \quad (3.9)$$

Nun fassen wir die  $N - 1$  Integrationen und Integrationsmaße  $d^2z_j/\pi$  zusammen und erhalten nach einer kurzen Umordnung der Faktoren

$$\begin{aligned} K(z'', t; z', 0) &= \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d^2z_j}{\pi} \right\} \prod_{j=0}^{N-1} \left\{ \langle z_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau} | z_j \rangle \right\} \\ &= \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{dz_j dz_j^*}{2\pi i} \right\} e^{f(z^*, z)} \end{aligned} \quad (3.10)$$



mit  $f(z^*, z)$  gegeben durch

$$f(z^*, z) = \ln \left[ \prod_{j=0}^{N-1} \left\{ \langle z_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau} | z_j \rangle \right\} \right]. \quad (3.11)$$

Die Größen  $z$  und  $z^*$  sind Vektoren der Form

$$\begin{aligned} z &= (z_0, \dots, z_N) \\ z^* &= (z_0^*, \dots, z_N^*). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Zu diesem Augenblick scheint eine Unterscheidung zwischen  $z$  und  $z^*$  noch willkürlich zu sein, ihr Grund wird aber später noch klar werden.

Der Integrand  $\exp(f(z, z^*))$  kann nun weiter ausgewertet werden. Die Tatsache, daß für  $N \rightarrow \infty$  der Zeitschritt  $\tau$  infinitesimal klein wird, legt eine Taylorreihenentwicklung des Propagationsoperators über den Zeitschritt  $\tau$  bis zur ersten Ordnung nahe:

$$\begin{aligned} \exp(f(z^*, z)) &\approx \prod_{j=0}^{N-1} \langle z_{j+1} | \mathbb{1} - \frac{i\tau}{\hbar} \hat{H} | z_j \rangle \\ &= \prod_{j=0}^{N-1} \langle z_{j+1} | z_j \rangle \left( 1 - \frac{i\tau}{\hbar} \frac{\langle z_{j+1} | \hat{H} | z_j \rangle}{\langle z_{j+1} | z_j \rangle} \right) \\ &\approx \left[ \prod_{j=0}^{N-1} \langle z_{j+1} | z_j \rangle \right] \cdot \exp \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} -\frac{i\tau}{\hbar} H_{j+1,j} \right\}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Dabei wurde die Abkürzung

$$H_{j+1,j} \equiv H_{j+1,j}(z_{j+1}^*, z_j) = \frac{\langle z_{j+1} | \hat{H} | z_j \rangle}{\langle z_{j+1} | z_j \rangle} \quad (3.14)$$

eingeführt. Mit dem Überlapp zwischen kohärenten Zuständen

$$\langle z_2 | z_1 \rangle = \exp \left\{ -\frac{1}{2} |z_2|^2 + z_2^* z_1 - \frac{1}{2} |z_1|^2 \right\} \quad (3.15)$$

ergibt sich für (3.13)

$$\begin{aligned} \exp(f(z^*, z)) &= \exp \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} -\frac{1}{2} |z_{j+1}|^2 + z_{j+1}^* z_j - \frac{1}{2} |z_j|^2 - \frac{i\tau}{\hbar} H_{j+1,j} \right\} \\ &= \exp \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{2} (z_{j+1}^* - z_j^*) z_j - \frac{1}{2} z_{j+1}^* (z_{j+1} - z_j) - \frac{i\tau}{\hbar} H_{j+1,j} \right\}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

### 3.1.1 Stationäre Phase bzw. steepest descent

Unsere Näherung für den Propagator lautet nun

$$K(z'', t; z', 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{dz_j dz_j^*}{2\pi i} \right\} \times \exp \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{2} (z_{j+1}^* - z_j^*) z_j - \frac{1}{2} z_{j+1}^* (z_{j+1} - z_j) - \frac{i\tau}{\hbar} H_{j+1,j} \right\}. \quad (3.17)$$

Die Integrationen werden jetzt mittels der Methode der stationären Phase bzw. einer verallgemeinerten steepest-descent-Methode durchgeführt. Für ein kleines Plancksches Wirkungsquantum  $\hbar$  tragen zum Integranden vor allem die Punkte bei, bei denen die erste Ableitung nach der Integrationsvariable verschwindet (vergleiche Anhang (A.2)). Die Bedingungen für die stationären Punkte lauten

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial z_j} &= z_{j+1}^* - z_j^* - \frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial H_{j+1,j}}{\partial z_j} = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial z_{j+1}^*} &= -z_{j+1} + z_j - \frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^*} = 0 \end{aligned} \quad j = 1, \dots, N-1. \quad (3.18)$$

Bei der Durchführung dieser Ableitung ist zu beachten, daß jeder Term, der quadratisch in  $z_j$  und  $z_j^*$  ist, in Gleichung (3.17) doppelt vorkommt, so daß der Vorfaktor  $1/2$  verschwindet.

Zur Durchführung der Gaußintegrationen benötigen wir eine Entwicklung des Integranden um die Bahn der stationären Phase, die durch (3.18) bestimmt ist. Wir sprechen deshalb von einer Bahn, da die  $z_j$  und  $z_j^*$  als Punkte einer Bahn zum Zeitpunkt  $t_j$  aufgefaßt werden können. Es seien also  $(z, z^*)$  die Lösungen von (3.18), und  $(\eta, \eta^*)$  markiere kleine Abweichungen von diesen Punkten. Da End- und Anfangspunkt  $z_0 = z'$  und  $z_N = z''$  festliegen, muß die Variation an diesen Stellen verschwinden. Dies führt zu den Randtermen

$$\eta_0 = \eta_0^* = \eta_N = \eta_N^* = 0. \quad (3.19)$$

Ersetzen wir also in (3.17) im Exponenten

$$\begin{aligned} z_j &\rightarrow z_j + \eta_j \\ z_j^* &\rightarrow z_j^* + \eta_j^* \end{aligned} \quad (3.20)$$

Für  $f(z, z^*)$  ergibt sich dann

$$\begin{aligned} f(z^* + \eta^*, z + \eta) &= \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \frac{1}{2} (z_{j+1}^* + \eta_{j+1}^* - z_j^* - \eta_j^*) (z_j + \eta_j) \right. \\ &\quad - \frac{1}{2} (z_{j+1}^* + \eta_{j+1}^*) (z_{j+1} + \eta_{j+1} - z_j - \eta_j) \\ &\quad \left. - \frac{i\tau}{\hbar} H_{j+1,j} (z_j + \eta_j, z_{j+1}^* + \eta_{j+1}^*) \right\}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Eine Taylorreihenentwicklung bis zur zweiten Ordnung um  $(z, z^*)$  liefert als Näherung

$$\begin{aligned}
f(z + \eta, z^* + \eta^*) &\approx \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \frac{1}{2}(z_{j+1}^* - z_j^*)z_j - \frac{1}{2}z_{j+1}^*(z_{j+1} - z_j) - \frac{i\tau}{\hbar}H_{j+1,j}(z_j, z_{j+1}^*) \right. \\
&\quad + \frac{1}{2}(z_{j+1}^* - z_j^*)\eta_j + \frac{1}{2}(\eta_{j+1}^* - \eta_j^*)z_j \\
&\quad - \frac{1}{2}z_{j+1}^*(\eta_{j+1} - \eta_j) - \frac{1}{2}\eta_{j+1}^*(z_{j+1} - z_j) - \frac{i\tau}{\hbar}\frac{\partial H_{j+1,j}}{\partial z_j}\eta_j - \frac{i\tau}{\hbar}\frac{\partial H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^*}\eta_{j+1}^* \\
&\quad + \frac{1}{2}(\eta_{j+1}^* - \eta_j^*)\eta_j - \frac{1}{2}\eta_{j+1}^*(\eta_{j+1} - \eta_j) \\
&\quad \left. - \frac{i\tau}{2\hbar} \left[ \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_j^2}\eta_j^2 + 2\frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^* \partial z_j}\eta_{j+1}^*\eta_j + \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^{*2}}\eta_{j+1}^{*2} \right] \right\}. \quad (3.22)
\end{aligned}$$

Durch Umordnung der Terme nach Potenzen von  $\eta$  und  $\eta^*$  erhalten wir

$$\begin{aligned}
f(z + \eta, z^* + \eta^*) &= f(z^*, z) + \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \right. \\
&\quad + \left( z_{j+1}^* - \frac{1}{2}z_j^* - \frac{i\tau}{\hbar}\frac{\partial H_{j+1,j}}{\partial z_j} \right) \eta_j - \frac{1}{2}z_{j+1}^*\eta_{j+1} \\
&\quad + \left( z_j - \frac{1}{2}z_{j+1} - \frac{i\tau}{\hbar}\frac{\partial H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^*} \right) \eta_{j+1}^* - \frac{1}{2}z_j\eta_j^* \\
&\quad - \frac{1}{2}\eta_{j+1}^*\eta_{j+1} + \eta_{j+1}^*\eta_j - \frac{1}{2}\eta_j^*\eta_j \\
&\quad \left. - \frac{i\tau}{2\hbar} \left[ \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_j^2}\eta_j^2 + 2\frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^* \partial z_j}\eta_{j+1}^*\eta_j + \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^{*2}}\eta_{j+1}^{*2} \right] \right\}. \quad (3.23)
\end{aligned}$$

Nach dieser Umordnung können wir nun die einzelnen Terme diskutieren. Der von den Abweichungen unabhängige Term ergibt gerade den Exponenten an der Stelle der stationären Bahn. Die Terme proportional zu  $\eta$  und  $\eta^*$  verschwinden aufgrund der Bedingung für die stationäre Phase (3.18). Wir erhalten also

$$\begin{aligned}
K(z_N, t; z_0, 0) &= e^{f(z^*, z)} \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d\eta_j^* d\eta_j}{2\pi i} \right\} \exp \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} -\frac{i\tau}{2\hbar}\frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_j^2}\eta_j^2 - \frac{i\tau}{2\hbar}\frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^{*2}}\eta_{j+1}^{*2} \right. \\
&\quad \left. - \eta_j^*\eta_j + \left( 1 - \frac{i\tau}{\hbar}\frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^* \partial z_j} \right) \eta_{j+1}^*\eta_j \right\}, \quad (3.24)
\end{aligned}$$

wobei  $\partial^2 H_{0,-1}/\partial z_0^{*2}$  gleich Null gesetzt wurde. Da die Abweichungen  $(\eta, \eta^*)$  an den Endpunkten der Bahn verschwinden, können deren Vorfaktoren willkürlich festgelegt werden. Sie wurden so gewählt, daß Gleichung (3.24) eine möglichst einfache Form besitzt. Die Integrationen können nun auf zwei verschiedenen Arten durchgeführt werden.

### 3.1.2 Methode 1: Sukzessive Integration der $\eta_j$

Zunächst erinnern wir uns an die Formel für ein  $n$ -dimensionales Gaußintegral:

$$\int d^n x \exp(-x^t A x + b^t x) = \frac{\pi^{n/2}}{\sqrt{\det A}} \exp\left(\frac{1}{4} b^t A^{-1} b\right). \quad (3.25)$$

Hierbei ist  $A$  eine positiv definite Matrix mit Komponenten  $a_{ij}$ . Diese Beziehung nutzen wir nun im Fall  $n = 2$  aus, um in Gleichung (3.24) die Integration über  $(\eta_1, \eta_1^*)$  durchzuführen. Die Matrix  $A$  besitzt dann die Komponenten

$$a_{11} = \frac{i\tau}{2\hbar} \frac{\partial^2 H_{2,1}}{\partial z_1^2}, \quad a_{22} = \frac{i\tau}{2\hbar} \frac{\partial^2 H_{1,0}}{\partial z_1^{*2}} = -X_1, \quad a_{12} = a_{21} = \frac{1}{2}.$$

Die Einführung der Abkürzung  $X_1$  wird später verständlich werden. Durch Vergleich von Gleichung (3.24) mit dem Gaußintegral (3.25) können wir auch den Vektor  $b$  festlegen. Für ihn gilt

$$b_1 = \left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{2,1}}{\partial z_2^* \partial z_1}\right) \eta_2^* \quad \text{und} \quad b_2 = 0. \quad (3.26)$$

Die restlichen Terme sind bezüglich der Integration über  $(\eta_1, \eta_1^*)$  konstant. Führen wir nun die Integration durch, so erhalten wir

$$\begin{aligned} K(z_N, t; z_0, 0) &= \frac{e^{f(z^*, z)}}{\sqrt{1 + 2i\frac{\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{2,1}}{\partial z_1^2} X_1}} \cdot \int \left[ \prod_{j=2}^{N-1} \frac{d\eta_j^* d\eta_j}{2\pi i} \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{\left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{2,1}}{\partial z_2^* \partial z_1}\right)^2 X_1 \eta_2^{*2}}{1 + 2\frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{2,1}}{\partial z_1^2} X_1} \right\} \\ &\times \exp \left\{ \sum_{j=2}^{N-1} -\frac{i\tau}{2\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_j^2} \eta_j^2 - \frac{i\tau}{2\hbar} \frac{\partial^2 H_{j,j-1}}{\partial z_j^{*2}} \eta_j^{*2} - \eta_j^* \eta_j \right. \\ &\quad \left. + \left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^* \partial z_j}\right) \eta_{j+1}^* \eta_j \right\} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Bei der nun folgenden Integration über  $(\eta_2, \eta_2^*)$  ändert sich die Form der Parameter  $a_{11}, a_{12}, a_{21}, b_1$  und  $b_2$  nicht. Für den Vorfaktor von  $\eta_2^{*2}$  ist dies nicht der Fall. Wie wir anhand der zweiten Zeile von Gleichung (3.27) sehen, erhalten wir durch die Integration über  $(\eta_1, \eta_1^*)$  einen weiteren Term proportional  $\eta_2^{*2}$ . Dies führt dazu, daß wir zu  $a_{22}$  bzw.  $X_2$  einen weiteren Term hinzuaddieren müssen. Indem wir Gleichung (3.24) und (3.27) vergleichen, können wir allgemein eine Rekursionsbeziehung für den Koeffizienten

$a_{22}$  der Integration über  $(\eta_j, \eta_j^*)$  respektive  $X_j$  aufstellen. Es gilt:

$$X_0 = 0$$

$$X_j = -\frac{i\tau}{2\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_j^{*2}} + \frac{\left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{j,j-1}}{\partial z_j^* \partial z_{j-1}}\right)^2}{1 + 2\frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{j,j-1}}{\partial z_{j-1}^2} X_{j-1}} X_{j-1} \quad ; j = 1, \dots, N-1. \quad (3.28)$$

Mittels dieser Beziehung können wir nun formal alle Integrationen in Gleichung (3.24) durchführen. Wir erhalten dann als Resultat für den Propagator

$$K(z_N, t; z_0, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} e^{f(z^*, z)} \prod_{j=1}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{1 + 2i\frac{\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_j^2} X_j}}. \quad (3.29)$$

### 3.1.3 Kontinuierliche Variablen

Bevor wir Gleichung (3.29) weiter auswerten, betrachten wir zunächst den Grenzwert  $N \rightarrow \infty$  bzw.  $\tau \rightarrow 0$ . Aus der Bedingung für die stationäre Phase (3.18) werden dabei Differentialgleichungen, die eine ähnliche Form wie die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen besitzen:

$$\begin{aligned} \dot{z}^* &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial z} \\ \dot{z} &= -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial z^*}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Eine genauere Analyse der stationären Phasenbedingung (3.18) zeigt, daß in der Differentialgleichung für  $z^*$  nicht  $z_0$ , wohl aber  $z_N^*$ , und in der Differentialgleichung für  $z$  zwar  $z_0$ , aber nicht  $z_N$  auftritt. Die Lösungen von (3.30) müssen also **nicht** die beidseitigen Randbedingungen  $z(0) = z_0$ ,  $z(t) = z_N$ ,  $z^*(0) = z_0^*$  und  $z^*(t) = z_N^*$  erfüllen, was im allgemeinen aufgrund der Überbestimmtheit auch nicht möglich ist, sondern nur

$$z(0) = z_0 \quad \text{und} \quad z^*(t) = z_N^*. \quad (3.31)$$

An dieser Stelle erfolgt der Bruch zwischen  $z$  und  $z^*$ . Wir fassen  $z^*$  nicht länger mehr als das Komplexkonjugierte von  $z$  auf, sondern als eigenständige Variable. Um diesen Sachverhalt in Zukunft zu verdeutlichen, führen wir die neuen Variablen  $u$  und  $v$  ein durch

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{q}{b} + i\frac{p}{c} \right) \hat{=} z \\ v &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{q}{b} - i\frac{p}{c} \right) \hat{=} z^*. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Die Bewegungsgleichungen (3.30) lauten dann

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{u} &= \frac{\partial H}{\partial v} \\ i\hbar\dot{v} &= -\frac{\partial H}{\partial u} \end{aligned} \quad (3.33)$$

mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} u(0) = u_0 = z_0 &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{q_0}{b} + i\frac{p_0}{c} \right) \\ v(t) = v_N = z_N^* &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{q_N}{b} - i\frac{p_N}{c} \right). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Die Randpunkte  $u(t)$  und  $v(0)$  entsprechen nun nicht mehr  $z_N$  bzw.  $z_0^*$ , sondern werden durch die Dynamik (3.33) bestimmt.

In diesen neuen Variablen wollen wir nun den Propagator weiter auswerten. Zunächst betrachten wir das unendliche Produkt in Gleichung (3.29). Zunächst schreiben wir es mittels der Beziehung  $\exp(\ln(x)) = x$  in eine Exponentialfunktion um:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left\{ 1 + 2i \frac{\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u_j^2} X_{j-1} \right\}^{-\frac{1}{2}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \ln \left( 1 + 2i \frac{\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u_j^2} X_{j-1} \right) \right\}. \quad (3.35)$$

Da im Grenzwert  $N \rightarrow \infty$  der Zeitschritt  $\tau$  gegen Null strebt, können wir den Logarithmus im Exponenten durch seine Taylorentwicklung bis zum ersten Glied ersetzen ( $\ln(1+x) \approx x$ ):

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left\{ 1 + 2i \frac{\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u_j^2} X_{j-1} \right\}^{-\frac{1}{2}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left\{ -i \frac{\tau}{\hbar} \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2 H}{\partial u_j^2} X_{j-1} \right\}. \quad (3.36)$$

Im letzten Schritt nutzen wir die Stetigkeit der Exponentialfunktion aus, um die Grenzwertbildung in das Argument der Exponentialfunktion hineinzuziehen. Aus der unendlichen Summe wird dann ein Integral über das betrachtete Zeitintervall  $[0, t]$ :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left\{ 1 + 2i \frac{\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u_j^2} X_{j-1} \right\}^{-\frac{1}{2}} = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{\partial^2 H}{\partial u^2}(\tau) X(\tau) \right\}. \quad (3.37)$$

Analog betrachten wir nun den Limes des Exponenten  $f(z^*, z)$ . Im ersten Schritt ersetzen wir - soweit möglich - die ursprünglichen Variablen  $z$  und  $z^*$  durch die neuen Variablen  $u$  und  $v$ :

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} f(z^*, z) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{2} (z_{j+1}^* - z_j^*) z_j - \frac{1}{2} z_{j+1}^* (z_{j+1} - z_j) - \frac{i\tau}{\hbar} H_{j+1,j} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \frac{1}{2} \frac{v_{j+1} - v_j}{\tau} u_j - \frac{1}{2} v_{j+1} \frac{u_{j+1} - u_j}{\tau} - \frac{i}{\hbar} H_{j+1,j} \right\} \tau \\ &\quad + \frac{1}{2} v_0 u_0 + \frac{1}{2} v_N u_N - \frac{1}{2} z_0^* z_0 - \frac{1}{2} z_N^* z_N. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Die Randelemente  $u_0 v_0$  und  $u_N v_N$  wurden dabei in die Summe eingefügt und wieder abgezogen. Dies ist notwendig, da sie nicht mit den Termen  $z_0 z_0^*$  und  $z_N z_N^*$  übereinstimmen ( $u(t) = u_N \neq z_N$  und  $v(0) = v_0 \neq z_0^*$ ). Nach Durchführung des Limes und der Ersetzung von  $z_0$  bzw.  $z_N$  durch  $z'$  und  $z''$  ergibt sich die Beziehung

$$f(u, v) = \int_0^t \left( \frac{1}{2} \dot{v} u - \frac{1}{2} \dot{u} v - \frac{i}{\hbar} H \right) d\tau + \frac{1}{2} v' u' + \frac{1}{2} v'' u'' - \frac{1}{2} |z'|^2 - \frac{1}{2} |z''|^2. \quad (3.39)$$

Insgesamt lautet unser Propagator nun

$$K(z'', t; z', 0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{\partial^2 H}{\partial u^2}(\tau) X(\tau) \right\} \exp \left\{ \int_0^t \left( \frac{1}{2} \dot{v} u - \frac{1}{2} \dot{u} v - \frac{i}{\hbar} H \right) d\tau + \frac{1}{2} v' u' + \frac{1}{2} v'' u'' - \frac{1}{2} |z'|^2 - \frac{1}{2} |z''|^2 \right\}. \quad (3.40)$$

Um den ersten Faktor im obigen Ausdruck zu bestimmen, muß zunächst die Rekursionsformel (3.24) für die  $X_j$  in die kontinuierlichen Variablen umgeschrieben werden. Aus

$$\frac{(1 - ax)^2}{1 + bx} = 1 - (2a + b)x + O(x^2) \quad (3.41)$$

folgt für Gleichung (3.28)

$$X_j \approx -\frac{i\tau}{2\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial v_j^2} + X_{j-1} - \left( 2\frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u_{j-1} \partial v_j} + 2\frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u_{j-1}^2} X_{j-1} \right) X_{j-1}, \quad (3.42)$$

und im Grenzwert  $N \rightarrow \infty$

$$\dot{X}(t) = -\frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial v^2} - 2\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} X(t) - 2\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u^2} X^2(t) \quad (3.43)$$

mit der Anfangsbedingung  $X(0) = 0$ . Diese nichtlineare und inhomogene Differentialgleichung kann nicht direkt gelöst werden. Stattdessen führen wir durch einen „educated guess“ eine Größe ein, die eine analoge Differentialgleichung erfüllt. Hierzu betrachten wir zunächst kleine Variationen um die Lösungen der Bewegungsgleichungen (3.33)

$$\begin{aligned} \delta \dot{u} &= -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} \delta u - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial v^2} \delta v \\ \delta \dot{v} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u^2} \delta u + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} \delta v. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Die Behauptung ist nun, daß wir die Lösung von Gleichung (3.43) erhalten, in dem wir  $X$  mit  $\frac{1}{2}\frac{\delta u}{\delta v}$  identifizieren. Bilden wir nämlich die Ableitung dieses Ausdrucks, so folgt

$$\begin{aligned}
\dot{X} &= \frac{1}{2} \frac{\delta \dot{u}}{\delta v} - \frac{1}{2} \frac{\delta u}{\delta v^2} \delta \dot{v} \\
&= -\frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} \frac{\delta u}{\delta v} - \frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial v^2} - \frac{1}{2} \frac{\delta u}{\delta v} \left[ \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u^2} \frac{\delta u}{\delta v} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} \right] \\
&= -\frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial v^2} - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} \frac{\delta u}{\delta v} - \frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u^2} \left( \frac{\delta u}{\delta v} \right)^2 \\
&= -\frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial v^2} - 2 \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} X - 2 \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u^2} X^2,
\end{aligned} \tag{3.45}$$

was genau der Differentialgleichung (3.43) entspricht. Um die Anfangsbedingung  $X(0) = 0$  zu erfüllen, müssen wir  $\delta u(0) = 0$  setzen. Der erste Faktor in (3.40) läßt sich nun vollständig bestimmen. Einsetzen der Lösung von (3.43) in den Integranden liefert unter Berücksichtigung von Gleichung (3.44)

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u^2} X &= \frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u^2} \frac{\delta u}{\delta v} \\
&= \frac{1}{2} \frac{\delta \dot{v}}{\delta v} - \frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} \\
&= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \ln \delta v - \frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v},
\end{aligned} \tag{3.46}$$

so daß der Gesamtausdruck sich zu

$$\begin{aligned}
\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{\partial^2 H}{\partial u^2}(\tau) X(\tau) \right\} &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^t d\tau \left[ \frac{d}{d\tau} (\ln \delta v) - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} \right] \right\} \\
&= \sqrt{\frac{\delta v'}{\delta v''}} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \int_0^t d\tau \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} \right\}.
\end{aligned} \tag{3.47}$$

ergibt. Insgesamt stellt sich der Propagator in semiklassischer Näherung bis jetzt folgendermaßen dar:

$$\begin{aligned}
K(z'', t; z', 0) &= \sqrt{\frac{\delta v'}{\delta v''}} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \int_0^t d\tau \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} \right\} \\
&\quad \exp \left\{ \int_0^t \left( \frac{1}{2} \dot{v} u - \frac{1}{2} \dot{u} v - \frac{i}{\hbar} H \right) d\tau \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} v' u' - \frac{1}{2} v'' u'' - \frac{1}{2} |z'|^2 - \frac{1}{2} |z''|^2 \right\}.
\end{aligned} \tag{3.48}$$



### 3.1.4 Die Wirkung

Durch Einführung der komplexen Wirkung  $S^c$  läßt sich Gleichung (3.48) vereinfachen. Da die Bewegungsgleichungen von  $u$  und  $v$  der Form nach Hamiltonschen Bewegungsgleichungen entsprechen, definieren wir in Analogie zur klassischen Mechanik die komplexe Wirkung  $S^c$  als

$$S^c(v'', u', t) = \int_0^t \left[ \frac{i\hbar}{2} (v\dot{u} - \dot{v}u) - H(u, v) \right] d\tau - \frac{i\hbar}{2} (v''u(t) + u'v(0)). \quad (3.49)$$

Durch partielle Integration über  $\dot{v}u$  erhalten wir unter Berücksichtigung der Randbedingungen  $v(t) = v''$  und  $u(0) = u'$  weiterhin

$$S^c(v'', u', t) = \int_0^t \left[ i\hbar v\dot{u} - H(u, v) \right] d\tau - i\hbar v''u(t) \quad (3.50)$$

und über  $\dot{v}u$

$$S^c(v'', u', t) = \int_0^t \left[ -i\hbar \dot{v}u - H(u, v) \right] d\tau - i\hbar u'v(0). \quad (3.51)$$

Die letzten Beziehungen sind nützlich, um die partiellen Ableitungen von  $S^c$  zu berechnen. Bilden wir zum Beispiel die Ableitung von  $S^c$  nach dem Endpunkt  $v''$ , so folgt aus Gleichung (3.50)

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^c(v'', u', t)}{\partial v''} &= \int_0^t \left[ i\hbar \frac{\partial v}{\partial v''} \dot{u} + i\hbar v \frac{\partial \dot{u}}{\partial v''} - \frac{\partial H(u, v)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial v''} - \frac{\partial H(u, v)}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial v''} \right] d\tau \\ &\quad - i\hbar u(t) - i\hbar v'' \frac{\partial u(t)}{\partial v''}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Unter Berücksichtigung der Bewegungsgleichungen (3.33) geht diese Beziehung über in

$$\frac{\partial S^c(v'', u', t)}{\partial v''} = -i\hbar u(t). \quad (3.53)$$

Auf gleiche Weise erhalten wir die Ableitung nach dem Anfangspunkt  $u'$

$$\frac{\partial S^c(v'', u', t)}{\partial u'} = -i\hbar v(0). \quad (3.54)$$

Aus diesen Gleichungen läßt sich der letzte unbekannte Term  $\delta v''/\delta v'$  in Gleichung (3.48) bestimmen. Zunächst lösen wir (3.54) nach  $v(0)$  auf:

$$v' = v(0) = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S^c}{\partial u'}. \quad (3.55)$$

Durch Variation ergibt sich daraus

$$\delta v' = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''} \delta v'' + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S^c}{\partial u'^2} \delta u'. \quad (3.56)$$

Setzen wir die Anfangsbedingung  $\delta u' = \delta u(0) = 0$  ein, so folgt unmittelbar

$$\frac{\delta v'}{\delta v''} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''} \quad (3.57)$$

Insgesamt haben wir also

$$\begin{aligned} K(z'', t; z', 0) &= \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \int_0^t d\tau \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} \right\} \\ &\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S^c(v'', u', t) - \frac{1}{2} (|v''|^2 + |u'|^2) \right\}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Nach dieser Herleitung soll nun noch eine weitere Möglichkeit präsentiert werden, wie das Pfadintegral (3.24) auf eine zweite, unabhängige Art gelöst werden kann.

### 3.1.5 Methode 2: Simultane Durchführung aller Integrationen

Rufen wir uns noch einmal Gleichung (3.24) in Erinnerung:

$$\begin{aligned} K(z'', t; z', 0) &= e^{f(z^*, z)} \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d\eta_j^* d\eta_j}{2\pi i} \right\} \exp \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} -\frac{i\tau}{2\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_j^2} \eta_j^2 - \frac{i\tau}{2\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^{*2}} \eta_{j+1}^{*2} \right. \\ &\quad \left. - \eta_j^* \eta_j + \left( 1 - \frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^* \partial z_j} \right) \eta_{j+1}^* \eta_j \right\}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Setzen wir  $\zeta$  gleich dem Exponenten des Integranden, so gilt

$$\begin{aligned} -2\zeta &= 2 \sum_{j=0}^{N-1} \eta_j \eta_j^* + \sum_{j=0}^{N-1} \frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_j^2} \eta_j^2 - 2 \sum_{j=0}^{N-1} \left( 1 - \frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^* \partial z_j} \right) \eta_{j+1}^* \eta_j \\ &\quad + \sum_{j=0}^{N-1} \frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^{*2}} \eta_{j+1}^{*2}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Durch Einführung der Abkürzungen

$$A_j = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_j^2}, \quad B_j = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{j,j-1}}{\partial z_j^{*2}}, \quad C_j = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{j+1,j}}{\partial z_{j+1}^* \partial z_j} \quad (3.61)$$

und wegen  $\eta_0 = \eta_0^* = \eta_N = \eta_N^* = 0$  wird hieraus

$$-2\zeta = 2 \sum_{j=1}^{N-1} \eta_j \eta_j^* + \sum_{j=1}^{N-1} \tau A_j \eta_j^2 + 2 \sum_{j=1}^{N-2} (\tau C_j - 1) \eta_{j+1}^* \eta_j + \sum_{j=1}^{N-1} \tau B_j \eta_j^{*2}. \quad (3.62)$$

Gleichung (3.62) kann durch Definition des Vektors  $\eta$

$$\eta = (\eta_{N-1}, \eta_{N-1}^*, \eta_{N-2}, \eta_{N-2}^*, \dots, \eta_1, \eta_1^*) \quad (3.63)$$

geschrieben werden als

$$-2\zeta = \eta G_{N-1} \eta^T, \quad (3.64)$$

wobei  $G_{N-1}$  eine tridiagonale Bandmatrix mit den Einträgen

$$G_{N-1} = \begin{pmatrix} \tau A_{N-1} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & \tau B_{N-1} & \tau C_{N-2} - 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \tau C_{N-2} - 1 & \tau A_{N-2} & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \tau B_{N-2} & \tau C_{N-3} - 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \tau C_{N-3} - 1 & \tau A_{N-3} & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \tau B_{N-3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.65)$$

ist. Aus dem Anhang ist klar, daß die Integrale über die Variablen  $(\eta_j, \eta_j^*)$  in Gleichung (3.59) gelöst sind, sobald die Determinante von  $G_{N-1}$  bekannt ist, da die Integrale gerade einer Gaußintegration über  $2(N-1)$  Variablen entsprechen. Für die Determinante werden wir nun eine Rekursionsbeziehung herleiten.

$$\begin{aligned} \det G_{N-1} &= \tau A_{N-1} \begin{vmatrix} \tau B_{N-1} & \tau C_{N-2} - 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \tau C_{N-2} - 1 & \tau A_{N-2} & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \tau B_{N-2} & \tau C_{N-3} - 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \tau C_{N-3} - 1 & \tau A_{N-3} & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \tau B_{N-3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \\ &\quad - \begin{vmatrix} 1 & \tau C_{N-2} - 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \tau A_{N-2} & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \tau B_{N-2} & \tau C_{N-3} - 1 & \dots \\ 0 & 0 & \tau C_{N-3} - 1 & \tau A_{N-3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \\ &= \tau A_{N-1} \det F_{N-1} - \det G_{N-2}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Die oben eingeführte Matrix  $F_{N-1}$  hat die Form

$$F_{N-1} = \begin{pmatrix} \tau B_{N-1} & \tau C_{N-2} - 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \tau C_{N-2} - 1 & \tau A_{N-2} & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \tau B_{N-2} & \tau C_{N-3} - 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \tau C_{N-3} - 1 & \tau A_{N-3} & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \tau B_{N-3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.67)$$

Ihre Determinante läßt sich auf die folgende Art berechnen

$$\begin{aligned} \det F_{N-1} &= \begin{vmatrix} \tau B_{N-1} & \tau C_{N-2} - 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \tau C_{N-2} - 1 & \tau A_{N-2} & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \tau B_{N-2} & \tau C_{N-3} - 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \tau C_{N-3} - 1 & \tau A_{N-3} & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \tau B_{N-3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \\ &= \tau B_{N-1} \det G_{N-2} - (\tau C_{N-2} - 1)^2 \det F_{N-2} \\ &= \tau B_{N-1} \det G_{N-2} + 2\tau C_{N-2} \det F_{N-2} - \det F_{N-2} + o(\tau) \end{aligned} \quad (3.68)$$

Mit den Abkürzungen

$$g_{N-1} = (-1)^{N-1} \det G_{N-1} \quad f_{N-1} = (-1)^{N-1} \det F_{N-1} \quad (3.69)$$

wird aus den Gleichungen (3.66) und (3.68)

$$\begin{aligned} g_{N-1} &= g_{N-2} + \tau A_{N-1} f_{N-1} \\ f_{N-1} &= f_{N-2} - \tau B_{N-1} g_{N-2} - 2\tau C_{N-2} f_{N-2} + o(\tau). \end{aligned} \quad (3.70)$$

Der alternierende Vorfaktor  $(-1)^{N-1}$  stammt dabei von dem im Integrationsmaß enthaltenen Faktor  $i^{N-1}$ . Den Startwert dieser Rekursion erhalten wir unter Berücksichtigung von Gleichung (3.69) durch Einsetzen von  $\tau = 0$  in obige Beziehung:

$$\begin{aligned} g_{N-1}(0) &= g_{N-2}(0) = g_1(0) = 1 \\ f_{N-1}(0) &= f_{N-2}(0) = f_1(0) = 0. \end{aligned} \quad (3.71)$$

Im Grenzwert  $N \rightarrow \infty$  bzw.  $\tau \rightarrow 0$  verwandeln sich die beiden Gleichungen (3.70) in Differentialgleichungen erster Ordnung:

$$\dot{g} = Af, \quad \dot{b} = -Bg - 2Cf. \quad (3.72)$$

Um dieses System zu lösen, definieren wir

$$G = g \exp \left[ \int_0^t C(\tau) d\tau \right] \quad (3.73)$$

$$F = f \exp \left[ \int_0^t C(\tau) d\tau \right]. \quad (3.74)$$

Aus (3.72) wird dann

$$\dot{G} = AF + CG \quad (3.75)$$

$$\dot{F} = -BG - CF \quad (3.76)$$

mit den Anfangsbedingungen  $G(0) = 1$  und  $F(0) = 0$ .

Auch dieses gekoppelte System werden wir, analog zur vorherigen Herleitung, nicht direkt lösen. Betrachten wir zunächst wieder die Bewegungsgleichungen (3.33) für  $u$  und  $v$ . Variieren wir diese um deren Lösungen und benutzen die oben eingeführten Abkürzungen (3.61), so ergibt sich

$$\delta \dot{v} = A\delta u + C\delta v \quad (3.77)$$

$$\delta \dot{u} = -B\delta v - C\delta u, \quad (3.78)$$

was vollkommen mit den Differentialgleichungen für  $G$  und  $F$  übereinstimmt. Was wir also wollen, ist eine Lösung des obigen Systems mit den Anfangsbedingungen

$$\delta v(0) \equiv \delta v' = 1 \quad (3.79)$$

$$\delta u(0) \equiv \delta u' = 0. \quad (3.80)$$

Ausgehend von Gleichung (3.54)

$$v' = v(0) = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial u'} \quad (3.81)$$

erhalten wir für durch Variation unter Ausnutzung der Anfangsbedingungen (3.79) und (3.80)

$$\begin{aligned} \delta v' &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial u' \partial v''} \delta v'' + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial u'^2} \delta u' \\ \Rightarrow \delta v'' &= \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial^2 S}{\partial u' \partial v''} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (3.82)$$

Der Ausdruck  $\delta v''$  entspricht nun gerade  $G(t)$ , das heißt wir erhalten für die Determinante der Matrix  $G$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (-1)^{N-1} \det G_{N-1} = g(t) = G(t) \exp \left( - \int_0^t C(\tau) d\tau \right) = \delta v'' \exp \left( - \int_0^t C(\tau) d\tau \right) \quad (3.83)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (-1)^{N-1} \det G_{N-1} = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial^2 S}{\partial u' \partial v''} \right)^{-1} \exp \left( - \int_0^t C(\tau) d\tau \right). \quad (3.84)$$

Durch Einsetzen dieses Resultats in Gleichung (3.24) erhalten wir wie bei der ersten Herleitung das Ergebnis

$$K(z'', t; z', 0) = \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \int_0^t d\tau \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} \right\} \\ \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S^c(v'', u', t) - \frac{1}{2} (|v''|^2 + |u'|^2) \right\}. \quad (3.85)$$

An diesem Punkt angekommen, bietet es sich an, über die in (3.85) eingesetzte Hamiltonfunktion nachzudenken.

## 3.2 Zum klassischen Äquivalent eines Hamiltonoperators

Die bisher in unserer Herleitung aufgetretene Hamiltonfunktion  $H$  erhielten wir folgendermaßen aus dem Hamiltonoperator  $\hat{H}$ :

$$H_1 = \langle z | \hat{H} | z \rangle. \quad (3.86)$$

Dieser Ausdruck kann zum Beispiel durch Normalordnung von  $\hat{H}$  ausgewertet werden. Die Bedeutung des hier eingeführten Indizes wird später klar werden.  $H_1$  ist nicht die einzige Möglichkeit, ein klassisches Äquivalent eines Hamiltonoperators zu finden, in der Tat gibt es deren unendlich viele. Ein einfaches Verfahren, das die Zuordnung einer Hamiltonfunktion zu einem gegebenen Hamiltonoperator erlaubt, soll hier kurz vorgestellt werden. Es geht auf Cahill und Glauber [Cah69] zurück.

Zunächst definieren wir das sogenannte  $s$ -Produkt durch

$$\{\hat{a}^{\dagger m} \hat{a}^n\}_s = \left(\frac{\partial}{\partial \zeta}\right)^m \left(-\frac{\partial}{\partial \zeta^*}\right)^n D(\zeta, \zeta^*, s) \Big|_{\zeta=\zeta^*=0} \quad (3.87)$$

mit

$$D(\zeta, \zeta^*, s) = \exp\left(\zeta \hat{a}^\dagger - \zeta^* \hat{a} + \frac{s}{2} \zeta \zeta^*\right). \quad (3.88)$$

Als Sonderfälle erhält man für  $s = -1$  die Antinormalordnung, für  $s = 0$  die symmetrische oder Weylordnung und für  $s = 1$  die Normal- oder Wickordnung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $\hat{a}^\dagger$  und  $\hat{a}$  [Sch95]. Ein gegebener Hamiltonoperator  $\hat{H}$  kann nun durch Ausnutzung der Vertauschungsrelation  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$  in jeder dieser Ordnungen dargestellt werden

$$\hat{H} = \sum_{m,n=0}^{\infty} h_{m,n}(s) \{\hat{a}^{\dagger m} \hat{a}^n\}_s, \quad (3.89)$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten  $h_{m,n}$  vom Ordnungsparameter  $s$  abhängen. Die als  $s$ -Symbol bezeichnete, dem Hamiltonoperator zugeordnete Hamiltonfunktion  $H_s$  kann nun einfach durch die Ersetzung

$$\{\hat{a}^{\dagger m} \hat{a}^n\}_s \rightarrow z^{*m} z^n \quad (3.90)$$

gewonnen werden, das heißt,

$$H_s(z^*, z) = \sum_{m,n=0}^{\infty} h_{m,n}(s) z^{*m} z^n. \quad (3.91)$$

Es ist leicht einzusehen, daß das Matrixelement  $\langle z | \hat{H} | z \rangle$  mit dem durch Normalordnung gewonnenen 1-Symbol  $H_1$  übereinstimmt. Als Beispiel für die Ersetzung (3.90) sei hier

kurz der Harmonische Oszillator diskutiert. Dessen Hamiltonoperator hat die  $s$ -geordnete Form

$$\hat{H} = \left( \{\hat{a}^\dagger \hat{a}\}_s + \frac{s}{2} \right) \hbar \omega, \quad (3.92)$$

und damit lauten die zugehörigen Symbole in den oben angegebenen Ordnungen

$$\begin{aligned} H_1 &= \left( z^* z + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \\ H_0 &= z^* z \hbar \omega \\ H_{-1} &= \left( z^* z - \frac{1}{2} \right) \hbar \omega. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Die Frage ist nun, welches der obigen Symbole am geeignetsten für die Semiklassik ist. Es hat sich gezeigt [Sch95], daß die Ordnung der Wahl die symmetrische ist. Diese ist aber bereits in indirekter Form in unserem Ausdruck für den Propagator enthalten. Hierzu gehen wir von der allgemein geltenden Identität [Vor89]

$$H_0 = \exp \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^* \partial z} \right) H_1 \quad (3.94)$$

aus. Durch Entwicklung der Exponentialfunktion bis zum ersten Glied, was einer Entwicklung bis zu Termen der Ordnung  $\hbar$  entspricht, da  $z$  proportional zu  $\hbar^{-1/2}$  ist,

$$H_0 = H_1 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 H_1}{\partial z^* \partial z}, \quad (3.95)$$

erkennen wir, daß wir die Terme  $S^c$  und  $1/2 \int_0^t \partial^2 H / (\partial z^* \partial z) d\tau$  im Exponenten unserer Näherung zusammenfassen können, wenn wir in der Wirkung das normalgeordnete gegen das symmetrisch geordnete Symbol ersetzen. Unser Propagator hat dann die Form

$$K(z'', t; z', 0) = \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S^c(v'', u', t) - \frac{1}{2} (|v''|^2 + |u'|^2) \right\}, \quad (3.96)$$

wobei die Wirkung mittels  $H_0$  berechnet wird.

### 3.3 Ein Maß für den Fehler

Nachdem wir bis jetzt einige Näherungen zur Herleitung der Formel

$$K(z'', t; z', 0) = \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S^c(v'', u', t) - \frac{1}{2} (|v''|^2 + |u'|^2) \right\} \quad (3.97)$$



eingesetzt haben, stellt sich die Frage, wie groß der dadurch eingeführte Fehler ist und wie man diesen abschätzen kann. Da der exakte quantenmechanische Propagator  $K_{qm}$  die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K_{qm} - H_{qm} K_{qm} = 0 \quad (3.98)$$

mit der Anfangsbedingung

$$K_{qm}(z'', 0; z', 0) = \langle z'' | z' \rangle \quad (3.99)$$

löst, bietet es sich an, durch Einsetzen unserer semiklassischen Näherung (3.97) in die Schrödingergleichung (3.98) ein Maß für den Fehler zu erhalten. Zunächst sollte aber überprüft werden, ob (3.97) überhaupt die Anfangsbedingung erfüllt. Aus Gleichung (3.49) folgt für  $S^c$  zum Zeitpunkt  $t = 0$

$$S^c = -i\hbar z^{*''} z' \quad (3.100)$$

und damit für die gemischte Ableitung von  $S^c$

$$\frac{\partial^2 S^c}{\partial z' \partial z^{*''}} = -i\hbar. \quad (3.101)$$

Einsetzen in Gleichung (3.97) liefert

$$K(z'', 0; z', 0) = \sqrt{1} \exp\left(-z^{*''} z' - \frac{1}{2}(|z''|^2 + |z'|^2)\right) = \langle z'' | z' \rangle, \quad (3.102)$$

ergo ist zumindest die Forderung der Gleichung (3.99) gegeben.

Für das weitere Vorgehen ist es notwendig, nun sehr genau zwischen der dem quantenmechanischen Hamiltonoperator  $\hat{H}_{qm}$ , der in einer Basis aus kohärenten Zuständen durch Normalordnung ausgewertet wird, zugeordneten Funktion  $H_{qm}(z_1^*, z_2) = \langle z_1 | \hat{H}_{qm} | z_2 \rangle$  und seinem klassischen zugeordneten Symbol  $H_{kl}$  zu unterscheiden (vergleiche hierzu Kapitel 3.2). Letzteres ist nur im Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  eindeutig bestimmt. Differenzieren wir den Propagator  $K$  nach der Zeit  $t$ , so erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial K}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} H_{kl} K - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''}\right)^{-1/2} \frac{\partial^2 H_{kl}}{\partial u' \partial v''} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S^c(v'', u', t) - \frac{1}{2}(|v''|^2 + |u'|^2)\right\} \\ &= -\frac{i}{\hbar} H_{kl} K - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''}\right)^{-1} \frac{\partial^2 H_{kl}}{\partial u' \partial v''} K \\ &= -\frac{i}{\hbar} H_{kl} K + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} \ln\left(\frac{\partial S^c}{\partial u' \partial v''}\right)\right] K. \end{aligned} \quad (3.103)$$

In die Schrödingergleichung (3.99) eingesetzt ergibt sich dann

$$i\hbar \frac{\partial K}{\partial t} - H_{qm} K = (H_{kl} - H_{qm}) K + \frac{i\hbar}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} \ln\left(\frac{\partial S^c}{\partial u' \partial v''}\right)\right] K. \quad (3.104)$$

Wäre der Propagator exakt, so müßte die gesamte rechte Seite von (3.104) verschwinden. Dies wird im allgemeinen nicht der Fall sein, aber wir erhalten damit zumindest eine Größe zur Untersuchung des Fehlers. Betragsmäßig läßt sich dieser nun abschätzen durch

$$\left| i\hbar \frac{\partial K}{\partial t} - H_{qm} K \right| \approx \left| H_{kl} - H_{qm} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \left( \frac{\partial S^c}{\partial u' \partial v''} \right) \right|. \quad (3.105)$$

Der letzte Schritt erklärt sich aufgrund der Unitarität von  $K$  in semiklassischer Näherung. Da unitäre Operatoren die Norm eins besitzen, können wir die Norm von  $K$  abschätzen durch

$$\|K\| \approx 1. \quad (3.106)$$

Auf diesen Punkt werden wir später noch einmal zurückkommen. Interessant ist es anzumerken, daß der Propagator im semiklassischen Limes  $\hbar \rightarrow 0$  wie erwartet exakt ist. In diesem Fall gilt nämlich

$$H_{kl} = H_{qm} \quad (3.107)$$

und

$$\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \left( \frac{\partial S^c}{\partial u' \partial v''} \right) \rightarrow 0, \quad (3.108)$$

das heißt, die Schrödingergleichung wird exakt erfüllt.

## 3.4 Der Herman-Kluk-Propagator

Um für die numerische Anwendung im fünften Kapitel eine möglichst einfache Form der semiklassischen Näherung (3.97) zu erhalten, werden wir diese Gleichung nun noch ein weiteres Mal bearbeiten. Ziel ist es, durch Umschreibung in die Ortsdarstellung und eine weitere Integration den Propagator in eine „initial value representation“ zu bringen, die äußerst einfach und effizient implementiert werden kann. Dieser Schritt war kürzlich Thema eines Artikels von Großmann und Xavier [Gro98b].

Die Ortsdarstellung unseres „coherent state“-Propagators erhalten wir durch Ausintegration der kohärenten Zustände folgendermaßen:

$$K(x'', t; x', 0) = \int \frac{d^2 z' d^2 z''}{\pi^2} \langle x'' | z'' \rangle K(z'', t; z', 0) \langle z' | x' \rangle. \quad (3.109)$$

Ausgehend von der Ortsdarstellung eines kohärenten Zustandes  $|z\rangle$

$$\langle x | z \rangle = (\pi \hbar b^2)^{-1/4} \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar b^2} (x - q)^2 + \frac{i}{\hbar} p x - \frac{i}{\hbar} \frac{pq}{2} \right\}, \quad (3.110)$$

der Formel (3.32) für  $u' = z'$  und  $v'' = z''$

$$\begin{aligned} u' &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{q'}{b} + i \frac{p'}{c} \right) \\ v'' &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \frac{q''}{b} - i \frac{p''}{c} \right) \end{aligned} \quad (3.111)$$

und der semiklassischen Näherung für  $K(z'', t; z', 0)$  geht Gleichung (3.109) über in

$$K(x'', t; x', 0) = \int \frac{d^2 z' d^2 z''}{\pi^2} (\pi \hbar b^2)^{-\frac{1}{4}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar b^2} (x'' - q'')^2 + \frac{i}{\hbar} p'' x'' - \frac{i}{\hbar} \frac{p'' q''}{2} \right\} \\ \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S^c(v'', u', t) - \frac{1}{2} (|v''|^2 + |u'|^2) \right\} \langle z' | x' \rangle. \quad (3.112)$$

Die Integration über die Endzustände  $z''$  wird nun wieder mittels der generalisierten Methode der stationären Phase durchgeführt (vergleiche Kapitel A.2). Zunächst berechnen wir die Ableitung des Exponenten  $g$  nach der Variablen  $v''$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial v''} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left( b \frac{\partial}{\partial q''} + ic \frac{\partial}{\partial p''} \right) \left[ -\frac{1}{2\hbar b^2} (x'' - q'')^2 + \frac{i}{\hbar} p'' x'' - \frac{i}{\hbar} \frac{p'' q''}{2} \right] \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial v''} \left[ \frac{i}{\hbar} S^c(v'', u', t) - \frac{1}{2} (|v''|^2 + |u'|^2) \right] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left( b \left[ -\frac{1}{\hbar b^2} q'' + \frac{x''}{\hbar b^2} - \frac{i}{\hbar} \frac{p''}{2} \right] + ic \left[ \frac{i}{\hbar} x'' - \frac{i}{\hbar} \frac{q''}{2} \right] \right) + u'' - \frac{1}{2} v''^* \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\hbar}} \left( -\frac{q''}{b} + \frac{x''}{b} - \frac{i}{2} \frac{p''}{c} - \frac{x''}{b} + \frac{q''}{2b} \right) + u'' - \frac{1}{2} v''^* \\ &= u'' - \frac{1}{2} v''^* - \sqrt{\frac{1}{2\hbar}} \left( \frac{q''}{2b} + \frac{i}{2c} p'' \right) \\ &= u'' - v''^*. \end{aligned} \quad (3.113)$$

Setzen wir diese Ableitung gleich Null, so erhalten wir

$$u'' = v''^*. \quad (3.114)$$

Die Bedingung für den Punkt stationärer Phase führt also dazu, daß  $u''$  und  $v''^*$  übereinstimmen, das heißt, die Bahn ist nun nicht mehr komplex, sondern reell.

Nun berechnen wir den Integranden an der Stelle, die durch Gleichung (3.114) gegeben ist. Zunächst wenden wir uns dem Exponenten zu:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} S^c(v'', u', t) - \frac{1}{2} (|v''|^2 + |u'|^2) \\ = \int_0^t \left( \frac{1}{2} \dot{v} u - \frac{1}{2} \dot{u} v - \frac{i}{\hbar} H \right) d\tau + \frac{1}{2} v' u' + \frac{1}{2} v'' u'' - \frac{1}{2} |z'|^2 - \frac{1}{2} |z''|^2. \end{aligned} \quad (3.115)$$

Indem wir hier die Beziehung (3.111) für den Zusammenhang zwischen den Variablen  $(u, v)$  und  $(p, q)$  einsetzen und die Bedingung (3.114) für die stationäre Phase ausnutzen,

ergibt sich

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} S^c(v'', u', t) &= \frac{1}{2} (|v''|^2 + |u'|^2) \\
&= \int_0^t \left\{ \frac{1}{4\hbar} \left( \frac{\dot{q}}{b} - \frac{i}{c} \dot{p} \right) \left( \frac{q}{b} + \frac{i}{c} p \right) - \frac{1}{4\hbar} \left( \frac{\dot{q}}{b} + \frac{i}{c} \dot{p} \right) \left( \frac{q}{b} - \frac{i}{c} p \right) - \frac{i}{\hbar} H \right\} d\tau \\
&\quad + \frac{1}{4\hbar} \left( \left( \frac{q'}{b} + \frac{i}{c} p' \right) \left( \frac{q'}{b} - \frac{i}{c} p' \right) + \left( \frac{q''}{b} + \frac{i}{c} p'' \right) \left( \frac{q''}{b} - \frac{i}{c} p'' \right) \right) - \frac{1}{2} |z'|^2 - \frac{1}{2} |z''|^2 \\
&= \int_0^t \left\{ \frac{i}{2\hbar} p \dot{q} - \frac{i}{2\hbar} \dot{p} q - \frac{i}{\hbar} H \right\} d\tau \\
&= \frac{i}{\hbar} \int_0^t \{ p \dot{q} - H \} d\tau - \frac{i}{2\hbar} p q \Big|_0^t \\
&= \frac{i}{\hbar} S(p', q', t) - \frac{i}{2\hbar} p'' q'' + \frac{i}{2\hbar} p' q'. \tag{3.116}
\end{aligned}$$

Hierbei ist  $S(p', q', t)$  die klassische Wirkung entlang der Bahn, die am Punkte  $(p', q')$  im Phasenraum zur Zeit  $t = 0$  startet.

Für den Vorfaktor

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''} = \frac{\partial u''}{\partial u'} = \frac{\partial u''}{\partial p'} \frac{\partial p'}{\partial u'} + \frac{\partial u''}{\partial q'} \frac{\partial q'}{\partial u'}. \tag{3.117}$$

erhalten wir mit Hilfe von

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u''}{\partial p'} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \frac{1}{b} \frac{\partial q''}{\partial p'} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar}} \frac{1}{c} \frac{\partial p''}{\partial p'} \\
\frac{\partial u''}{\partial q'} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \frac{1}{b} \frac{\partial q''}{\partial q'} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar}} \frac{1}{c} \frac{\partial p''}{\partial q'} \tag{3.118}
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\frac{\partial p'}{\partial u'} &= -ic\sqrt{\hbar/2} \\
\frac{\partial q'}{\partial u'} &= b\sqrt{\hbar/2} \tag{3.119}
\end{aligned}$$

das Resultat

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''} &= \frac{1}{2} \left( -\frac{ic}{b} \frac{\partial q''}{\partial p'} + \frac{\partial p''}{\partial p'} + \frac{\partial q''}{\partial q'} + i \frac{b}{c} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right) \\
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S^c}{\partial u' \partial v''} &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial p''}{\partial p'} + \frac{\partial q''}{\partial q'} - im\omega \frac{\partial q''}{\partial p'} - \frac{1}{im\omega} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right). \tag{3.120}
\end{aligned}$$

Hierbei wurde ausgenutzt, daß die Beziehung  $b = 1/c = 1/\sqrt{m\omega}$  gilt.

Abschließend benötigen wir noch die zweiten Ableitungen des Exponenten am Punkte der stationären Phase. Für diese ergibt sich

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 g}{\partial q''^2} &= -\frac{3}{2\hbar b^2} & \frac{\partial^2 g}{\partial p''^2} &= -\frac{1}{2\hbar c^2} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial p'' \partial q''} &= -\frac{i}{2\hbar}\end{aligned}\tag{3.121}$$

und damit für den Vorfaktor der Gaußintegration

$$\pi \left( \frac{\partial^2 g}{\partial p''^2} \frac{\partial^2 g}{\partial q''^2} - \left( \frac{\partial^2 g}{\partial p'' \partial q''} \right)^2 \right)^{-1/2} = \pi \hbar,\tag{3.122}$$

Setzen wir all diese Ergebnisse in (3.112) ein, so erhalten wir das in der Literatur als Herman-Kluk-Propagator bekannte Resultat:

$$\begin{aligned}K(x'', t; x', 0) &= \int \frac{d^2 z'}{\pi} \langle x'' | z' \rangle \\ &\times \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\partial p''}{\partial p'} + \frac{\partial q''}{\partial q'} - im\omega \frac{\partial q''}{\partial p'} - \frac{1}{im\omega} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right)} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S - \frac{i}{2\hbar} p'' q'' + \frac{i}{2\hbar} p' q' \right\} \langle z' | x' \rangle.\end{aligned}\tag{3.123}$$

Die beiden Phasenfaktoren  $\exp(-\frac{i}{2\hbar} p'' q'')$  und  $\exp(\frac{i}{2\hbar} p' q')$  können wir zu den kohärenten Zuständen hinzufügen, indem wir setzen:

$$|z\rangle = \exp \left( -\frac{i}{2\hbar} pq \right) |p, q\rangle.\tag{3.124}$$

Damit geht (3.123) über in

$$\begin{aligned}K(x'', t; x', 0) &= \int \frac{dp' dq'}{2\pi\hbar} \langle x'' | p'', q'' \rangle \\ &\times \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\partial p''}{\partial p'} + \frac{\partial q''}{\partial q'} - im\omega \frac{\partial q''}{\partial p'} - \frac{1}{im\omega} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right)} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\} \langle p', q' | x' \rangle.\end{aligned}\tag{3.125}$$

Somit haben wir eine äußerst einfache Näherung für den quantenmechanischen Propagator, die nur auf klassischen Elementen (Wirkungen, klassische Bahnen, Stabilitätsinformationen) beruht.

## 3.5 Eigenschaften des Herman-Kluk-Propagators

In diesem Abschnitt soll kurz auf drei interessante Eigenschaften des Herman-Kluk-Propagators eingegangen werden. Es wird gezeigt, daß er – wie üblich nur im Rahmen der Näherung der stationären Phase – unitär ist und die Zeitumkehrrelation  $U^*(t) = U(-t)$  erfüllt. Weiterhin kann bewiesen werden, daß er äquivalent zum Van-Vleck-Propagator ist.

### 3.5.1 Unitarität

Unitäre Operatoren besitzen die Eigenschaft, daß ihr adjungierter Operator gleich ihrem Inversen ist:

$$U^\dagger U = \mathbb{1}. \quad (3.126)$$

Der hier untersuchte Operator beschreibt die quantenmechanische Zeitentwicklung eines physikalischen Zustands. Unter Ausnutzung dieser Tatsache können wir (3.126) umschreiben zu

$$\langle \psi(0) | \phi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \mathbb{1} | \phi(0) \rangle = \langle \psi(0) | U^\dagger(t) U(t) | \phi(0) \rangle = \langle \psi(t) | \phi(t) \rangle. \quad (3.127)$$

Die Unitarität ist also in unserem Fall äquivalent dazu, daß das Überlappmatrixelement zwischen zwei Quantenzuständen  $|\psi\rangle$  und  $|\phi\rangle$  zeitunabhängig ist. Dies werden wir dazu benutzen, um die Unitarität des Herman-Kluk-Propagators zu untersuchen.

Da die kohärenten Zustände  $|p, q\rangle$  eine übervollständige Basis bilden und damit sowohl  $|\psi\rangle$  als auch  $|\phi\rangle$  in diese zerlegt werden können, genügt es, Gleichung (3.127) für kohärente Zustände zu verifizieren. Zur Vereinfachung der Notation setzen wir zunächst

$$\begin{aligned} A(p', q', t) &= \left( \frac{1}{2} \left( \frac{\partial p''}{\partial p'} + \frac{\partial q''}{\partial q'} - im\omega \frac{\partial q''}{\partial p'} - \frac{1}{im\omega} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right) \right)^{1/2} \\ |\psi(0)\rangle &= |p_1, q_1\rangle \\ |\phi(0)\rangle &= |p_0, q_0\rangle. \end{aligned} \quad (3.128)$$

Aus dem Überlappmatrixelement der zeitentwickelten Zustände  $|\psi(t)\rangle$  und  $|\phi(t)\rangle$  wird dann

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \phi(t) \rangle &= \int \frac{dp'_1 dq'_1}{2\pi\hbar} \int \frac{dp'_0 dq'_0}{2\pi\hbar} A^*(p'_1, q'_1, t) A(p'_0, q'_0, t) \\ &\quad \exp \left( -\frac{i}{\hbar} S^*(p'_1, q'_1, p''_1, q''_1, t) + \frac{i}{\hbar} S(p'_0, q'_0, p''_0, q''_0, t) \right) \\ &\quad \langle p_1, q_1 | p'_1, q'_1 \rangle \langle p''_1, q''_1 | p''_0, q''_0 \rangle \langle p'_0, q'_0 | p_0, q_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.129)$$

Das Matrixelement zwischen zwei kohärenten Zuständen ist gegeben durch

$$\langle p'_0, q'_0 | p_0, q_0 \rangle = \exp \left( -\frac{1}{4\hbar b^2} (q'_0 - q_0)^2 - \frac{1}{4\hbar c^2} (p'_0 - p_0)^2 + \frac{i}{2\hbar} (q'_0 - q_0)(p'_0 + p_0) \right), \quad (3.130)$$

so daß der Gesamtexponent  $g$  im Integranden von Gleichung (3.129) gleich

$$\begin{aligned}
g = & -\frac{i}{\hbar} S^*(p'_1, q'_1, p''_1, q''_1, t) + \frac{i}{\hbar} S(p'_0, q'_0, p''_0, q''_0, t) \\
& - \frac{1}{4\hbar b^2} (q_1 - q'_1)^2 - \frac{1}{4\hbar c^2} (p_1 - p'_1)^2 + \frac{i}{2\hbar} (q_1 - q'_1)(p_1 + p'_1) \\
& - \frac{1}{4\hbar b^2} (q''_1 - q''_0)^2 - \frac{1}{4\hbar c^2} (p''_1 - p''_0)^2 + \frac{i}{2\hbar} (q''_1 - q''_0)(p''_1 + p''_0) \\
& - \frac{1}{4\hbar b^2} (q'_0 - q_0)^2 - \frac{1}{4\hbar c^2} (p'_0 - p_0)^2 + \frac{i}{2\hbar} (q'_0 - q_0)(p'_0 + p_0) \quad (3.131)
\end{aligned}$$

ist. Die Bedingungen für die stationäre Phase wird wie üblich durch Ableitung des Exponenten  $g$  nach den Integrationsvariablen gewonnen. Hierbei müssen wir beachten, daß die doppelt-gestrichenen Variablen jeweils von den ihnen zugeordneten einfach-gestrichenen Variablen abhängen, da erstere die Zeitentwicklung derselben darstellen. Für die erste Variable  $q'_0$  werden wir deshalb die Ableitung etwas ausführlicher darstellen:

$$\begin{aligned}
\frac{dg}{dq'_0} = & \frac{i}{\hbar} \frac{dS}{dq'_0}(p'_0, q'_0, p''_0, q''_0, t) \\
& + 0 \\
& + \frac{1}{2\hbar b^2} (q''_1 - q''_0) \frac{\partial q''_0}{\partial q'_0} + \frac{1}{2\hbar c^2} (p''_1 - p''_0) \frac{\partial p''_0}{\partial q'_0} - \frac{i}{2\hbar} (p''_1 + p''_0) \frac{\partial q''_0}{\partial q'_0} + \frac{i}{2\hbar} (q''_1 - q''_0) \frac{\partial p''_0}{\partial q'_0} \\
& - \frac{1}{2\hbar b^2} (q'_0 - q_0) + \frac{i}{2\hbar} (p'_0 + p_0). \quad (3.132)
\end{aligned}$$

Wie man sieht, benötigen wir die totale Ableitung der Wirkung  $S$

$$S(p'_0, q'_0, p''_0, q''_0, t) = \int_0^t (p\dot{q} - H) d\tau \quad (3.133)$$

nach  $q'_0$ . Es ergibt sich:

$$\begin{aligned}
\frac{dS}{dq'_0} = & \frac{\partial S}{\partial p'_0} \frac{\partial p'_0}{\partial q'_0} + \frac{\partial S}{\partial q'_0} \frac{\partial q'_0}{\partial q'_0} + \frac{\partial S}{\partial p''_0} \frac{\partial p''_0}{\partial q'_0} + \frac{\partial S}{\partial q''_0} \frac{\partial q''_0}{\partial q'_0} \\
= & 0 \quad -p'_0 \frac{\partial q'_0}{\partial q'_0} + 0 \quad + p''_0 \frac{\partial q''_0}{\partial q'_0} \\
= & p''_0 \frac{\partial q''_0}{\partial q'_0} \quad -p'_0. \quad (3.134)
\end{aligned}$$

Setzen wir dies in Gleichung (3.132) ein, so erhalten wir als Ergebnis

$$\begin{aligned}
\frac{dg}{dq'_0} = & -\frac{1}{2\hbar b^2} (q'_0 - q_0) - \frac{i}{2\hbar} (p'_0 - p_0) \\
& + \left[ \frac{1}{2\hbar b} (q''_1 - q''_0) - \frac{i}{2\hbar c} (p''_1 - p''_0) \right] \left[ \frac{1}{b} \frac{\partial q''_0}{\partial q'_0} + \frac{i}{c} \frac{\partial p''_0}{\partial q'_0} \right]. \quad (3.135)
\end{aligned}$$

Analog können wir für die anderen Ableitungen vorgehen:

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dp'_0} &= -\frac{1}{2\hbar c^2}(p'_0 - p_0) + \frac{i}{2\hbar}(q'_0 - q_0) \\ &\quad + \left[ \frac{1}{2\hbar b}(q''_1 - q''_0) - \frac{i}{2\hbar c}(p''_1 - p''_0) \right] \left[ \frac{1}{b} \frac{\partial q''_0}{\partial p'_0} + \frac{i}{c} \frac{\partial p''_0}{\partial p'_0} \right] \end{aligned} \quad (3.136)$$

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dq'_1} &= -\frac{1}{2\hbar b^2}(q'_1 - q_1) + \frac{i}{2\hbar}(p'_1 - p_1) \\ &\quad + \left[ -\frac{1}{2\hbar b}(q''_1 - q''_0) - \frac{i}{2\hbar c}(p''_1 - p''_0) \right] \left[ \frac{1}{b} \frac{\partial q''_1}{\partial q'_1} - \frac{i}{c} \frac{\partial p''_1}{\partial q'_1} \right] \end{aligned} \quad (3.137)$$

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dp'_1} &= -\frac{1}{2\hbar c^2}(p'_1 - p_1) - \frac{i}{2\hbar}(q'_1 - q_1) \\ &\quad + \left[ -\frac{1}{2\hbar b}(q''_1 - q''_0) - \frac{i}{2\hbar c}(p''_1 - p''_0) \right] \left[ \frac{1}{b} \frac{\partial q''_1}{\partial p'_1} - \frac{i}{c} \frac{\partial p''_1}{\partial p'_1} \right]. \end{aligned} \quad (3.138)$$

Es stellt sich nun die Frage, wie man hieraus am geschicktesten den Punkt stationärer Phase erhält. Einen Hinweis hierfür liefert ein Blick auf Gleichung (3.129). Es ist klar, daß das Matrixelement zwischen den beiden Zuständen nur dann zeitunabhängig sein kann, wenn sich die beiden Wirkungsterme im Exponenten gegenseitig wegheben. Dies ist aber nur dann gewährleistet, wenn die Variablensätze  $(p'_0, q'_0)$  und  $(p'_1, q'_1)$  übereinstimmen, es bietet sich also folgender Ansatz zur Bestimmung des Punktes stationärer Phase an:

$$\begin{aligned} q'_1 &= q'_0 \rightarrow q''_1 = q''_0 \\ p'_1 &= p'_0 \rightarrow p''_1 = p''_0. \end{aligned} \quad (3.139)$$

Dieser „educated guess“ liefert durch Einsetzen die vier Bestimmungsgleichungen

$$\begin{aligned} -\frac{1}{b^2}(q'_0 - q_0) - i(p'_0 - p_0) &= 0 \\ -\frac{1}{b^2}(q'_0 - q_0) - i(p'_0 - p_0) &= 0 \\ -\frac{1}{b^2}(q'_1 - q_1) + i(p'_1 - p_1) &= 0 \\ -\frac{1}{b^2}(q'_1 - q_1) + i(p'_1 - p_1) &= 0. \end{aligned} \quad (3.140)$$

Wie man leicht sieht, sind je zwei der obigen Gleichungen linear abhängig, der „educated guess“ war also korrekt, und der Punkt stationärer Phase wird bestimmt durch

$$\begin{aligned} q'_0 &= q'_1 = \frac{q_0 + q_1}{2} + ib^2 \frac{p_0 - p_1}{2} \\ p'_0 &= p'_1 = \frac{p_0 + p_1}{2} - ic^2 \frac{q_0 - q_1}{2}. \end{aligned} \quad (3.141)$$



Zur Durchführung der Gaußintegration benötigen wir wieder die zweiten Ableitungen des Exponenten ausgewertet an der Stelle der stationären Phase. Wir erhalten für die Ableitungen nach je einem Variablensatz:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 g}{dq_0'^2} \Big|_{sP} &= \frac{d^2 g}{dq_1'^2} \Big|_{sP} = -\frac{1}{2\hbar b^2} + \left[ -\frac{1}{2\hbar b} \frac{\partial q''}{\partial q'} + \frac{i}{2\hbar c} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right] \left[ \frac{1}{b} \frac{\partial q''}{\partial q'} + \frac{i}{c} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right] \\
\frac{d^2 g}{dp_0'^2} \Big|_{sP} &= \frac{d^2 g}{dp_1'^2} \Big|_{sP} = -\frac{1}{2\hbar c^2} + \left[ -\frac{1}{2\hbar b} \frac{\partial q''}{\partial p'} + \frac{i}{2\hbar c} \frac{\partial p''}{\partial p'} \right] \left[ \frac{1}{b} \frac{\partial q''}{\partial p'} + \frac{i}{c} \frac{\partial p''}{\partial p'} \right] \\
\frac{d^2 g}{dq_0' dp_0'} \Big|_{sP} &= \frac{d^2 g}{dq_1' dp_1'} \Big|_{sP} = \frac{i}{2\hbar} + \left[ -\frac{1}{2\hbar b} \frac{\partial q''}{\partial q'} + \frac{i}{2\hbar c} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right] \left[ \frac{1}{b} \frac{\partial q''}{\partial p'} + \frac{i}{c} \frac{\partial p''}{\partial p'} \right].
\end{aligned} \tag{3.142}$$

Die gemischten Ableitungen ergeben sich analog zu

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 g}{dq_0' dq_1'} \Big|_{sP} &= \frac{d^2 g}{dq_1' dq_0'} \Big|_{sP} = \left[ \frac{1}{2\hbar b} \frac{\partial q''}{\partial q'} - \frac{i}{2\hbar c} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right] \left[ \frac{1}{b} \frac{\partial q''}{\partial q'} + \frac{i}{c} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right] \\
\frac{d^2 g}{dp_0' dp_1'} \Big|_{sP} &= \frac{d^2 g}{dp_1' dp_0'} \Big|_{sP} = \left[ \frac{1}{2\hbar b} \frac{\partial q''}{\partial p'} - \frac{i}{2\hbar c} \frac{\partial p''}{\partial p'} \right] \left[ \frac{1}{b} \frac{\partial q''}{\partial p'} + \frac{i}{c} \frac{\partial p''}{\partial p'} \right] \\
\frac{d^2 g}{dp_1' dq_0'} \Big|_{sP} &= \frac{d^2 g}{dq_0' dp_1'} \Big|_{sP} = \left[ \frac{1}{2\hbar b} \frac{\partial q''}{\partial p'} - \frac{i}{2\hbar c} \frac{\partial p''}{\partial p'} \right] \left[ \frac{1}{b} \frac{\partial q''}{\partial q'} + \frac{i}{c} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right] \\
\frac{d^2 g}{dp_0' dq_1'} \Big|_{sP} &= \frac{d^2 g}{dq_1' dp_0'} \Big|_{sP} = \left[ \frac{1}{2\hbar b} \frac{\partial q''}{\partial p'} + \frac{i}{2\hbar c} \frac{\partial p''}{\partial p'} \right] \left[ \frac{1}{b} \frac{\partial q''}{\partial q'} - \frac{i}{c} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right].
\end{aligned} \tag{3.143}$$

Durch Einführung der Abkürzungen

$$\begin{aligned}
Q_{\pm} &= \frac{1}{b} \frac{\partial q''}{\partial q'} \pm \frac{i}{c} \frac{\partial p''}{\partial q'} \\
P_{\pm} &= \frac{1}{b} \frac{\partial q''}{\partial p'} \pm \frac{i}{c} \frac{\partial p''}{\partial p'}
\end{aligned} \tag{3.144}$$

und unter Berücksichtigung, daß

$$Q_- P_+ - Q_+ P_- = 2i \tag{3.145}$$

gilt, gehen die Gleichungen über in

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d^2 g}{dq_0'^2} \right|_{sP} &= \left. \frac{d^2 g}{dq_1'^2} \right|_{sP} = -\frac{1}{2\hbar b^2} + -\frac{1}{2\hbar} Q_+ Q_- \\
\left. \frac{d^2 g}{dp_0'^2} \right|_{sP} &= \left. \frac{d^2 g}{dp_1'^2} \right|_{sP} = -\frac{1}{2\hbar c^2} -\frac{1}{2\hbar} P_+ P_- \\
\left. \frac{d^2 g}{dq_0' dp_0'} \right|_{sP} &= \left. \frac{d^2 g}{dq_1' dp_1'} \right|_{sP} = -\frac{i}{2\hbar} -\frac{1}{2\hbar} Q_+ P_- \\
\left. \frac{d^2 g}{dq_0' dq_1'} \right|_{sP} &= \left. \frac{d^2 g}{dq_1' dq_0'} \right|_{sP} = \frac{1}{2\hbar} Q_+ Q_- \\
\left. \frac{d^2 g}{dp_0' dp_1'} \right|_{sP} &= \left. \frac{d^2 g}{dp_1' dp_0'} \right|_{sP} = \frac{1}{2\hbar} P_+ P_- \\
\left. \frac{d^2 g}{dp_1' dq_0'} \right|_{sP} &= \left. \frac{d^2 g}{dq_0' dp_1'} \right|_{sP} = \frac{1}{2\hbar} Q_+ P_- \\
\left. \frac{d^2 g}{dp_0' dq_1'} \right|_{sP} &= \left. \frac{d^2 g}{dq_1' dp_0'} \right|_{sP} = \frac{i}{\hbar} + \frac{1}{2\hbar} Q_+ P_- .
\end{aligned} \tag{3.146}$$

Definieren wir nun

$$A = \frac{1}{2\hbar} Q_+ Q_- \quad B = \frac{1}{2\hbar} Q_+ P_- \quad C = \frac{1}{2\hbar} P_+ P_- \tag{3.147}$$

und

$$\eta = (q_1', p_1', q_0', p_0') . \tag{3.148}$$

Der quadratische Anteil der Integration läßt sich dann schreiben als

$$g_2 = -\eta G \eta^t \tag{3.149}$$

mit

$$G = \begin{pmatrix} A + \frac{1}{2\hbar b^2} & B + \frac{i}{2\hbar} & -A & -B - \frac{i}{\hbar} \\ B + \frac{i}{2\hbar} & C + \frac{1}{2\hbar c^2} & -B & -C \\ -A & -B & A + \frac{1}{2\hbar b^2} & B + \frac{i}{2\hbar} \\ -B - \frac{i}{\hbar} & -C & B + \frac{i}{2\hbar} & C + \frac{1}{2\hbar c^2} \end{pmatrix} . \tag{3.150}$$

Die Determinante von  $G$  ergibt sich durch triviale Zeilen- und Spaltenumformungen zu

$$\begin{aligned}
\det G &= \begin{vmatrix} A + \frac{1}{2\hbar b^2} & B + \frac{i}{2\hbar} & -A & -B - \frac{i}{\hbar} \\ B + \frac{i}{2\hbar} & C + \frac{1}{2\hbar c^2} & -B & -C \\ -A & -B & A + \frac{1}{2\hbar b^2} & B + \frac{i}{2\hbar} \\ -B - \frac{i}{\hbar} & -C & B + \frac{i}{2\hbar} & C + \frac{1}{2\hbar c^2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2\hbar b^2} & -\frac{i}{2\hbar} & -A & -B - \frac{i}{\hbar} \\ \frac{i}{2\hbar} & \frac{1}{2\hbar c^2} & -B & -C \\ \frac{1}{\hbar b^2} & 0 & \frac{1}{2\hbar b^2} & -\frac{i}{2\hbar} \\ 0 & \frac{1}{\hbar c^2} & \frac{i}{2\hbar} & \frac{1}{2\hbar c^2} \end{vmatrix} \\
&= \frac{1}{2\hbar^4} + \frac{1}{2\hbar^3 c^2} A + \frac{1}{2\hbar^3 b^2} C = \frac{1}{4\hbar^4} \left[ 2 + \frac{1}{c^2} Q_+ Q_- + \frac{1}{b^2} P_+ P_- \right] \\
&= \frac{1}{4\hbar^4} \left[ iQ_+ P_- - iQ_- P_+ + \frac{1}{c^2} Q_+ Q_- + \frac{1}{b^2} P_+ P_- \right] \\
&= \frac{1}{4\hbar^4} \left[ \frac{1}{c} Q_+ + \frac{i}{b} P_+ \right] \left[ \frac{1}{c} Q_- - \frac{i}{b} P_- \right] \\
&= \frac{1}{4\hbar^4} \left( \frac{\partial p''}{\partial p'} + \frac{\partial q''}{\partial q'} - im\omega \frac{\partial q''}{\partial p'} - \frac{1}{im\omega} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right) \left( \frac{\partial p''}{\partial p'} + \frac{\partial q''}{\partial q'} + im\omega \frac{\partial q''}{\partial p'} + \frac{1}{im\omega} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right) \\
&= \frac{1}{\hbar^4} A^2(p', q', t) A^{*2}(p', q', t). \tag{3.151}
\end{aligned}$$

Dies entspricht gerade dem Vorfaktor im Integranden von Gleichung (3.129) ausgewertet am Punkt der stationären Phase, das heißt, die Determinante und der Vorfaktor heben sich nach der Gaußintegration gegenseitig weg. Es bleibt nur noch, den Punkt stationärer Phase in den Exponenten einzusetzen. Wir erhalten nach längerer, aber einfacher Rechnung:

$$g_{sP} = -\frac{1}{4\hbar b^2} (q_1 - q_0)^2 - \frac{1}{4\hbar c^2} (p_1 - p_0)^2 + \frac{i}{2\hbar} (q_1 - q_0)(p_1 + p_0). \tag{3.152}$$

Dies ist gerade der Exponent des Überlappmatrixelements der beiden kohärenten Zustände  $|p_1, q_1\rangle$  und  $|p_0, q_0\rangle$ . Insgesamt erhalten wir also das Ergebnis

$$\begin{aligned}
\langle \psi(t) | \phi(t) \rangle &= \int \frac{dp'_1 dq'_1}{2\pi\hbar} \int \frac{dp'_0 dq'_0}{2\pi\hbar} A^*(p'_1, q'_1, t) A(p'_0, q'_0, t) \\
&\quad \times \exp \left( -\frac{i}{\hbar} S^*(p'_1, q'_1, p''_1, q''_1, t) + \frac{i}{\hbar} S(p'_0, q'_0, p''_0, q''_0, t) \right) \\
&\quad \times \langle p_1, q_1 | p'_1, q'_1 \rangle \langle p''_1, q''_1 | p''_0, q''_0 \rangle \langle p'_0, q'_0 | p_0, q_0 \rangle \\
&= \langle \psi(0) | \phi(0) \rangle \tag{3.153}
\end{aligned}$$

Damit ist gezeigt, daß der Herman-Kluk-Propagator im Rahmen der Näherung der stationären Phase unitär und somit normerhaltend ist.

### 3.5.2 Zeitumkehr

Bekanntlich entspricht für zeitungkehrinvariante Hamiltonoperatoren das Inverse des Zeitentwicklungsoperators bis zu einem Zeitpunkt  $t$  gerade dem Zeitentwicklungsoperator mit

dem Argument  $-t$ , genauer

$$U^{-1}(t) = U^\dagger(t) = U(-t) \quad (3.154)$$

bzw.

$$U^\dagger(-t) = U(t). \quad (3.155)$$

Hieraus folgt direkt für das Matrixelement zweier Zustände zu den Zeiten  $-t$  und  $0$

$$\langle \psi(-t) | \phi(0) \rangle = \langle \psi(0) | U^\dagger(-t) | \phi(0) \rangle = \langle \psi(0) | U(t) | \phi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \phi(t) \rangle. \quad (3.156)$$

Wir werden diese Beziehung nutzen, um die Zeitumkehrrelation (3.154) für den Herman-Kluk-Propagator zu verifizieren und uns dabei wie im letzten Abschnitt auf kohärente Zustände  $|\psi\rangle = |p_1, q_1\rangle$  und  $|\phi\rangle = |p_0, q_0\rangle$  beschränken. Die rechte Seite von Gleichung (3.156) lautet

$$\begin{aligned} \langle \psi(0) | \phi(t) \rangle &= \int \frac{dp'_0 dq'_0}{2\pi\hbar} \langle p_1, q_1 | p'_0, q'_0 \rangle \\ &\quad \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial q'_0}{\partial q'_0} + \frac{\partial p'_0}{\partial p'_0} - im\omega \frac{\partial q'_0}{\partial p'_0} - \frac{1}{im\omega} \frac{\partial p'_0}{\partial q'_0} \right) \right]^{1/2} \\ &\quad \exp \left( \frac{i}{\hbar} S(q'', q', t) \right) \langle p'_0, q'_0 | p_0, q_0 \rangle, \end{aligned} \quad (3.157)$$

und es ist leicht einzusehen, daß wir die linke Seite schreiben können als

$$\begin{aligned} \langle \psi(-t) | \phi(0) \rangle &= \int \frac{dp''_0 dq''_0}{2\pi\hbar} \langle p_1, q_1 | p''_0, q''_0 \rangle \\ &\quad \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial q'_0}{\partial q''_0} + \frac{\partial p'_0}{\partial p''_0} + im\omega \frac{\partial q'_0}{\partial p''_0} + \frac{1}{im\omega} \frac{\partial p'_0}{\partial q''_0} \right) \right]^{1/2} \\ &\quad \exp \left( -\frac{i}{\hbar} S(q'', q', -t) \right) \langle p'_0, q'_0 | p_0, q_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.158)$$

Wir müssen also zeigen, daß (3.157) und (3.158) übereinstimmen. Für die Wirkung  $S$ , die als Exponent in den Integralen auftritt, ist dies sehr einfach einzusehen. Ausgehend von ihrer Definition erhalten wir unmittelbar

$$S(q'', q', t) = \int_0^t (p\dot{q} - H) d\tau = - \int_0^{-t} (p\dot{q} - H) d\tau = -S(q'', q', -t), \quad (3.159)$$

wobei die Ersetzung  $\tau \rightarrow -\tau$  durchgeführt wurde.

Der Wechsel von den Integrationsvariablen  $(p'_0, q'_0)$  auf die Endwerte  $(p''_0, q''_0)$  erfolgt durch die Substitution

$$(p'_0, q'_0) = f(p''_0, q''_0). \quad (3.160)$$

Die Abbildung  $f$  ist dann gerade die Inverse der Zeitevolution, und da die Zeitentwicklung eine kanonische Transformation ist, ist auch  $f$  kanonisch. Der Betrag der Determinante der Jacobimatrix von  $f$  ist damit gleich 1. Zu diskutieren bleibt nun nur noch der Amplitudenvorfaktor  $A$ . Die Gleichheit dieser Ausdrücke läßt sich folgendermaßen sehen. Ausgehend von

$$A^2(p'_0, q'_0, t) = \frac{1}{2} \left| \begin{array}{cc} 1 & -\frac{\partial q''_0}{\partial q'_0} + \frac{1}{im\omega} \frac{\partial p''_0}{\partial q'_0} \\ 1 & \frac{\partial p''_0}{\partial p'_0} - im\omega \frac{\partial q''_0}{\partial p'_0} \end{array} \right| \quad (3.161)$$

und der Definition

$$\begin{aligned} P' &= p'_0 + im\omega q'_0 \\ P'' &= p''_0 - im\omega q''_0 \end{aligned} \quad (3.162)$$

erhalten wir nach kurzer Rechnung unter Ausnutzung der Kettenregel

$$A^2(p'_0, q'_0, t) = \frac{1}{2im\omega} \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial P'}{\partial q'_0} & \frac{\partial P''}{\partial q'_0} \\ \frac{\partial P'}{\partial p'_0} & \frac{\partial P''}{\partial p'_0} \end{array} \right| = \frac{1}{2im\omega} \left| \begin{pmatrix} \frac{\partial q''_0}{\partial q'_0} & \frac{\partial p''_0}{\partial q'_0} \\ \frac{\partial q''_0}{\partial p'_0} & \frac{\partial p''_0}{\partial p'_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial P'}{\partial q''_0} & \frac{\partial P''}{\partial q''_0} \\ \frac{\partial P'}{\partial p''_0} & \frac{\partial P''}{\partial p''_0} \end{pmatrix} \right|. \quad (3.163)$$

Die erste Matrix in Gleichung (3.163) ist gerade die Jacobimatrix der Zeitentwicklung der Anfangswerte  $(p'_0, q'_0)$ , und hat wiederum als kanonische Transformation die Determinante eins. Es bleibt also nur noch die Determinante der zweiten Matrix zu berechnen, diese ergibt sich zu

$$A^2(p'_0, q'_0, t) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial q'_0}{\partial q''_0} + \frac{\partial p'_0}{\partial p''_0} + im\omega \frac{\partial q'_0}{\partial p''_0} + \frac{1}{im\omega} \frac{\partial p'_0}{\partial q''_0} \right) = A^{*2}(p''_0, q''_0, -t) \quad (3.164)$$

Somit ist gezeigt, daß die Formeln (3.157) und (3.158) übereinstimmen. Es ist zu bemerken, daß die Zeitumkehr bewiesen werden konnte, ohne eine einzige Näherung durchzuführen, das heißt, der Herman-Kluk-Propagator erfüllt die Zeitumkehrrelation nicht nur im Sinne eines semiklassischen Limes sondern exakt.

### 3.5.3 Van Vleck-Gutzwiller-Propagator

Durch Integration über die Anfangszustände  $(p', q')$  erhalten wir aus dem Herman-Kluk-Propagator den Van Vleck-Gutzwiller-Propagator [Gut67]. Dieses Resultat ist nicht weiter verwunderlich, wenn wir bedenken, daß die ursprüngliche Herleitung des Herman-Kluk-Propagators durch Herman und Kluk [Her84] von der Näherung des Van Vleck-Gutzwiller-Propagators ausgeht:

$$K_{VVG}(x'', t; x', 0) = \left( \frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x' \partial x''} \right)^{-1/2} \exp \left( \frac{i}{\hbar} S(x', x'') \right). \quad (3.165)$$

Der Van Vleck-Gutzwiller-Propagator hat den Nachteil, daß bei ihm Singularitäten im Vorfaktor auftreten können, da es sich um eine reine Orts- und keine Phasenraumdarstellung handelt. Diese Singularitäten bezeichnet man als Kaustiken, sie beschreiben Punkte

$x''$  im Ortsraum, an denen verschiedene Trajektorien, die am Punkte  $x'$  beginnen, zur Zeit  $t$  zusammenlaufen. Die Abbildung  $x' \rightarrow x''$  ist hier nicht umkehrbar, und  $\partial x'/\partial x''$  singular. Anders verhält es sich beim Herman-Kluk-Propagator. Da dieser auf Bahnen im Phasenraum zurückgreift, können Singularitäten nicht auftreten, denn aufgrund des Satzes von Liouville schneiden sich zwei Trajektorien im Phasenraum nicht [Gol80]. Dies ist ein bedeutender Vorteil von Phasenraummethoden, da wir uns nicht überlegen müssen, wie der Propagator über auftretende Singularitäten fortgesetzt werden muß. Beim Van Vleck-Gutzwiller-Propagator führen unter anderem solche Überlegungen zur Einführung des Maslov-Indizes [Sep96].

### 3.6 Der Harmonische Oszillator

Zum Abschluß dieses Kapitels wollen wir nun noch zeigen, daß der Herman-Kluk-Propagator im Fall des Harmonischen Oszillators exakt ist. Der Propagator ist gegeben durch

$$K(x'', t; x', 0) = \int \frac{dp' dq'}{2\pi\hbar} \langle x'' | p'', q'' \rangle A(p', q', t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \langle p', q' | x' \rangle \quad (3.166)$$

mit

$$S = \int_0^t (p(\tau)\dot{q}(\tau) - H) d\tau. \quad (3.167)$$

Dabei haben wir wie bisher

$$A(p', q', t) = \left( \frac{1}{2} \left( \frac{\partial p''}{\partial p'} + \frac{\partial q''}{\partial q'} - i \frac{1}{b^2} \frac{\partial q''}{\partial p'} + i b^2 \frac{\partial p''}{\partial q'} \right) \right)^{1/2} \quad (3.168)$$

gesetzt. Der „squeezing“-Parameter  $b$  berücksichtigt hierbei, daß sich die mit den kohärenten Zuständen verknüpfte Frequenz  $\omega_c$  von der des betrachteten Oszillators  $\omega$  unterscheiden kann. Wir werden nun die verschiedenen Beiträge zu Gleichung (3.166) im Fall des Harmonischen Oszillators berechnen. Zunächst müssen wir hierzu die klassischen Trajektorien bestimmen, die die Anfangsbedingungen

$$p(0) = p' \quad \text{und} \quad q(0) = q' \quad (3.169)$$

erfüllen. Die Hamiltonfunktion ist gegeben durch

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2. \quad (3.170)$$

Somit lauten die Bewegungsgleichungen

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad (3.171)$$

und

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega^2 q. \quad (3.172)$$

Diese beiden gekoppelten Differentialgleichungen können direkt gelöst werden. Unter Beachtung der Anfangsbedingungen (3.169) sind die Lösungen gegeben durch

$$\begin{aligned} q(t) &= \frac{p'}{m\omega} \sin(\omega t) + q' \cos(\omega t) \\ p(t) &= p' \cos(\omega t) - m\omega q' \sin(\omega t). \end{aligned} \quad (3.173)$$

Hieraus erhalten wir unter Berücksichtigung, daß  $p(t) = p''$  und  $q(t) = q''$  ist, die Glieder, die im Amplitudenvorfaktor  $A(p', q', t)$  vorkommen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial q''}{\partial q'} &= \cos(\omega t), & \frac{\partial p''}{\partial p'} &= \cos(\omega t), \\ \frac{\partial q''}{\partial p'} &= \frac{1}{m\omega} \sin(\omega t), & \frac{\partial p''}{\partial q'} &= -m\omega \sin(\omega t). \end{aligned} \quad (3.174)$$

Einsetzen dieses Ergebnisses in  $A(p', q', t)$  liefert

$$\begin{aligned} A(p', q', t) &= \left( \frac{1}{2} \left( \frac{\partial p''}{\partial p'} + \frac{\partial q''}{\partial q'} - i \frac{1}{b^2} \frac{\partial q''}{\partial p'} + i b^2 \frac{\partial p''}{\partial q'} \right) \right)^{1/2} \\ &= \left( \frac{1}{2} \left( 2 \cos(\omega t) - \frac{i}{b^2 m \omega} \sin(\omega t) - i b^2 m \omega \sin(\omega t) \right) \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.175)$$

Nun berechnen wir die Wirkung (1.1) entlang der klassischen Trajektorien:

$$\begin{aligned} S &= \int_0^t L d\tau \\ &= \int_0^t \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \right] d\tau \\ &= \int_0^t \left[ \frac{1}{2} m \left( \frac{p'}{m} \cos(\omega \tau) - \omega q' \sin(\omega \tau) \right)^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 \left( \frac{p'}{m\omega} \sin(\omega \tau) + q' \cos(\omega \tau) \right)^2 \right] d\tau \\ &= \int_0^t \left[ \frac{p'^2}{m} \cos^2(\omega \tau) - 2p'q'\omega \sin(\omega \tau) \cos(\omega \tau) + q'^2 m \omega^2 \sin^2(\omega \tau) - \frac{p'^2}{2m} - \frac{1}{2} m \omega^2 q'^2 \right] d\tau \\ &= \left( \frac{1}{2m\omega} p'^2 - \frac{1}{2} m \omega q'^2 \right) \sin(\omega t) \cos(\omega t) - p'q' \sin^2(\omega t) \end{aligned} \quad (3.176)$$

Ein Blick auf die Gleichungen (3.124) und (3.166) zeigt, daß der Gesamtexponent im Integranden einen Term folgender Art enthält:

$$\frac{1}{2} (q'' p'' - q' p') = \left( \frac{1}{2m\omega} p'^2 - \frac{1}{2} m \omega q'^2 \right) \sin(\omega t) \cos(\omega t) - p'q' \sin^2(\omega t). \quad (3.177)$$

Dieser Term und die Wirkung heben sich gerade weg. Für die Integration müssen wir also nur noch die beiden Beiträge

$$\langle x'' | z'' \rangle = (\pi \hbar b^2)^{-1/4} \exp \left( -\frac{1}{2\hbar b^2} (x'' - q'')^2 + \frac{i}{\hbar} p'' x'' - \frac{i}{\hbar} \frac{p'' q''}{2} \right) \quad (3.178)$$

$$\langle z' | x' \rangle = (\pi \hbar b^2)^{-1/4} \exp \left( -\frac{1}{2\hbar b^2} (x' - q')^2 - \frac{i}{\hbar} p' x' + \frac{i}{\hbar} \frac{p' q'}{2} \right) \quad (3.179)$$

berücksichtigen. Für den Gesamtexponenten  $g$  erhalten wir also

$$\begin{aligned} g(p', q') &= -\frac{1}{2\hbar b^2} ((x'' - q'')^2 + (x' - q')^2) + \frac{i}{\hbar} \left( p'' x'' - \frac{1}{2} p'' q'' - p' x' + \frac{1}{2} p' q' \right) \\ &= -\begin{pmatrix} p' & q' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p' \\ q' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p' \\ q' \end{pmatrix} + c. \end{aligned} \quad (3.180)$$

Die Koeffizienten der Matrix  $A = (a_{ij})$  und des Vektors  $(b_j)$  lauten unter Verwendung der Gleichungen (3.173)

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{1}{2\hbar b^2} \frac{1}{m^2 \omega^2} \sin^2(\omega t) + \frac{i}{2\hbar} \frac{1}{m\omega} \sin(\omega t) \cos(\omega t) \\ a_{22} &= \frac{1}{2\hbar b^2} (1 + \cos^2(\omega t)) - \frac{i}{2\hbar} m\omega \sin(\omega t) \cos(\omega t) \\ a_{12} &= a_{21} = \frac{1}{2\hbar b^2} \frac{1}{m\omega} \sin(\omega t) \cos(\omega t) - \frac{i}{2\hbar} \sin^2(\omega t) \\ b_1 &= \frac{1}{\hbar b^2} \frac{1}{m\omega} x'' + \frac{i}{\hbar} (x'' \cos(\omega t) - x') \\ b_2 &= \frac{1}{\hbar b^2} x'' + \frac{1}{\hbar b^2} x' - \frac{i}{\hbar} m\omega x'' \sin(\omega t) \\ c &= -\frac{1}{2\hbar b^2} (x''^2 + x'^2). \end{aligned} \quad (3.181)$$

Damit ergibt sich der Vorfaktor der Gaußintegration zu

$$\frac{\pi}{\sqrt{\det A}} = \pi \left[ \frac{1}{4\hbar^2 b^2 m\omega} \sin(\omega t) \left( 2i \cos(\omega t) + \frac{1}{b^2 m\omega} \sin(\omega t) + b^2 m\omega \sin(\omega t) \right) \right]^{-1/2}. \quad (3.182)$$

Zusammen mit Gleichung (3.175) und dem Phasenraummaß  $1/(2\pi\hbar)$  erhalten wir abschließend

$$K(x'', t; x', 0) = \left( \frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i m\omega}{2\hbar \sin(\omega t)} [(x'^2 + x''^2) \cos(\omega t) - 2x' x''] \right). \quad (3.183)$$

Dies entspricht – bis auf die Berücksichtigung der im Vorfaktor auftretenden Singularitäten für  $\omega t = k\pi$ ,  $k \in \mathbb{Z}$  – gerade der Feynman-Soriau-Formel [Dit92]. Letztere ist der



exakte quantenmechanische Propagator für den Harmonischen Oszillator. Der Herman-Kluk-Propagator ist also, wie erwartet, im Fall des Harmonischen Oszillators exakt.

Betrachten wir die Spur dieses Propagators ( $x' = x'' = x$ ):

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} dx K(x, t; x, 0) &= \\
 &= \left( \frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \left( \frac{i m \omega}{\hbar \sin(\omega t)} (x^2 \cos(\omega t) - x^2) \right) \\
 &= \frac{1}{2i \sin(\omega t/2)} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i(n+1/2)\omega t}. \tag{3.184}
 \end{aligned}$$

Um dieses Resultat mit dem exakten quantenmechanischen Propagator vergleichen zu können, betrachten wir einen vollständigen, normalisierten Satz von Eigenfunktionen  $\{|\psi_n\rangle\}$  des Hamiltonoperators

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \tag{3.185}$$

das heißt

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle. \tag{3.186}$$

Wie aus der Quantenmechanik wohlbekannt ist, kann der Propagator  $K(x'', t; x', 0)$  dargestellt werden als

$$K(x'', t; x', 0) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \langle x'' | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x' \rangle, \tag{3.187}$$

und in dieser Form kann die Spur des Hamiltonoperators berechnet werden zu

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx K(x, t; x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}. \tag{3.188}$$

Wenn wir nun Gleichung (3.184) und (3.188) vergleichen, erhalten wir für die Energieeigenwerte des Hamiltonoperators den Ausdruck

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega. \tag{3.189}$$

Wie erwartet ist der Herman-Kluk-Propagator im Fall des Harmonischen Oszillators und allgemeiner im Fall höchstens quadratischer Potentiale exakt.

## 3.7 Zusammenfassung

In diesem Kapitel haben wir eine Herleitung des Propagationsoperators im Phasenraum über Pfadintegralmethoden vorgestellt. Durch eine weitere Integration wurde hieraus der Herman-Kluk-Propagator hergeleitet und dessen Eigenschaften diskutiert. Der Herman-Kluk-Propagator ist im Rahmen der Näherung der stationären Phase unitär und erfüllt die Zeitumkehrrelation. Auch seine Äquivalenz zum Van-Vleck-Gutzwiller-Propagator wurde erwähnt. Abschließen konnten wir zeigen, daß der Herman-Kluk-Propagator im Fall des Harmonischen Oszillators die korrekten quantenmechanischen Ergebnisse liefert.

# Kapitel 4

## Numerische Methoden

In diesem Kapitel wird die Implementierung des Herman-Kluk-Propagators dargestellt. Hierzu wird vorgestellt, wie der Beitrag eines Phasenraumpunktes zum Gesamtintegral berechnet werden kann. Weiterhin wird eine phasenraumsensitive Integrationsroutine beschrieben. Abschließend werden drei Verfahren geschildert, mit denen Eigenwerte eines Hamiltonoperators gewonnen werden können: Fouriertransformation, Matrixdiagonalisierung und Filterdiagonalisierung.

### 4.1 Berechnung des Integranden

Angenommen, wir wollen die Autokorrelationsfunktion  $C(t)$  eines kohärenten Zustandes  $|p, q\rangle$  berechnen. Mit unserer semiklassischen Näherung lautet diese

$$\begin{aligned} C(t) &= \langle p, q | U(t) | p, q \rangle \\ &= \int \frac{dp' dq'}{2\pi\hbar} \langle p, q | p'', q'' \rangle A(p', q', t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(p', q', t)\right) \langle p', q' | p, q \rangle. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Um die Integration über ein wie auch immer geartetes Gitter durchführen zu können, wird der Integrand für jeden Gitterpunkt  $(p', q')$  zur aktuellen Zeit  $t$  benötigt. Im einzelnen müssen wir die Wirkung  $S(p', q', t)$ , den Endpunkt  $(p'', q'')$  und den Vorfaktor  $A(p', q', t)$  für die klassische Bahn berechnen, die am Punkte  $(p', q')$  startet und deren zeitliche Entwicklung durch die Hamiltonschen Gleichungen

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad \text{und} \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (4.2)$$

gegeben ist. Zunächst leiten wir hierfür Bewegungsgleichungen für  $S$  und die Elemente her, die in  $A(p', q', t)$  einfließen. Ausgehend von ihrer Definition erhalten wir unmittelbar für die Wirkung eine Differentialgleichung erster Ordnung

$$\dot{S} = L = p\dot{q} - H \quad (4.3)$$

mit der Anfangsbedingung

$$S(p', q', t = 0) = 0. \quad (4.4)$$

Den Vorfaktor  $A(p', q', t)$  werden wir ein wenig anders behandeln. Unter Berücksichtigung von Gleichung (3.128) erhalten wir für seinen Logarithmus

$$\ln A(p', q', t) = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\partial p''}{\partial p'} + \frac{\partial q''}{\partial q'} - im\omega \frac{\partial q''}{\partial p'} - \frac{1}{im\omega} \frac{\partial p''}{\partial q'} \right) - \frac{1}{2} \ln 2 \quad (4.5)$$

mit dem Startwert

$$\ln A(p', q', 0) = 0. \quad (4.6)$$

Später wird klar werden, weshalb wir  $\ln A(p', q', t)$  und nicht  $A(p', q', t)$  selbst betrachten. Anhand von (4.5) sehen wir, daß zur Bestimmung von  $A(p', q', t)$  die Stabilitätsinformationen  $\partial p''/\partial p'$  usw. zu jedem Zeitpunkt benötigt werden. Ihre zeitlichen Ableitungen sind nun gerade

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial p''}{\partial p'} &= \frac{\partial}{\partial p'} \left( -\frac{\partial H}{\partial q''} \right) = -\frac{\partial^2 H}{\partial q''^2} \frac{\partial q''}{\partial p'} - \frac{\partial^2 H}{\partial p'' \partial q''} \frac{\partial p''}{\partial p'} \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial p''}{\partial q'} &= \frac{\partial}{\partial q'} \left( -\frac{\partial H}{\partial q''} \right) = -\frac{\partial^2 H}{\partial q''^2} \frac{\partial q''}{\partial q'} - \frac{\partial^2 H}{\partial p'' \partial q''} \frac{\partial p''}{\partial q'} \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial q''}{\partial p'} &= \frac{\partial}{\partial p'} \left( \frac{\partial H}{\partial p''} \right) = \frac{\partial^2 H}{\partial p''^2} \frac{\partial p''}{\partial p'} + \frac{\partial^2 H}{\partial p'' \partial q''} \frac{\partial q''}{\partial p'} \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial q''}{\partial q'} &= \frac{\partial}{\partial q'} \left( \frac{\partial H}{\partial p''} \right) = \frac{\partial^2 H}{\partial p''^2} \frac{\partial p''}{\partial q'} + \frac{\partial^2 H}{\partial p'' \partial q''} \frac{\partial q''}{\partial q'} \end{aligned} \quad (4.7)$$

mit den Anfangsbedingungen

$$\frac{\partial p'}{\partial p'} = 1, \quad \frac{\partial p'}{\partial q'} = 0, \quad \frac{\partial q'}{\partial p'} = 0, \quad \frac{\partial q'}{\partial q'} = 1. \quad (4.8)$$

Mit der aus der klassischen Mechanik bekannten Monodromiematrix  $M$

$$M = \begin{pmatrix} \frac{\partial q''}{\partial q'} & \frac{\partial q''}{\partial p'} \\ \frac{\partial p''}{\partial q'} & \frac{\partial p''}{\partial p'} \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

lassen sich die Gleichungen (4.7) zusammenfassen. Die Monodromiematrix beschreibt, wie sich anfänglich im Phasenraum benachbarte Bahnen im Laufe der Zeit voneinander entfernen. Leiten wir sie nach der Zeit ab, so ergibt sich unter Berücksichtigung von Gleichung (4.7)

$$\dot{M} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \dot{q}''}{\partial q'} & \frac{\partial \dot{q}''}{\partial p'} \\ \frac{\partial \dot{p}''}{\partial q'} & \frac{\partial \dot{p}''}{\partial p'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial p'' \partial q''} & \frac{\partial^2 H}{\partial p''^2} \\ -\frac{\partial^2 H}{\partial q''^2} & -\frac{\partial^2 H}{\partial p'' \partial q''} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial q''}{\partial q'} & \frac{\partial q''}{\partial p'} \\ \frac{\partial p''}{\partial q'} & \frac{\partial p''}{\partial p'} \end{pmatrix} = J \text{Hess}(H) M, \quad (4.10)$$

wobei  $\text{Hess}(H)$  die Hessematrix des Hamiltonoperators

$$\text{Hess}(H) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial q'^2} & \frac{\partial^2 H}{\partial p'' \partial q''} \\ \frac{\partial^2 H}{\partial p'' \partial q''} & \frac{\partial^2 H}{\partial p''^2} \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

ist. Die Matrix  $J$  ist der Kern der symplektischen Bilinearform:

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Aufgrund dieses Zusammenhangs zwischen der Monodromiematrix  $M$  und der Amplitude  $A(p', q', t)$  bezeichnet man letztere auch als Stabilitätsfaktor.

Um die verschiedenen Größen zum Zeitpunkt  $t$  zu erhalten, werden nun die jeweiligen Bewegungsgleichungen (4.2), (4.3) und (4.7) unter Beachtung der Anfangsbedingungen integriert. Die Methode der Wahl war in dem hier vorliegenden Fall der Runge-Kutta-Fehlberg-Algorithmus RKF 7(8) [Feh70, Dor80, Dor86, Pri81]. Dieser Algorithmus RKF 7(8) ist ein einfach implementierbares Verfahren mit adaptiver Schrittweite. Die Propagation wird dabei in siebter Ordnung durchgeführt. Die achte Ordnung wird zur Schrittweitenkontrolle benutzt.

## 4.2 Integration

Die bei der Implementierung des Algorithmus verwendete und in unserer Arbeitsgruppe entwickelte Integrationsmethode verbindet mehrere Vorteile:

- Sie ist phasenraumsensitiv, das heißt, „interessante“ Gebiete werden stärker berücksichtigt als „uninteressante“. Dies wird durch eine Selbstverfeinerung des Integrationsgitters ermöglicht.
- Sie ist an schnell oszillierende Integranden, die in unserem Problem aufgrund der komplexen Exponentialterme auftauchen, angepaßt.
- Die Integrationsroutine liefert selbst Informationen über das zugrundeliegende, klassische Problem.

Ein Nachteil dieses Verfahrens ist die recht aufwendige Implementierung. Dies wird aber durch die obigen Vorteile bei weitem ausgeglichen.

Anhand des Beispiels der Autokorrelationsfunktion (4.1) soll die Integrationsroutine exemplarisch erläutert werden. Die Autokorrelationsfunktion  $C(t)$  ist gegeben durch

$$C(t) = \int \frac{dp' dq'}{2\pi \hbar} \exp(f(p', q', t)), \quad (4.13)$$

wobei wir zur Vereinfachung der Notation die Funktion

$$f(p', q', t) = \frac{i}{\hbar} S(p', q', t) + \ln A(p', q', t) + \ln \langle p, q | p'', q'' \rangle + \ln \langle p', q' | p, q \rangle \quad (4.14)$$

eingeführt haben. Über den interessierenden Teil des Phasenraums legen wir nun ein grobes Gitter in Form von Eckpunkten gleichseitiger Dreiecke, also speziellen 2-Simplizes. Aufgrund der starken Dämpfung des Integranden durch die beiden Gaußglocken  $\langle p, q | p'', q'' \rangle$  und  $\langle p', q' | p, q \rangle$  kann das dabei betrachtete Gebiet zumeist stark eingeschränkt werden, das heißt, die wesentlichen Integralbeiträge sind gegeben durch die Umgebung des Zustands  $|p, q\rangle$  und das Umfeld der klassischen Bahn des Maximums dieses Gaußpaketes.

Das Integral über den gesamten Phasenraum zerlegen wir nun in eine Summe über die einzelnen Dreiecke:

$$C(t) = \int \frac{dp' dq'}{2\pi\hbar} \exp(f(p', q', t)) = \sum_{S_i \in \mathbf{S}} \int_{S_i} \frac{dp' dq'}{2\pi\hbar} \exp(f(p', q', t)) . \quad (4.15)$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{S}$  die Menge aller Simplizes. Bei der Integration über einen Simplex wird nun  $f(p', q', t)$  über diesen linear interpoliert. Durch die Linearisierung des Exponenten anstatt des Integranden wie sonst üblich tragen wir der schnellen Oszillation des Integranden Rechnung.

Zur Vereinfachung nehmen wir an, daß die linke untere Ecke des aktuell betrachteten Simplex im Ursprung liegt und eine weitere auf der  $q'$ -Achse; dies kann immer durch eine Translation des Gitters und eine eventuelle Rotation erreicht werden. Die Interpolation des Integranden lautet dann

$$f(p', q', t) = f(0, 0, t) + aq' + bp' , \quad (4.16)$$

wobei  $a$  die Steigung entlang der Orts- und  $b$  die Steigung entlang der Impulsachse ist:

$$\begin{aligned} a &= \frac{f(0, q_2, t) - f(0, 0, t)}{q_2} \\ b &= \frac{f(p_3, q_3, t) - f(0, 0, t) - aq_3}{p_3} . \end{aligned} \quad (4.17)$$

In dieser Näherung kann dann der Beitrag des aktuellen Simplex mit den Eckpunkten  $(0, 0)$ ,  $(q_2, 0)$  und  $(q_3, p_3)$  bestimmt werden zu

$$\begin{aligned} \int_{S_i} \frac{dp' dq'}{2\pi\hbar} \exp(f(p', q', t)) &\approx \frac{\exp(f(0, 0, t))}{2\pi\hbar ab} \\ &\left( \frac{aq_3 e^{aq_3} (e^{bp_3} - 1) + bp_3 (1 - e^{aq_3})}{aq_3 + bp_3} \right. \\ &\left. + \frac{a(q_2 - q_3) e^{aq_3 + bp_3} + (a(q_3 - q_2) + bp_3) e^{aq_3} - bp_3 e^{aq_3}}{a(q_3 - q_2) + bp_3} \right) . \end{aligned} \quad (4.18)$$

Aufgrund der endlichen Rechengenauigkeit eines Computers und der Möglichkeit des Verschwindens der Steigungen  $a = 0$  oder  $b = 0$  werden die Fälle, in denen die Steigungen  $a$  und  $b$  betragsmäßig kleiner als ein charakteristischer Wert  $\varepsilon$  sind, separat behandelt. Durch Taylorreihenentwicklung bis zur zweiten Ordnung ergeben sich die jeweiligen Näherungen

$$\begin{aligned}
 \int_{S_i} \frac{dp'dq'}{2\pi\hbar} \exp(f(p', q', t)) &\approx \\
 &\approx \frac{p_3}{2\pi\hbar a^2} \exp(f(0, 0, t)) \left( \frac{1}{q_3} (1 - e^{aq_3}) + \frac{1}{q_3 - q_2} (e^{aq_3} - e^{aq_2}) \right) && \text{für } |b| < \varepsilon \\
 &\approx -\frac{q_2}{2\pi\hbar b} \exp(f(0, 0, t)) \left( 1 - \frac{1 - e^{bp_3}}{bp_3} \right) && \text{für } |a| < \varepsilon \\
 &\approx \frac{q_2 p_3}{4\pi\hbar} \exp(f(0, 0, t)) && \text{für } |a|, |b| < \varepsilon.
 \end{aligned}
 \tag{4.19}$$

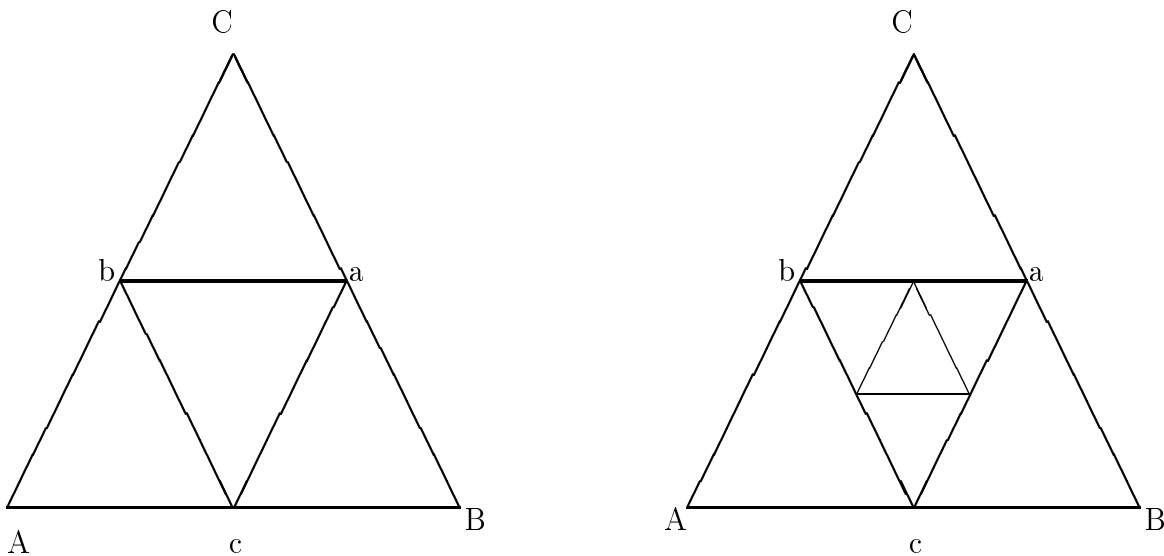


Abbildung 4.1: Struktur der Simplizes

Die Finesse der Routine liegt darin, wie das anfangs grobe Gitter verfeinert wird. Betrachten wir hierzu Abbildung 4.1, die einen Ausschnitt in Form von vier Simplizes  $\triangle(AcB, cBa, baC, abc)$  des Grades 0 (unverfeinert) aus dem Startgitter zeigt. Um zu testen, ob der innere Simplex  $\triangle abc$  verfeinert werden soll, wird der Integralbeitrag  $I(\triangle)$  der vier Simplizes mit dem Beitrag verglichen, der sich aus der Interpolation über das größere Dreieck  $\triangle ABC$  ergibt. Sind beide Werte im wesentlichen gleich

$$|I(\triangle ABC) - I(\triangle abc) - I(\triangle Acb) - I(\triangle cBa) - I(\triangle baC)| < \varepsilon_q, \tag{4.20}$$

so ist die aktuelle Näherung noch hinreichend genau, und der aktuelle Simplex  $\Delta abc$  wird nicht verfeinert. Überschreitet der Betrag der Differenz hingegen den vorgegebenen Wert  $\varepsilon_q > 0$

$$|I(\Delta ABC) - I(\Delta abc) - I(\Delta Acb) - I(\Delta cBa) - I(\Delta baC)| > \varepsilon_q, \quad (4.21)$$

so wird das aktuelle Gitter durch Einführung neuer Simplizes verfeinert, wobei der aktuelle Simplex des Grades 0 in vier Simplizes des Grades 1 unterteilt wird (vergleiche Abbildung 4.1 rechts). Dieses Verfahren wird für alle Simplizes eines Grades und iterativ für alle Verfeinerungsgrade durchgeführt.

Abbildung 4.2 zeigt ein Beispiel für diese Routine zu vier verschiedenen Zeitpunkten. Das erste Bild zeigt den kohärenten Zustand  $|p = 0, q = 1.75\rangle$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  in

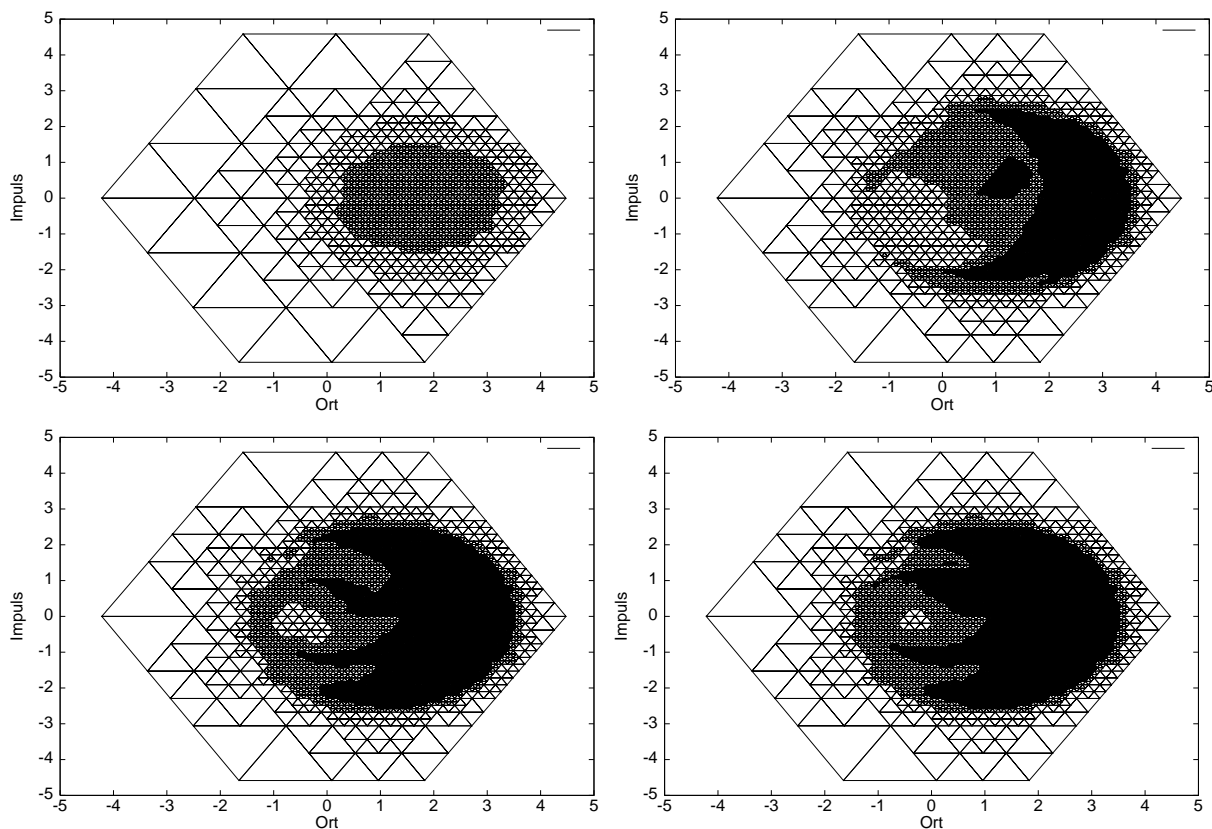


Abbildung 4.2: Zeitliche Entwicklung des Integrationsgitters für einen getriebenen, anharmonischen Oszillator zu den Zeiten  $t = 0, 2T, 4T$  und  $6T$

einem Teilbereich des Phasenraums. Wie wir sehen, verfeinert der Algorithmus nur die Umgebung des kohärenten Zustands, der restliche Teil des betrachteten Phasenraumschnitts wird, da nicht relevant, nur grob unterteilt. Es ist zu beobachten, daß die Dichte der Punkte im Bereich des kohärenten Zustands und somit die benötigte Verfeinerung noch nicht sehr hoch ist. Dies ändert sich auf den folgenden Bildern ( $t = 2T, 4T, 6T$ ). Der kohärente Zustand wird mittels des Herman-Kluk-Propagators zeitlich propagiert. Das



in diesem Fall untersuchte, in Kapitel 5.6 näher besprochene Potential ist zeitabhängig mit Periode  $T$ . Deutlich ist zu sehen, daß die Dichte der Punkte im Startbereich stark zunimmt. Dies ist darauf zurückzuführen, daß sich anfangs benachbarte Bahnen im Phasenraum im Laufe der Zeit immer weiter voneinander entfernen. Damit unterscheiden sich aber auch die Integralbeiträge dieser Punkte immer mehr. Ist die Abweichung von der linearen Näherung (4.14) zu groß, so ist eine Verfeinerung notwendig. Weiterhin ist zu beobachten, daß nun auch andere Gebiete des Phasenraums für das Integral relevant werden. Aus dem anfänglich mit höherer Auflösung verfeinerten, annähernd ellipsenförmigen Gebiet bilden sich im Laufe der Zeit Strukturen aus. Diese Strukturen hängen eng mit der Unterteilung des Phasenraums des zugehörigen klassischen Problems in reguläre und chaotische Bereiche zusammen. In der Tat entspricht die Verteilung der Integralpunkte im Phasenraum für längere Zeiten gerade einem Poincaré-Schnitt. Dies ist im letzten Bild

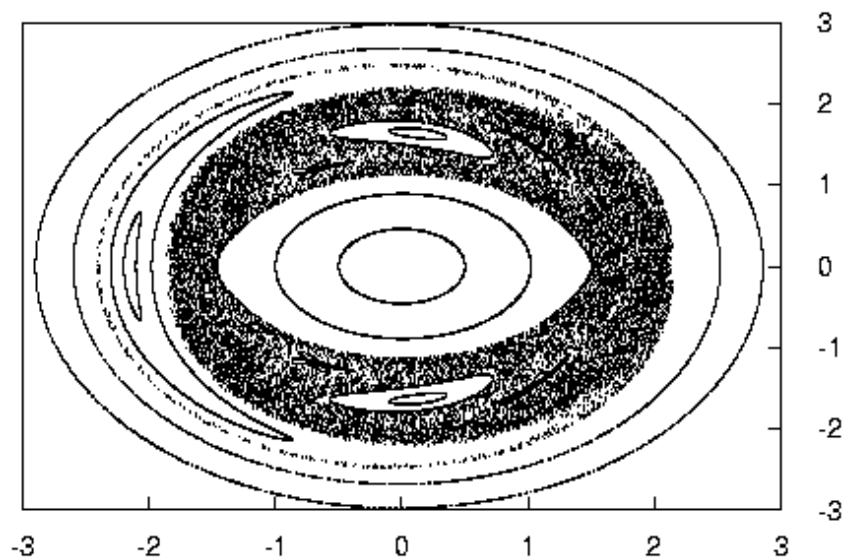


Abbildung 4.3: Poincaré-Schnitt des betrachteten Systems

aus Abbildung 4.2 durch Vergleich mit Abbildung 4.3 in Ansätzen zu erkennen. Deutlich tritt das reguläre Gebiet im Zentrum des Phasenraums hervor, und die Stabilitätsinseln ober- und unterhalb des Ursprungs des Phasenraumes deuten sich langsam an.

Mit diesem Zusammenhang zwischen der Unterteilung des klassischen Phasenraums in chaotische und reguläre Gebiete und der Verfeinerung des Integrationsgitters erhalten wir in natürlicher Weise ein einfaches Kriterium, das uns a priori qualitativ das Wachstum der Anzahl der Punkte, die zur Auswertung des Phasenraumintegrals herangezogen werden, vorhersagt. In regulären Gebieten ist dieses Wachstum im wesentlichen linear, in chaotischen Gebieten exponentiell.

## 4.3 Bestimmung der Energieeigenwerte

Zur Bestimmung von Energieeigenwerten aus der Zeitevolution eines Zustands werden hier kurz drei gängige Methoden vorgestellt. Die Bestimmung der Eigenwerte eines Hamiltonoperators ist ein zentraler Punkt der Quantenmechanik. Die erste Methode (Fouriertransformation) geht von der Autokorrelationsfunktion eines Zustandes oder von Kreuzkorrelationsfunktionen mehrerer Zustände aus, die zweite beruht auf der Diagonalisierung der Matrixdarstellung des Propagationsoperators, und die dritte verbindet die beiden erstgenannten. Wie hierbei die Korrelationsfunktionen oder die Matrixdarstellungen gewonnen werden, ist für die Bestimmungsmethoden irrelevant, Semiklassik und Quantenmechanik müssen nicht getrennt betrachtet werden. Beginnen wollen wir diesen Abschnitt mit der Fouriertransformation.

### 4.3.1 Fouriertransformation

Für zeitunabhängige Hamiltonoperatoren  $\hat{H}$  mit diskretem Energiespektrum  $\{E_n\}$  kann die Zeitentwicklung eines Anfangszustandes  $|\psi(0)\rangle$  geschrieben werden als

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \phi_n | \psi(0) \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) |\phi_n\rangle, \quad (4.22)$$

wobei  $|\phi_n\rangle$  Eigenzustand von  $\hat{H}$  zum Eigenwert  $E_n$  ist. Für die Autokorrelation  $C(t)$  erhalten wir unmittelbar

$$C(t) = \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) |\langle \phi_n | \psi(0) \rangle|^2. \quad (4.23)$$

Durch Fouriertransformation wird hieraus

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} C(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} E t\right) dt &= \sum_{n=0}^{\infty} |\langle \phi_n | \psi(0) \rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (E - E_n) t\right) dt \\ &= 2\pi\hbar \sum_{n=0}^{\infty} |\langle \phi_n | \psi(0) \rangle|^2 \delta(E - E_n). \end{aligned} \quad (4.24)$$

Die Fouriertransformierte der Autokorrelationsfunktion besitzt also Peaks an den Stellen der Eigenenergien  $E_n$  des Hamiltonoperators  $\hat{H}$ , und die Höhe der Peaks wird bestimmt durch die Anfangsbesetzung der Eigenzustände durch den Zustand  $|\psi(0)\rangle$ .

Ein Nachteil dieses Verfahrens ist, daß eine Langzeitpropagation des betrachteten Zustands notwendig ist. Bei einer realen Messung besteht weiterhin das Problem, daß die Autokorrelation immer nur in einem endlichen Zeitintervall zur Verfügung steht, was zu einer Faltung des realen Spektrums mit der Funktion  $\sin(ET_{max}/2\hbar)/(ET_{max}/2\hbar)$  führt. Dadurch werden die Peaks verbreitert, es entstehen Nebenmaxima, die Peaks vortäuschen, und das Auflösungsvermögen wird verschlechtert.

Numerisch benutzt man zur Durchführung einer Fouriertransformation die sogenannte Fast-Fourier-Transformation FFT [Pre95]. Diese Methode verbindet die Vorteile von Schnelligkeit und leichter Implementierbarkeit. Ein Nachteil dieser Methode ist, daß die Autokorrelationsfunktion über einen großen Bereich bekannt sein muß, um ein gut aufgelöstes Spektrum zu erhalten. Dies hängt mit der Tatsache zusammen, daß das Auflösungsvermögen  $\Delta E$  der FFT proportional zum Inversen der maximalen Propagationszeit  $T_{max}$  ist. Weiterhin ist die maximal bestimmbare Energie  $E_{max}$  durch das Reziproke des vorgegebenen Zeitschritts  $\Delta t$ , an dem die Autokorrelationsfunktion bestimmt wurde, beschränkt ( $E_{max} \sim 1/\Delta t$ ).

### 4.3.2 Matrixdiagonalisierung

Nun soll ein Verfahren vorgestellt werden, das auf die Matrixdarstellung des Zeitevolutionsoperators  $\hat{U}(t)$  bezüglich einer gegebenen, orthonormierten Basis zurückgreift. Durch Berechnung der Eigenwerte  $\lambda$  dieser unitären Matrix erhalten wir die Energieeigenwerte  $E_n$  des Hamiltonoperators  $\hat{H}$  aus der Beziehung

$$\lambda = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) \quad t > 0 \quad (4.25)$$

zu

$$E_n = \frac{i\hbar \ln \lambda}{t} + \frac{2\pi n\hbar}{t}, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (4.26)$$

wobei der zweite Term aufgrund der Vieldeutigkeit des komplexen Logarithmus eingeführt werden muß. Dies ist auch der grundlegende Nachteil dieses Verfahrens, da im Einzelfall nicht entschieden werden kann, ob ein berechneter Eigenwert verschoben ist oder nicht. Dieses Problem tritt im Fall zeitabhängiger, periodischer Systeme nicht auf, da dann sowieso nur eine Leiter aus Quasienergien vorliegt. Ein weiteres Problem ist die Anzahl der Basiszustände, die zum Aufbau der Matrix benutzt werden muß; ist diese zu groß, so stößt das Verfahren schnell an die Grenzen der Rechnerkapazität. Ein Vorteil des Verfahrens ist, daß Energieeigenwerte durch Kurzzeitpropagation erhalten werden können.

In unserem Fall wurden als Basis für die Propagationsmatrix die Eigenfunktionen  $\{|n\rangle\}$  des Harmonischen Oszillators, dessen Grundzustand mit dem kohärenten Zustand  $|p=0, q=0\rangle$  übereinstimmt, gewählt. Diese Wahl hat den Vorteil, daß das Überlappmatrixelement zwischen einem kohärenten Zustand  $|p, q\rangle$  und dem  $n$ -ten Eigenzustand  $|n\rangle$  analytisch angegeben werden kann. Es gilt:

$$\langle n|p, q\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{p+iq}{\sqrt{2\hbar}}\right)^n \exp\left(-\frac{1}{4\hbar}(p^2+q^2)\right). \quad (4.27)$$

Zur Vereinfachung der Notation wurde  $m = \omega = 1$  gesetzt.

### 4.3.3 Filterdiagonalisierung

Zum Abschluß soll ein Verfahren vorgestellt werden, das die Vorteile der beiden obigen Methoden in sich vereint. Das Grundrezept der Filterdiagonalisierung wurde 1990 von Daniel Neuhauser [Neu90] zum ersten Mal vorgestellt und inzwischen von weiteren Gruppen verfeinert [Wal95, Kro97, Nar97, Bec98]. Im Gegensatz zu den obigen Verfahren ist die Filterdiagonalisierung selbst noch Teil der Forschung, worauf die Aktualität der angeführten Zitate hinweist.

Angenommen, wir wollen das Spektrum eines Hamiltonoperators nicht vollständig, sondern nur in einem endlichen Energieintervall  $[E_{min}, E_{max}]$  und damit verbunden in einem endlichen Frequenzbereich  $[\omega_{min}, \omega_{max}]$  bestimmen, und uns steht hierzu die Autokorrelationsfunktion des Zustandes  $|\psi(0)\rangle$  im Zeitintervall  $[-T + \tau, T + \tau]$  zur Verfügung. Die Größe  $\tau$  ist dabei ein gegenüber  $T$  kleiner Zeitschritt. Hierzu konstruieren wir uns zunächst einen endlichen Satz nichtorthogonaler Basisvektoren  $|\psi_\omega\rangle$  in diesem Abschnitt durch die Definition

$$|\psi_\omega\rangle = \frac{1}{T} \int_0^T dt \exp(i\omega t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) |\psi(0)\rangle, \quad \omega \in [\omega_{min}, \omega_{max}], \quad (4.28)$$

wobei die Frequenzen  $\omega$  zum Beispiel äquidistant in  $[\omega_{min}, \omega_{max}]$  gewählt werden können. In dieser Basis stellen wir nun den Zeitevolutionsoperator  $\hat{U}(\tau)$  dar:

$$\begin{aligned} U_{\omega, \omega'}(\tau) &= \langle \psi_{\omega'} | \hat{U}(\tau) | \psi_\omega \rangle \\ &= \frac{1}{T^2} \int_0^T dt \int_0^T dt' \exp(-i\omega' t') \exp(i\omega t) \\ &\quad \times \langle \psi(0) | \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} t'\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) | \psi(0) \rangle. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Durch Einführung der Größen

$$t_\pm = t \pm t' \quad \text{und} \quad \omega_\pm = \frac{\omega \pm \omega'}{2} \quad (4.30)$$

wird hieraus

$$U_{\omega, \omega'}(\tau) = \frac{1}{2T^2} \int_{-T}^T dt_- \int_{-t_-}^{2T-t_-} dt_+ C(\tau + t_-) \exp(i(\omega_- t_+ + \omega_+ t_-)). \quad (4.31)$$

Da im Argument der Autokorrelationsfunktion nur die Variable  $t_-$  auftritt, können wir die Integration über  $t_+$  durchführen und erhalten:

$$U_{\omega, \omega'}(\tau) = \frac{1}{T^2} \int_{-T}^T dt_- C(\tau + t_-) \exp(i(\omega_- T + \omega_+ t_-)) \frac{\sin(\omega_-(T - t_-))}{\omega_-}. \quad (4.32)$$

Den Fall  $\omega = \omega'$  erhalten wir durch Ausführung des Grenzwertes  $\omega_- \rightarrow 0$

$$\frac{\sin(\omega_-(T - t_-))}{\omega_-} \rightarrow T - t_-. \quad (4.33)$$

Es sei hier kurz angemerkt, daß in der oben zitierten Literatur [Neu90, Wal95, Kro97, Nar97] statt dem üblichen hermiteschen Skalarprodukt der Quantenmechanik ein euklidisches der Form  $(\psi|\phi) := \langle \psi^*|\phi \rangle$  verwendet wird. Diese Wahl wird mit der Aussage begründet, daß nur dadurch das zweidimensionale Integral in Gleichung (4.29) in ein eindimensionales umgewandelt werden könne. Die Reduktion auf eine eindimensionale Integration ist aber, wie wir hier gesehen haben, auch mit einem hermiteschen Skalarprodukt möglich. Der einzig auftretende Unterschied ist der Bereich, in dem die Autokorrelationsfunktion  $C(t)$  gegeben sein muß.

Die Eigenwerte des Hamiltonoperators  $\hat{H}$  ergeben sich nun aus dem verallgemeinerten Eigenwertproblem

$$U(\tau)|\phi_n\rangle = \lambda S|\phi_n\rangle \quad (4.34)$$

mit

$$U(\tau) = \left( U_{\omega,\omega'}(\tau) \right) \quad \text{und} \quad S = \left( \langle \psi_\omega|\psi_{\omega'} \rangle \right) = \left( U_{\omega,\omega'}(0) \right). \quad (4.35)$$

Die Matrix  $S$  berücksichtigt hierbei, daß unsere Filterbasis  $|\psi_\omega\rangle$  nicht orthogonal ist. Da die Anzahl der Basisfunktionen  $|\psi_\omega\rangle$  im allgemeinen größer sein wird als die Anzahl der Eigenfunktionen  $|\phi_n\rangle$  von  $\hat{H}$  mit Eigenenergien im betrachteten Bereich, ist die Matrix  $S$  singular. Zur Lösung des verallgemeinerten Eigenwertproblems (4.34) wird darum auf das Verfahren der „singular value decomposition“ [Wal95] zurückgegriffen. Auf eine Darstellung dieser Methode soll hier verzichtet werden. Als Resultat erhalten wir wie bei der Matrixdiagonalisierung die Energieeigenwerte in der Form

$$E_n = \frac{i\hbar \ln \lambda}{\tau} + \frac{2\pi n\hbar}{\tau}, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (4.36)$$

das heißt, die Energien sind wiederum nur bestimmt modulo einem Vielfachen von  $2\pi\hbar/\tau$ . Trotzdem bietet diese Methode einige Vorteile. Im Vergleich zur Fouriertransformation kann mit wesentlich kleineren Zeiten, über die die Autokorrelationsfunktion bekannt sein muß, gearbeitet werden. Gegenüber der Matrixdiagonalisierung besitzt sie den Vorteil, daß die Matrixgröße in (4.34) klein gehalten werden kann. Ferner können Energien gezielt in einem vorgegebenen Bereich gesucht werden. Es hat sich gezeigt, daß das durch die Filterdiagonalisierung gewonnene Spektrum in einem bestimmten Intervall genauer ist als das durch die Fouriertransformation gelieferte. Will man das vollständige Spektrum erhalten, so bietet es sich an, die Filterdiagonalisierung nacheinander für mehrere Intervalle durchzuführen.

Für die Anwendung besteht noch das Problem, daß die Filterdiagonalisierung von Parametern abhängt, für die nicht von vorne herein ein idealer Wert festgelegt werden kann. Einer dieser Parameter ist die Anzahl der Basisfunktionen, die das Frequenzintervall  $[\omega_{min}, \omega_{max}]$  unterteilen. In der Anwendung stellt man fest, daß eine Erhöhung dieser Zahl nicht unbedingt eine Verbesserung des Spektrums liefert. Effekte dieser Art sind noch Teil der Forschung und zeigen, daß die Filterdiagonalisierung ein noch nicht ausgereiftes Werkzeug ist. Die mit der Filterdiagonalisierung gewonnenen Ergebnisse weisen aber darauf hin, daß diese Methode in den kommenden Jahren an Bedeutung gewinnen wird.

## 4.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden die numerischen Methoden, insbesondere eine phasenraumsensitive Integrationsroutine, zur effizienten Implementierung des Herman-Kluk-Propagators vorgestellt. Dabei zeigte sich, daß die Integrationsroutine selbst Informationen über das System in Form der groben Unterteilung des Phasenraums in reguläre und chaotische Gebiete liefert und die Verfeinerung des Phasenraumes einem klassischen Poincaré-Schnitt ähnelt. Zur Extraktion von Energieeigenwerten wurden drei Verfahren mit ihren Vor- und Nachteilen beschrieben.

# Kapitel 5

## Anwendungen

In diesem abschließenden Kapitel betrachten wir numerische Anwendungen des Herman-Kluk-Propagators. Zunächst betrachten wir den Harmonischen Oszillator. Da unser Propagator in diesem Fall exakt sein sollte (vergleiche Kapitel 3.6), ist dies ein geeignetes Testsystem für die verwendeten Methoden. Anschließend vergleichen wir die Ergebnisse des Herman-Kluk-Propagators mit mittels JWKB-Methoden gewonnenen Resultaten. Hierfür wird jeweils ein Potential betrachtet, in dem die JWKB-Eigenwerte exakt (Morse-Potential) und nicht exakt (quartischer Oszillator) sind. Wir werden dabei feststellen, daß der Herman-Kluk-Propagator in beiden Fällen *nicht* exakt ist, aber brauchbare Näherungen liefert. Im semiklassischen Limes sollte sich die Genauigkeit des Propagators erhöhen. Deshalb betrachten wir darauf folgend den Grenzwert  $\hbar \rightarrow 0$  im Morse-Potential. Nach diesen einfachen Testsystemen wenden wir uns interessanteren Anwendungen zu. Hierzu gehört die Untersuchung von Energiesplittings in Doppelmuldenpotentialen, von Resonanzen und zeitabhängigen Systemen.

### 5.1 Der Harmonische Oszillator

Im folgenden werden wir zur Bestimmung der Eigenwerte von  $\hat{H}$  zwei Verfahren benutzen:

- Das erste Verfahren greift auf die Autokorrelationsfunktion  $C(t)$  eines kohärenten Anfangszustandes  $|p, q\rangle$  zurück. Durch Filterdiagonalisierung können aus dieser die Eigenwerte gewonnen werden.
- Im zweiten Fall stellen wir den Zeitevolutionsoperator  $\hat{U}(t)$  in einer Basis aus Eigenfunktionen eines Harmonischen Oszillators dar. Aus den Eigenwerten dieser Matrix  $U_{m,n}$  ergeben sich dann die Eigenwerte von  $\hat{H}$ . Berechnen wir zusätzlich die Eigenvektoren von  $U_{m,n}$ , so erhalten wir eine Näherung für die Eigenfunktionen von  $\hat{H}$  in der betrachteten Basis. Diese Vorgehensweise werden wir im folgenden als Matrixmethode bezeichnen.

Wie wir im Laufe dieses Kapitels noch sehen werden, unterscheiden sich bei einigen Anwendungen die Ergebnisse der beiden Methoden.

Am Ende des letzten Kapitels haben wir gesehen, daß der Herman-Kluk-Propagator im Fall des Harmonischen Oszillators exakt ist. Dies wollen wir zum Test unserer numerischen Methoden verwenden.

Betrachten wir also einen Hamiltonoperator der Form

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2\hat{q}^2. \quad (5.1)$$

Zur Vereinfachung haben wir hier  $\hbar = m = 1$  gesetzt.

Der Harmonische Oszillator läßt sich durch die beiden beschriebenen Methoden völlig problemlos behandeln. Zunächst wollen wir den Fall  $\omega = 1$  betrachten. Da wir auch  $\hbar = 1$  gesetzt haben, sind die Eigenwerte des Operators in Tabelle (5.1) gegeben durch  $E_n = n + 1/2$  mit  $n \in \mathbb{N}_0$ . Abbildung 5.1 zeigt die exakte, quantenmechanische Auto-

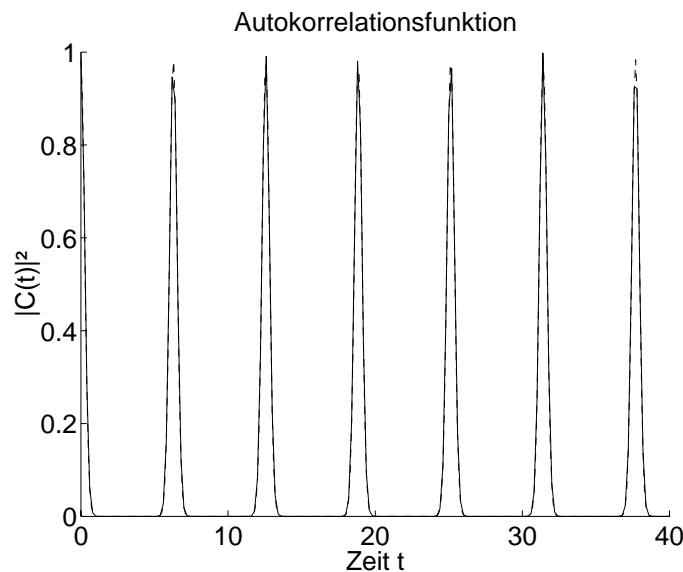


Abbildung 5.1: Betragsquadrat der Autokorrelationsfunktion des Anfangszustandes  $|p = 0, q = 4\rangle$ : Quantenmechanik (—) und Semiklassik (---)

korrelationsfunktion  $C(t)$  des kohärenten Anfangszustandes  $|p = 0, q = 4\rangle$  (—) und ihre semiklassische, mittels des Herman-Kluk-Propagators gewonnenen Näherung (---) im betrachteten Potential. Wie wir sehen, stimmen beide sehr gut überein. Deutlich ist die grundlegende Oszillationsperiode  $T = 2\pi$  zu erkennen, das heißt, nach dieser Zeit kehrt der kohärente Zustand wieder in seine Ausgangslage zurück. Die Übereinstimmung zwischen Quantenmechanik und Semiklassik wird auch anhand der Eigenwerte klar, die wir aus der semiklassischen Autokorrelationsfunktion durch Filterdiagonalisierung gewinnen. Sie sind in Tabelle (5.1) aufgeführt. Die kleinen Abweichungen zwischen Quantenmechanik und Semiklassik ergeben sich aus numerischen Fehlern. Zu diesen numerischen Fehlern tragen unter anderem das endliche Integrationsgebiet, die Diskretisierung des Problems auf ein Gitter und – bei nicht quadratischen Potentialen – die endliche Genauigkeit des Propagationsalgorithmus bei.



Zustand $n$	$E_{qm}(n)$	$E_{sk}(n)$
0	0.5	0.49999
1	1.5	1.50000
2	2.5	2.50002
3	3.5	3.50004
...	...	...
9	9.5	9.49999
10	10.5	10.50000
11	11.5	11.50003

Tabelle 5.1: Quantenmechanische und semiklassische Energieeigenwerte des Harmonischen Oszillators im Fall  $\omega = 1$

Um die exakten, quantenmechanischen und die semiklassisch gewonnenen Eigenzustände des Hamiltonoperators  $\hat{H}$  vergleichen zu können, führen wir hier den Begriff der Husimidichte  $\rho_H$  ein [Tak85, Tak86, Tak89]. Die Husimidichte eines Zustands  $|\psi\rangle$  ist definiert durch

$$\rho_H(p, q) = |\langle p, q | \psi \rangle|^2. \quad (5.2)$$

Ihr Wert am Phasenraumpunkt  $(p, q)$  ist also gegeben durch das Betragsquadrat der Projektion des Zustands  $|\psi\rangle$  auf den dort lokalisierten kohärenten Zustand  $|p, q\rangle$ . Damit erhalten wir eine Größe, die die Verteilung des Zustands  $|\psi\rangle$  im Phasenraum beschreibt.

Abbildung 5.2 zeigt die Husimidichten der Zustände  $n = 0, 1, 2$ , wobei auf der linken Seite jeweils die exakte Husimidichte und auf der rechten Seite die aus der Matrixmethode semiklassisch gewonnene dargestellt ist. Wie wir sehen, sind sie auf den ersten Blick nicht zu unterscheiden. Die Übereinstimmung zwischen Quantenmechanik und Semiklassik wird noch deutlicher, wenn wir Konturdarstellungen der verschiedenen Husimidichten betrachten. Diese sind in Abbildung 5.3 zu sehen. Für die beiden niedrigsten Zustände sind die Höhenlinien der beiden Husimidichten identisch. Erst bei dem Zustand  $n = 2$  sind geringe Abweichungen zu erkennen. Auch diese lassen sich auf numerische Fehler zurückführen.

Nachdem wir den Fall  $\omega = 1$  diskutiert haben, wollen wir noch kurz auf einen Wert  $\omega \neq 1$  eingehen. Dies ist notwendig, da die von uns verwendeten kohärenten Zustände Eigenzustände zum Vernichtungsoperator  $\hat{a}(\omega = 1)$  sind. Obige Ergebnisse könnten somit aufgrund dieser Übereinstimmung zufällig korrekt sein.

Betrachten wir also als Beispiel den Fall  $\omega = 1/2$ . Für diese Wahl lauten die Eigenenergien des Hamiltonoperators  $E_n = n/2 + 1/4$  mit  $n \in \mathbb{N}_0$ . Analog zum ersten Beispiel vergleichen wir diese Werte wieder mit den aus der Semiklassik gewonnenen. Wie wir in Tabelle (5.2) sehen, stimmen beide wieder sehr gut überein. Wir kommen also zu dem Schluß, daß unsere numerische Implementierung des Herman-Kluk-Propagators bei dem aktuell betrachteten Potential wie erwartet exakt ist.

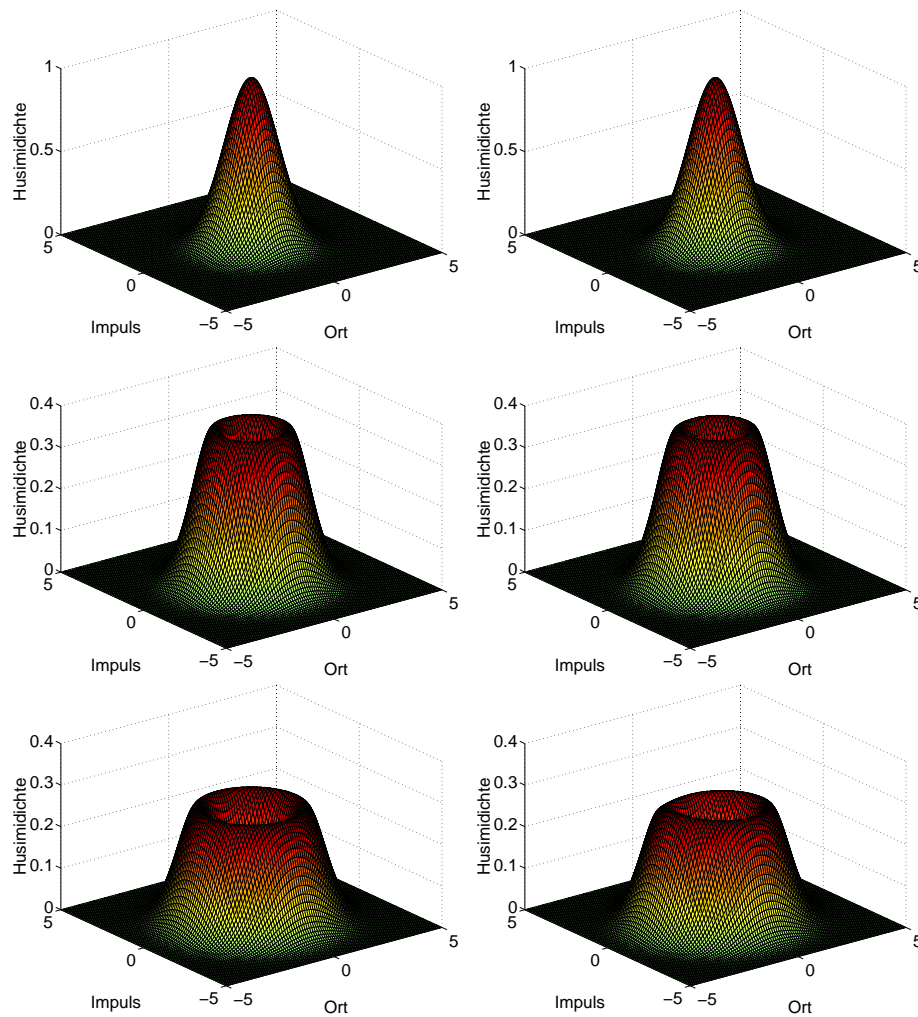


Abbildung 5.2: Husimidichten der Zustände  $n = 0, 1, 2$  quantenmechanisch und semiklassisch

$n$	$E_{qm}(n)$	$E_{sk}(n)$
0	0.25	0.24999
1	0.75	0.74999
2	1.25	1.25002
3	1.75	1.75000
4	2.25	2.25003
...	...	...
11	5.75	5.74998
12	6.25	6.25023

Tabelle 5.2: Quantenmechanische und semiklassische Energieeigenwerte des Harmonischen Oszillators im Fall  $\omega = 1/2$

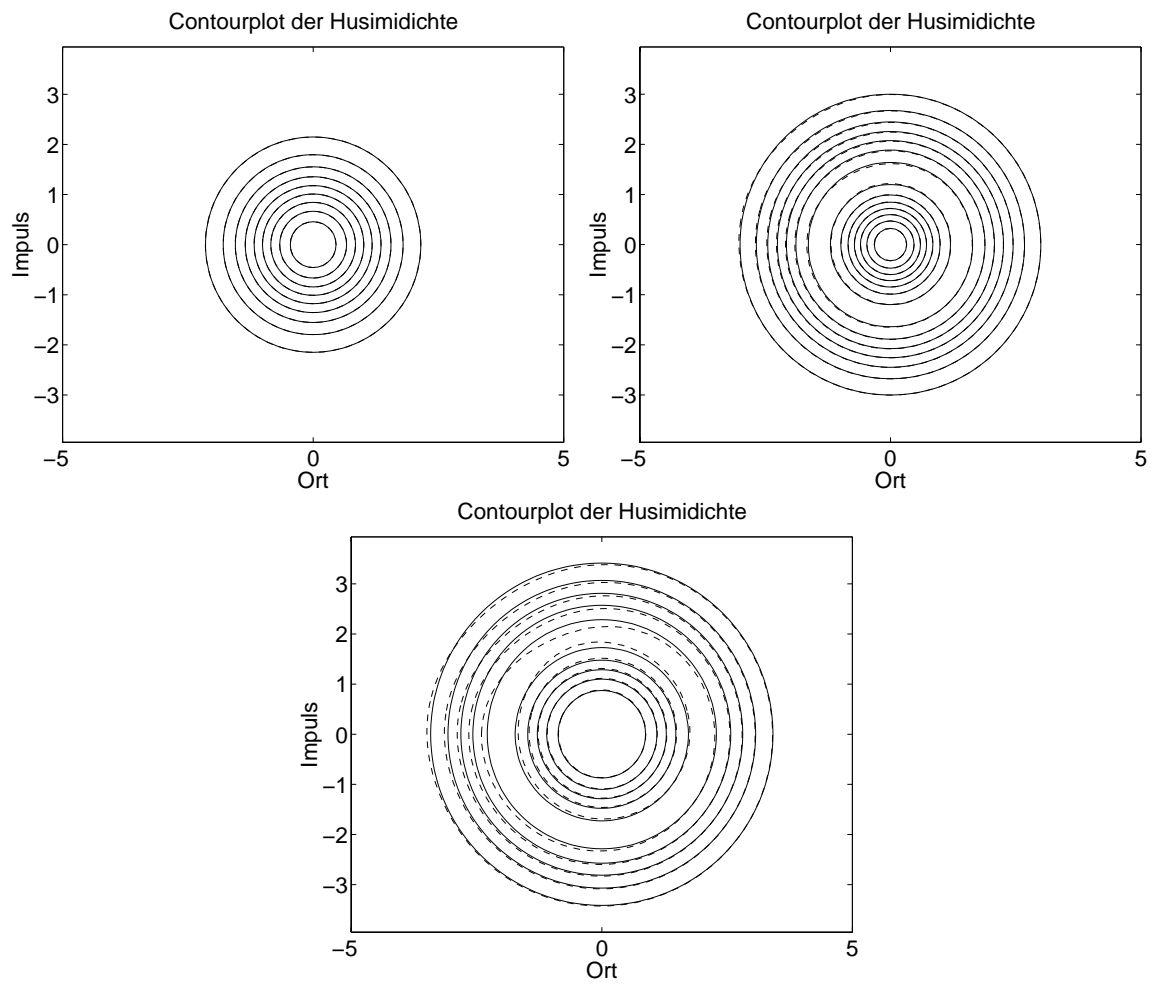


Abbildung 5.3: Konturdarstellungen der Zustände  $n = 0, 1, 2$ : Quantenmechanik (—) und Semiklassik (---)

## 5.2 Vergleich mit JWKB-Methoden

In diesem Abschnitt wollen wir die Ergebnisse des Herman-Kluk-Propagators mit denen der im ersten Kapitel kurz vorgestellten JWKB-Methoden vergleichen. Hierfür betrachten wir das Morse-Potential und den quartischen Oszillator.

### Morse-Potential

Zunächst wollen wir uns dem Morse-Potential zuwenden. Es ist gegeben durch

$$V(q) = D (1 - e^{-\lambda q})^2 . \quad (5.3)$$

Für dieses Potential können wir die Eigenwerte  $E_n$  analytisch bestimmen. Setzen wir  $\hbar = m = 1$  und wählen wir Längeneinheiten mit  $\lambda = 1/\sqrt{2D}$ , so erhalten wir für sie [Lan86]

$$E_n = n + \frac{1}{2} - \frac{1}{4D} \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 . \quad (5.4)$$

Das Morse-Potential gehört zu der kleinen Klasse der supersymmetrischen und leiterquantisierbaren Quantensysteme, für die die JWKB-Näherung die exakten quantenmechanischen Energieeigenwerte (5.4) liefert [Com85, Cre90]. Der semiklassische Propagator hingegen ist *nicht* exakt. Dies werden wir im Fall des Herman-Kluk-Propagators gleich sehen. Abbildung 5.4 zeigt die Autokorrelationsfunktion  $C(t)$  des kohärenten An-

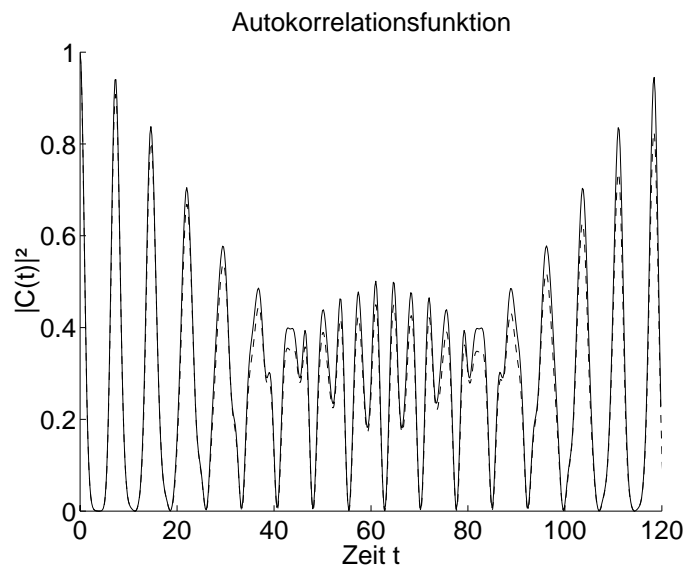


Abbildung 5.4: Betragsquadrat der Autokorrelationsfunktion des Anfangszustands  $|p = 0, q = 3\rangle$ : Quantenmechanik (—) und Semiklassik (---)

fangszustands  $|p = 0, q = 3\rangle$  im Morse-Potential mit  $D = 10$ . Die exakte Kurve ist

dabei durchgezogen (—) und die semiklassische Näherung gestrichelt (---). Der Zustand  $|p = 0, q = 3\rangle$  wurde gewählt, da die seinem Maximum zugeordnete klassische Energie  $H(p = 0, q = 3) \approx 2.4$  in der Nähe einer Eigenenergie des betrachteten Potentials liegt. Es ist zu erwarten, daß der betreffende Eigenwert aufgrund der starken Besetzung des zugehörigen Eigenzustands mit etwas höherer Genauigkeit ermittelt werden kann.

Aber kehren wir zunächst zu Abbildung 5.4 zurück. Auf den ersten Blick ist zu erkennen, daß sich beide Kurven kaum unterscheiden. Erst für größere Propagationszeiten sind Abweichungen zu erkennen. Hieraus können wir schließen, daß sich die quantenmechanischen und die durch den Herman-Kluk-Propagator erhaltenen Eigenwerte nicht zu stark unterscheiden sollten. Dies ist tatsächlich gegeben. Es ist noch anzumerken, daß der propagierte Zustand nach einer Zeit  $T_{rev} \approx 119$  wieder in seine Ausgangslage zurückkehrt. Dieses „Revival“ kann auf die Besetzung der Eigenzustände des Morsepotentials durch den Anfangszustand zurückgeführt werden [Bur99]. In Tabelle (5.3) sind die quanten-

$n$	$E_{qm}(n)$	$E_{sk,HK}(n)$
0	0.49375	0.4927
1	1.44375	1.4455
2	2.34375	2.3434
3	3.19375	3.1941
4	3.99375	3.9945
5	4.74375	4.7433
6	5.44375	5.4378

Tabelle 5.3: Quantenmechanische und semiklassische Energieeigenwerte des Morse-Potentials im Vergleich

mechanischen und die numerisch ermittelten semiklassischen Eigenwerte aufgeführt. Es zeigt sich, daß die verwendete Methode zumindest zwei Nachkommastellen korrekt liefert. Die dritte Nachkommastelle hingegen stimmt nur in Ausnahmefällen mit der Quantenmechanik überein. Die Genauigkeit hängt unter anderem davon ab, wie die Eigenzustände des Morse-Potentials durch den propagierten Anfangszustand besetzt sind. Auch die im vierten Kapitel angesprochene Wahl geeigneter Parameter für die Filterdiagonalisierung trägt zu dieser Unsicherheit bei.

Analog zum Fall des Harmonischen Oszillators wollen wir uns nun noch kurz die ermittelten Eigenzustände betrachten. Abbildung 5.5 zeigt die Husimidichten der Zustände  $n = 0, 2, 4, 5$ . Wie wir sehen, stimmen sie im wesentlichen überein. Die Abweichungen erkennen wir wieder einfacher in einer Konturdarstellung (Abbildung 5.6). Im Grundzustand sind Semiklassik und Quantenmechanik nicht zu unterscheiden. Ab dem ersten angeregten Zustand sind kleine Abweichungen zu erkennen, die für höher angeregte Zustände  $n = 4, 5$  kaum zunehmen. Dies führt uns zu dem Schluß, daß unsere Methode im Fall des Morse-Potentials zwar nicht exakt ist, doch zumindest eine brauchbare Näherung liefert.

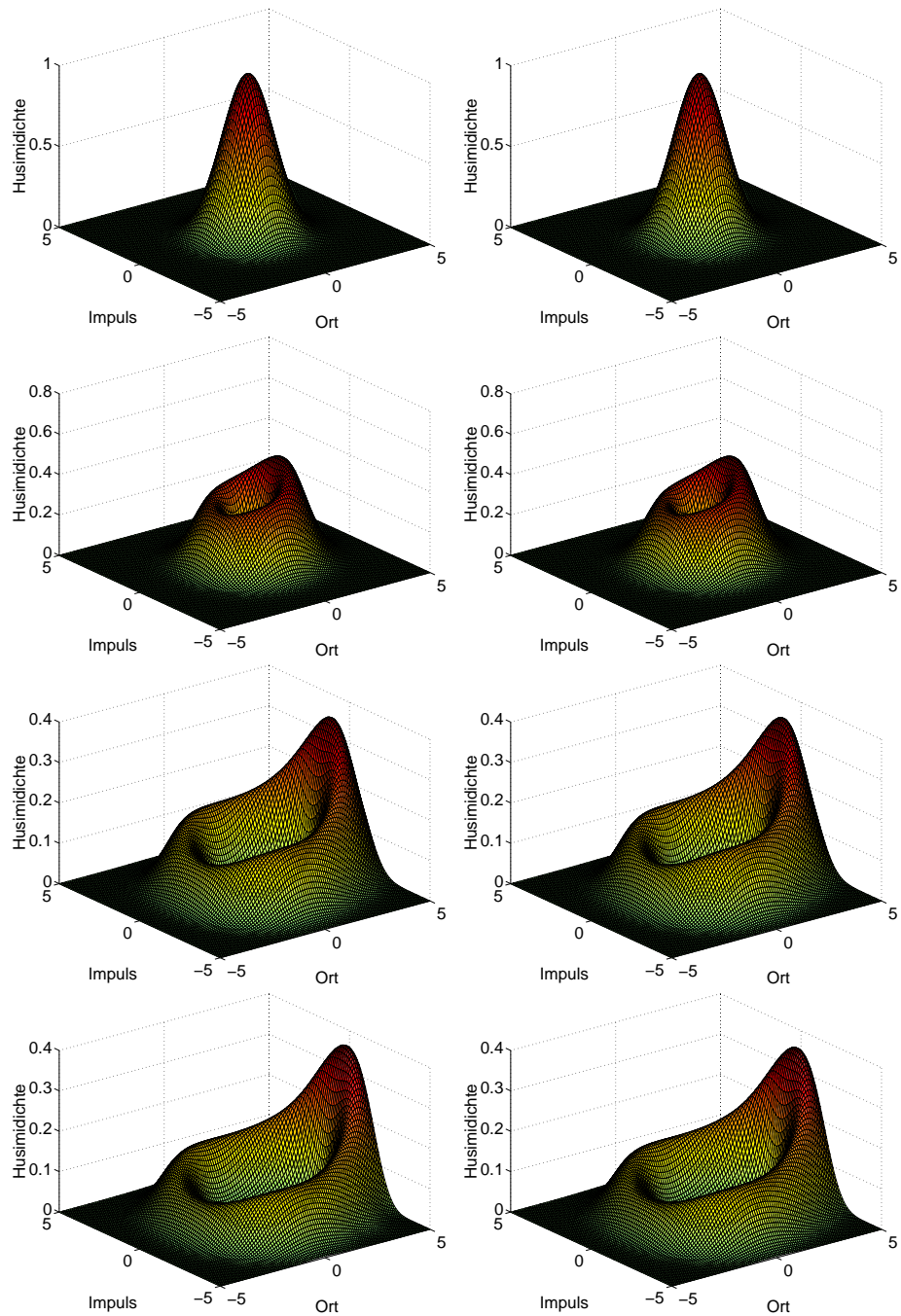


Abbildung 5.5: Husimichichten der Zustände  $n = 0, 1, 4, 5$  quantenmechanisch und semi-klassisch

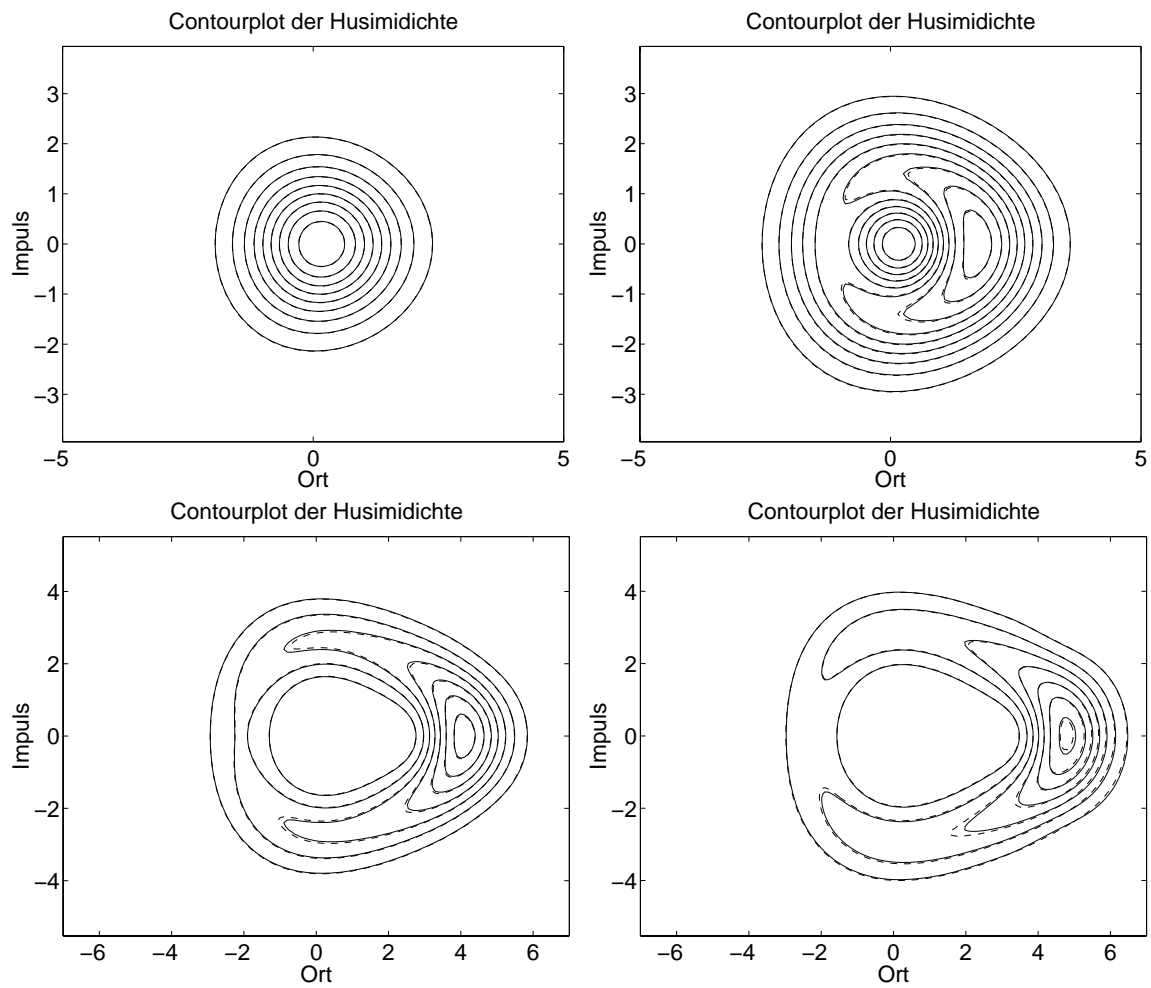


Abbildung 5.6: Konturdarstellungen der Husimichichten der Zustände  $n = 0, 1, 4, 5$ : Quantenmechanik (—) und Semiklassik (---)

### Quartischer Oszillator

Als zweites Potential zum Vergleich der beiden semiklassischen Methoden wollen wir den quartischen Oszillator betrachten. Konkret untersuchen werden wir das Potential

$$V(q) = \frac{1}{4}q^4. \quad (5.5)$$

Dieses Potential wurde gewählt, da die JWKB-Quantisierung in diesem Fall nicht exakt ist. Dies nutzen wir aus, um einen Vergleich der Größenordnung der Fehler der JWKB-Methoden und des Herman-Kluk-Propagators durchzuführen. Wie wir sehen werden, stimmt sie überein. Betrachten wir hierzu Tabelle (5.4), in der die Eigenwerte für die fünf niedrigsten Zustände aufgeführt sind. Die quantenmechanischen und die JWKB-Eigenwerte des betrachteten Systems sind der Arbeit [Kor82] entnommen, die Herman-Kluk-Eigenwerte entstammen der Matrixmethode. Der Fehler in den JWKB-Ergebnissen

$n$	$E_{qm}(n)$	$E_{sk,JWKB}(n)$	$E_{sk,HK}(n)$
0	0.10604	0.8671	0.8669
1	3.7997	3.7520	3.7530
2	7.4557	7.4140	7.4174
3	11.645	11.612	11.608
4	16.262	16.234	16.228

Tabelle 5.4: Quantenmechanische, JWKB- und Herman-Kluk-Eigenwerte des quartischen Oszillators im Vergleich

und den Herman-Kluk-Ergebnissen ist gleich groß. Auch beobachten wir, daß die Genauigkeit der beiden semiklassischen Methoden für größere Energien zunimmt. Dieser Sachverhalt läßt sich aus dem Korrespondenzprinzip erklären, das besagt, daß die Quantenmechanik im Fall hoher Energien in die klassische Mechanik übergeht. Damit wird die Beschreibung der Zeitentwicklung eines Quantenzustandes durch klassische Bahnen auf ein sichereres Fundament gestellt.

## 5.3 Semiklassischer Limes

Die klassische Mechanik geht im Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  aus der Quantenmechanik hervor. Dieses Faktum äußert sich bei der Herleitung des Herman-Kluk-Propagators darin, daß der Fehler, der durch die semiklassischen Näherungen eingeführt worden ist, mit  $\hbar \rightarrow 0$  verschwindet. Folglich müßte auch die Genauigkeit der mit dieser Methode gewonnenen Eigenwerte in diesem Limes zunehmen. Um diese Aussage zu untersuchen, betrachten wir wieder das aus dem letzten Abschnitt bekannte Morse-Potential. Die Betrachtung dieses Potentials bietet sich an, da zum einen seine Eigenwerte analytisch bekannt sind und zum anderen – wie wir gesehen haben – der Herman-Kluk-Propagator in diesem Fall nicht exakt ist.



Unter den gleichen Voraussetzungen wie im letzten Abschnitt gilt für die Eigenwerte des Morse-Potentials (5.4) für beliebiges  $\hbar$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar - \frac{1}{4D} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2. \quad (5.6)$$

Betrachten wollen wir die drei Fälle  $\hbar = 1$ ,  $\hbar = 0.5$  und  $\hbar = 0.1$ . Für jeden dieser Werte wurden aus der Autokorrelationsfunktion des gleichen Zustands die Eigenwerte des Hamiltonoperators durch Filterdiagonalisierung gewonnen. In Tabelle (5.5) sind diese zusammen mit den exakten quantenmechanischen Werten für die niedrigsten Zustände aufgeführt. Es ist zu beobachten, daß die Zahl der richtigen Nachkommastellen von links

$n$	$\hbar = 1$		$\hbar = 0.5$		$\hbar = 0.1$	
	$E_{qm}(n)$	$E_{sk}(n)$	$E_{qm}(n)$	$E_{sk}(n)$	$E_{qm}(n)$	$E_{sk}(n)$
0	0.49375	0.4927	0.2484375	0.24900	0.0499375	0.049839
1	1.44375	1.4455	0.7359375	0.73576	0.1494375	0.149455
2	2.34375	2.3434	1.2109375	1.21042	0.2484375	0.248463
3	3.19375	3.1945	1.6734375	1.67416	0.3469475	0.346960
4	3.99375	–	2.1234375	–	0.4449375	0.444954
5	4.74375	–	2.5609375	–	0.5424375	0.542447
6	5.44375	–	2.9859375	–	0.6394375	0.639437

Tabelle 5.5: Eigenwerte im Morse-Potential

nach rechts zunimmt. Sind für  $\hbar = 1$  nur zwei bis drei Nachkommastellen richtig, so sind dies im Fall  $\hbar = 0.1$  bereits vier oder mehr. Auffällig ist besonders der letzte Wert der Tabelle, der auf sechs Nachkommastellen genau ist.

Für die Zunahme der Genauigkeit sprechen zwei Gründe: Zum einen sollte die Genauigkeit des Herman-Kluk-Propagators zunehmen, zum anderen ähnelt das Morse-Potential und damit die Eigenwerte (5.6) mit  $\hbar \rightarrow 0$  immer mehr dem Harmonischen Oszillator. Da unser Propagator in diesem Fall exakt ist, verwundert eine zunehmende Genauigkeit nicht. Weiterhin müssen wir berücksichtigen, daß je nach Lage der Energieniveaus die Besetzung der einzelnen Eigenzustände durch unseren Anfangszustand differiert. Auch dies nimmt auf die Genauigkeit der bestimmten Eigenwerte Einfluß. Insgesamt kommen wir zu dem Schluß, daß unsere Ergebnisse zwar auf eine zunehmende Genauigkeit des semi-klassischen Propagators im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  hindeuten, wir dies aber nicht mit vollständiger Gewißheit feststellen können.

## 5.4 Untersuchung von Energiesplittings

In diesem Abschnitt wollen wir uns mit Energiesplittings in Doppelmuldenpotentialen beschäftigen. Es sei angemerkt, daß alle hier besprochenen Ergebnisse nur mittels der

Diagonalisierung der Propagationsmatrix (vergleiche Kapitel 4.3.2) gewonnen werden konnten. Die Filterdiagonalisierung verschiedener Autokorrelationsfunktionen hingegen brachte *keine* aufgespaltenen Zustände zu Tage. Stattdessen ergeben sich die Eigenwerte in einer der beiden Mulden, die dem Mittelwert der Energien der gesplitteten Zustände entsprechen. Dieses Resultat ist vermutlich darauf zurückzuführen, daß die propagierten Zustände nur in einer Mulde lokalisiert waren. Zum Test dieser Hypothese bietet es sich für zukünftige Untersuchungen an, weniger stark lokalisierte Zustände zu verwenden.

### Quartisches Doppelmuldenpotential

Zunächst betrachten wir das Potential

$$V(q) = \frac{1}{50} \left( q^2 - \frac{25}{4} \right)^2 . \quad (5.7)$$

Es besitzt zwei Minima an den Stellen  $q = \pm 5/2$  (vergleiche Abbildung 5.7). Die beiden niedrigsten Zustände sind gesplittet und entsprechen den Eigenwerten  $E_0 = 0.4198$  und  $E_1 = 0.4808$ . Die Größe des Energiesplittings beträgt folglich  $\Delta E = 0.0610$ . In Ta-

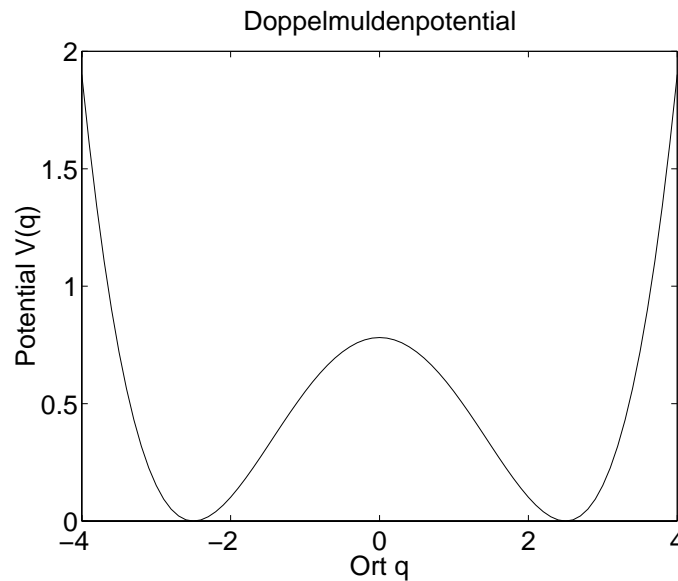


Abbildung 5.7: Verlauf des Doppelmuldenpotentials (5.7)

belle (5.6) sind für die niedrigsten Zustände die ermittelten Energiewerte zum Vergleich aufgeführt. Die exakten, quantenmechanischen Werte wurden durch Diagonalisierung der Matrixdarstellung des Hamiltonoperators bezüglich einer Basis aus Eigenfunktionen eines Harmonischen Oszillators gewonnen. Die semiklassisch ermittelten Werte unterscheiden sich deutlich von den quantenmechanischen. Sie differieren bereits ab der zweiten Nachkommastelle. Trotz dieser Diskrepanz ist das semiklassisch ermittelte Energiesplitting  $\Delta E = 0.0615$  auf drei Nachkommastellen korrekt. Es zeigt sich also, daß wir die Splittings mit deutlich höherer Genauigkeit als die absolute Lage der Energieniveaus bestimmen können.

$n$	$E_{qm}(n)$	$E_{sk}(n)$
0	0.4198	0.4066
1	0.4808	0.4681
2	1.0505	1.0376
3	1.4768	1.4653
4	2.0655	2.0547
5	2.7218	2.7119

Tabelle 5.6: Quantenmechanische und semiklassische Eigenwerte des Doppelmuldenpotentials (5.7) im Vergleich

Auch die Eigenzustände erhalten wir mit hoher Güte. Sowohl die Husimidichten in Abbildung 5.8 als auch die Konturlinien in Abbildung 5.9 sind in dieser Darstellung nicht zu unterscheiden. Wir kommen also wieder zu dem Ergebnis, daß unsere Methode zwar nicht exakt ist, doch zumindest eine brauchbare Näherung liefert.

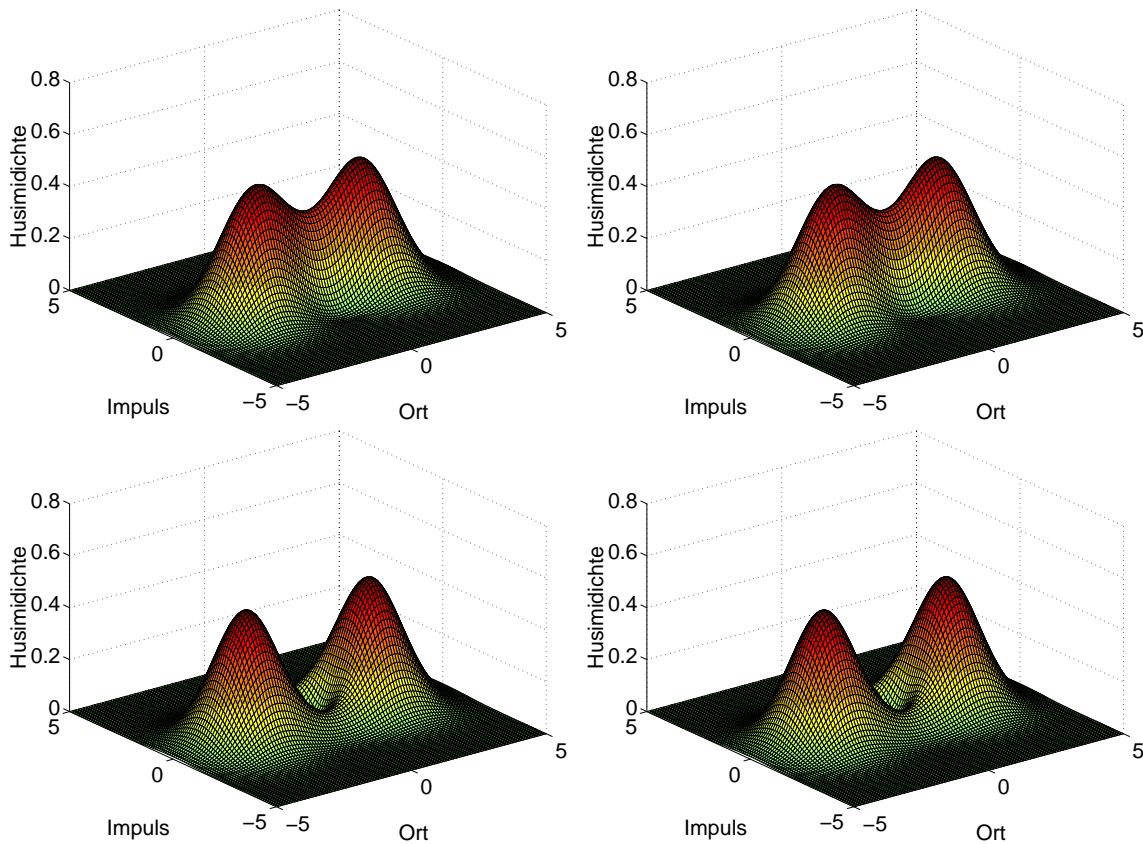


Abbildung 5.8: Husimidichten des gesplitteten Grundzustands quantenmechanisch und semiklassisch

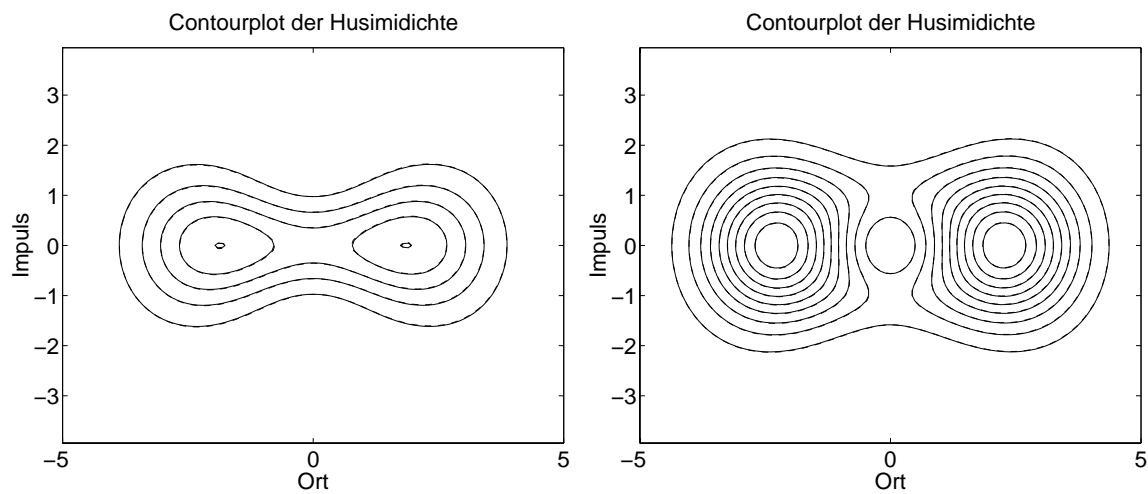


Abbildung 5.9: Konturdarstellungen der Husimichichten: Quantenmechanik (—) und Semiklassik (---)

## Harmonischer Oszillator mit Gaußscher Barriere

Mittels des Potentials

$$V(q) = \frac{1}{2}q^2 + 9e^{-q^2}, \quad (5.8)$$

das eine Überlagerung eines Harmonischen Oszillators und einer Gaußschen Barriere darstellt, wollen wir die Matrixmethode zur Gewinnung der Energiewerte etwas genauer untersuchen. Es wird sich zeigen, daß die ermittelten Eigenwerte sowohl von der Matrixgröße, als auch von der Propagationszeit abhängig sind.

Zunächst führen wir hierzu ein Maß für die Unitarität der Propagationsmatrix  $U_{m,n}$  ein. Dies ist notwendig, da der Herman-Kluk-Propagator – wie wir in Kapitel 3.5.1 gesehen haben – nur in der Näherung der stationären Phase unitär ist. Wir wissen, daß für eine unitäre Matrix das Betragsquadrat jedes ihrer Spaltenvektoren gleich eins ist. Somit definieren wir die Größe

$$\delta(t) = \sum_{m=0}^N |U_{m,0}|^2 = \sum_{m=0}^N |\langle m | \hat{U}(t) | 0 \rangle|^2 \quad (5.9)$$

als Maß für die Unitarität der Matrix  $U_{m,n}$ . Dabei bezeichnet  $N$  die Größe der Matrix  $U_{m,n}$ . Die Kenngröße  $\delta(t)$  ist also das Betragsquadrat des ersten Spaltenvektors der Matrix  $U_{m,n}$ . Die Abweichung dieser Größe von eins kann genutzt werden, um die Unitarität zu beurteilen. Es zeigt sich, daß sie bei nicht zu kleinen Matrizen nur schwach von deren Größe  $N$ , aber deutlich von der Propagationszeit  $t$  abhängt. Aus diesem Grund betrachten wir nur die Abhängigkeit von  $t$ .

Propagationszeit $t$	Unitaritätsmaß $\delta(t)$	$E(n)$			
		$n=0$	$n=1$	$n=2$	$n=3$
exakter Wert	-	3.07540	3.07851	5.13830	5.16437
0.2	1.086	3.2026	3.2055	5.2567	5.2883
0.25	1.097	3.1788	3.1815	5.2396	5.2681
0.4	1.090	3.1312	3.1341	5.1941	5.2200
0.6	1.053	3.1040	3.1074	5.1676	5.1962
1.0	1.018	3.0877	3.0900	5.1610	5.1839
1.2	1.026	3.0926	3.0946	5.1621	5.1861
1.4	1.033	3.0990	3.1002	5.1611	5.1808

Tabelle 5.7: Ermittelte Eigenwerte im Potential (5.8) und Unitaritätsmaß  $\delta(t)$  für unterschiedliche Propagationszeiten  $t$

In Tabelle (5.7) sind die aus der Matrix  $U_{m,n}$  ermittelten Eigenwerte für verschiedene Propagationszeiten  $t$  aufgeführt. In der ersten Zeile stehen dabei die exakten quantenmechanischen Werte, die der Veröffentlichung [Frö69] entnommen wurden. Wie wir anhand

der zweiten Spalte sehen, ändert sich der Wert von  $\delta(t)$  im Laufe der Zeit. Zunächst nimmt er bei den betrachteten Werten bis zum Zeitpunkt  $t = 1.0$  ab, um anschließend wieder zu steigen. Zu diesem Zeitpunkt  $t = 1.0$  ist aber auch die Abweichung der semiklassisch ermittelten Eigenwerte von den quantenmechanischen am geringsten.

Die Schwankung des Unitaritätsmaßes  $\delta(t)$  hängt mit dem durch die Einführung des Herman-Kluk-Propagators gemachten Fehler zusammen. Da dieser zeitlich nicht konstant ist (vergleiche Kapitel 3.3), ist auch eine Variation von  $\delta(t)$  nicht überraschend. Die Größe  $\delta(t)$  liefert somit zumindest einen Hinweis darauf, welche Eigenwerte den quantenmechanischen am ehesten entsprechen. Natürlich können wir uns noch weitere Kriterien überlegen. So ist zum Beispiel die Auszeichnung der ersten Spalte der Matrix  $U_{m,n}$  willkürlich. Folglich wäre auch eine Mittelung über alle Spalten möglich. Auch die Eigenwerte von  $U_{m,n}$  geben einen Hinweis auf die Unitarität. Da die Eigenwerte einer unitären Matrix alle den Betrag eins besitzen, ist auch eine Mittelung über deren Beträge sinnvoll. Eine Untersuchung der hier erwähnten Maße wurde aber nicht durchgeführt.

## 5.5 Untersuchung von Resonanzen

Nachdem wir uns bisher nur mit gebundenen Zuständen befaßt haben, wollen wir uns in diesem Abschnitt quasigebundenen Zuständen respektive Resonanzen zuwenden. Vor kurzem wurde gezeigt [Gro97], daß eine Extraktion von Resonanzen aus einer semiklassisch mit Hilfe des Herman-Kluk-Propagators gewonnenen Autokorrelationsfunktion möglich ist. Dies wollen wir nun für ein einfaches Beispielsystem verifizieren.

Dazu betrachten wir das Potential [Rit82]

$$V(q) = \left( \frac{1}{2}q^2 - J \right) e^{-\lambda q^2} + J, \quad (5.10)$$

wobei wir  $\lambda = 0.1$  und  $J = 0.8$  wählen. Für diese Wahl der Parameter  $\lambda$  und  $J$  besteht das System im wesentlichen aus einem stabilen Zustand und Resonanzen. In dieser Form ist das Potential (5.10) das Standardsystem zur Untersuchung von Resonanzzuständen. In Abbildung 5.10 ist das betrachtete Potential zusammen mit seinen niedrigsten Eigenzuständen dargestellt.

Im folgenden betrachten wir die Autokorrelationsfunktion  $C(t)$  des kohärenten Anfangszustands  $|p = 0, q = 1\rangle$ . Dieser Zustand wurde gewählt, da die seinem Maximum zugeordnete klassische Energie ( $H(p = 0, q = 1) \approx 0.5$ ) in der Nähe des Grundzustands des betrachteten Systems liegt. Durch Filterdiagonalisierung dieser Funktion erhalten wir wieder unser semiklassisches Spektrum. Dies ist in Tabelle (5.8) zusammen mit den exakten quantenmechanischen Ergebnissen, die aus [Rit82] entnommen wurden, aufgeführt. Wie wir sehen, stimmen Quantenmechanik und Semiklassik im Rahmen der üblichen Fehlergrößen überein. Besonders der Resonanzzustand  $n = 3$  konnte mit guter Genauigkeit gewonnen werden. Dies ist umso bemerkenswerter, wenn wir bedenken, daß die zugehörigen klassischen Bahnen dieser Energie völlig ungebunden sind. Die gleiche Überlegung trifft auch auf den fünften Resonanzzustand zu. Daß die Energie des vierten

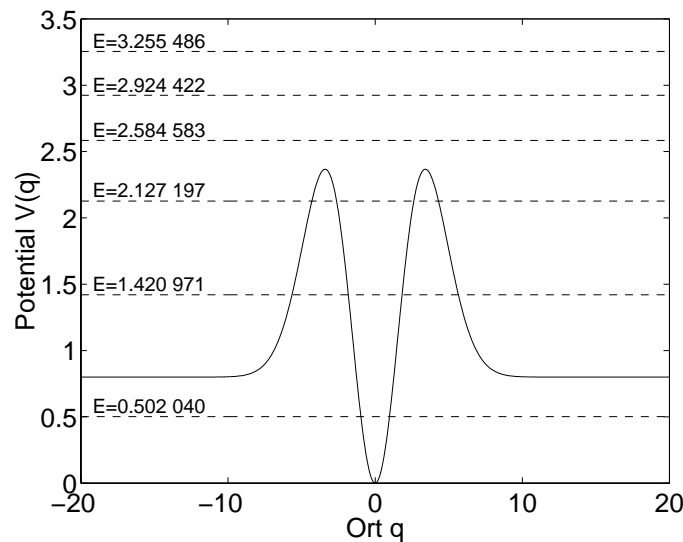


Abbildung 5.10: Verlauf und Eigenenergien des Potentials (5.10)

$n$	$E_{qm}(n)$	$E_{sk}(n)$
0	0.502 040	0.519
1	1.420 971	1.445
2	2.127 197	2.174
3	2.584 583	2.584
4	2.924 422	(3.029)
5	3.255 486	3.217

Tabelle 5.8: Eigenwerte des Potentials (5.10): Quantenmechanik und Semiklassik

Resonanzzustand nicht gewonnen werden konnte, ist vermutlich auf die zu geringe Besetzung durch den Anfangszustand zurückzuführen. In der Tat erhalten wir diese Resonanz, wenn wir als Anfangszustand den kohärenten Zustand  $|p = 0, q = 1.2\rangle$  verwenden. Der dabei ermittelte Wert ist in Klammern in Tabelle (5.8) aufgeführt.

Auf eine Diskussion der Imaginärteile der Resonanzen wurde verzichtet. Zwar ist eine Extraktion derselben aus einer semiklassischen Autokorrelationsfunktion nach Aussage der Veröffentlichung [Gro97] möglich, dies konnte aber von uns nicht bestätigt werden. Die Klärung dieser Diskrepanz wird Gegenstand zukünftiger Untersuchungen sein.

## 5.6 Zeitabhängige Systeme

Zum Abschluß dieses Kapitels wollen wir noch kurz auf ein explizit zeitabhängiges System eingehen. Betrachten werden wir hierzu einen getriebenen anharmonischen Oszillator der

Form

$$\hat{H} = \chi \{\hat{a}^{\dagger 2} \hat{a}^2\}_0 + g_1 (\hat{a} e^{i\Omega t} + \hat{a}^\dagger e^{-i\Omega t}) + g_2 (\hat{a}^2 e^{i\Omega t} + \hat{a}^{\dagger 2} e^{-i\Omega t}) . \quad (5.11)$$

Dabei bezeichnet  $\{\dots\}_0$  die symmetrische Ordnung der betreffenden Operatoren. Das klassische Analogon zu diesem Hamiltonoperator ist – in einem geeigneten Einheitensystem – die Hamiltonfunktion

$$H_0(p, q) = \frac{\chi}{4} (p^2 + q^2)^2 + \sqrt{2}g_1 (q \cos(\Omega t) - p \sin(\Omega t)) + g_2 ((q^2 - p^2) \cos(\Omega t) - 2pq \sin(\Omega t)) . \quad (5.12)$$

Wir haben dieses System für  $\chi = 0.1$ ,  $g_1 = 0.005$ ,  $g_2 = 0.01$ ,  $\Omega = 0.5$  und  $\hbar = 0.02$  untersucht. Damit stimmen die Parameter mit denen in der Veröffentlichung [Sch98] überein. Die Hamiltonfunktion ist dahingehend typisch, daß sich der Phasenraum für dieses klassische System in Gebiete mit chaotischer und regulärer Dynamik aufteilt. Wir haben es bereits im vierten Kapitel bei der Erläuterung der Integrationsroutine kennengelernt. Aufgrund der chaotischen Bereiche im Phasenraum ist eine Beschreibung der Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Zustands durch klassische Bahnen im Form des Herman-Kluk-Propagators problematisch. Daß es trotzdem möglich ist, wurde vor kurzem in unserer Arbeitsgruppe gezeigt [Sch98]. Wir wollen hier nur kurz auf die Ge-

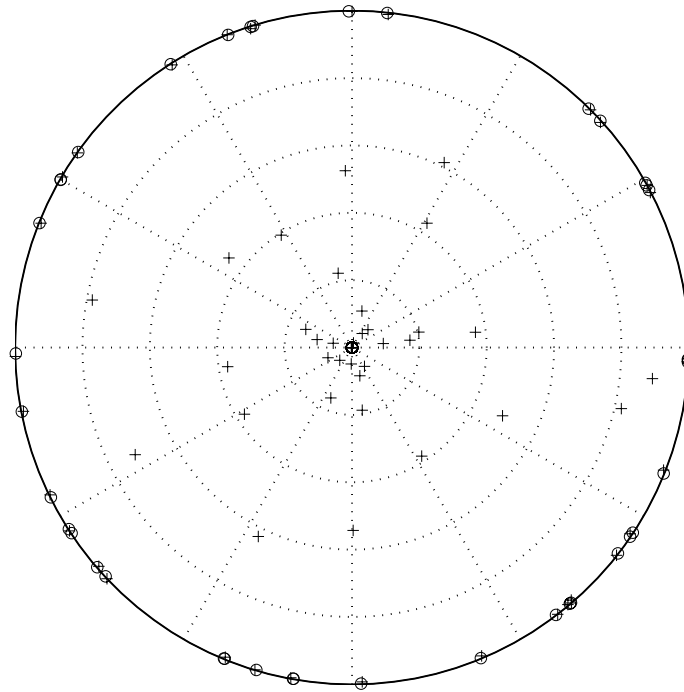


Abbildung 5.11: Semiklassische (+) und Quantenmechanische (o) Quasiwinkel  $\theta_\alpha$  des Systems (5.11) aufgetragen in der Form  $\exp(i\theta_\alpha)$



winnung der Eigenwerte des Hamiltonoperators (5.11) eingehen. Da dieser zeitperiodisch mit Periode  $T = 2\pi/\Omega$  ist, können wir nur von Quasienergien  $\epsilon_\alpha$  des betrachteten Systems sprechen. Jede Quasienergie  $\epsilon_\alpha$  ist dabei Repräsentant einer ganzen Klasse von Eigenwerten der Form  $\epsilon_\alpha + k\hbar\Omega$  mit  $k \in \mathbb{Z}$ . Um diese Unbestimmtheit zu umgehen, betrachten wir nicht  $\epsilon_\alpha$  selbst, sondern den zugeordneten Quasiwinkel  $\theta_\alpha = -\epsilon_\alpha T/\hbar$ . Tragen wir diesen in der Form  $\exp(i\theta_\alpha)$  in ein Diagramm ein, so werden alle Quasienergien  $\epsilon_\alpha + k\hbar\Omega$  einer Klasse auf einen Punkt abgebildet. Dies ist in Abbildung 5.11 dargestellt. Dabei kennzeichnet ein Kreuz die Lage eines semiklassisch gewonnenen Quasiwinkels und ein offener Kreis die eines quantenmechanischen. Die semiklassischen Werte wurden aus einer  $80 \times 80$ -Matrix extrahiert, wobei aufgrund numerischer Fehler und der Tatsache, daß der semiklassische Propagator nur näherungsweise unitär ist, einige Quasiwinkel mit Imaginärteilen versehen sind. Da für reelles  $\theta_\alpha$  der Ausdruck  $\exp(i\theta_\alpha)$  den Betrag eins besitzt, kann die Abweichung des Betrages von diesem Wert genutzt werden, um zwischen realen Quasiwinkeln und numerischen Artefakten zu unterscheiden. Diese „Artefakte“ liegen in Abbildung 5.11 im Innern des Einheitskreises. Die quantenmechanischen Werte hingegen stammen aus der Diagonalisierung einer  $200 \times 200$ -Matrix. Die zugehörige Methode ist in Kapitel B dargestellt. Wie wir sehen, können wir zu jedem semiklassischen Wert einen zugehörigen quantenmechanischen finden. Die Übereinstimmung ist – bis auf kleine Fehler – gut. Dies ist besonders bemerkenswert, wenn wir bedenken, daß der Herman-Kluk-Propagator nur auf klassische Bahnen zurückgreift und das betrachtete System chaotische Bereiche besitzt. In diesen Bereichen entfernen sich benachbarte Bahnen exponentiell voneinander, was dazu führt, daß die in den Herman-Kluk-Propagator einfließenden Größen wie zum Beispiel die Wirkung  $S$  und der Stabilitätsfaktor  $A(p', q', t)$  stark über dem Phasenraum variieren. Daß trotz dieser Tatsache eine gute Übereinstimmung zwischen Semiklassik und Quantenmechanik gefunden werden konnte, zeigt die Mächtigkeit der benutzten Methode.

## 5.7 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die Anwendung des Herman-Kluk-Propagators auf verschiedene Quantensysteme untersucht. Dabei konnten Energieeigenwerte, Realteile von Resonanzen, Wellenfunktionen und Quasienergien in guter Genauigkeit gewonnen werden. Dies deutet auf das weite Anwendungsgebiet des Herman-Kluk-Propagators hin. Trotz dieser Erfolge bleiben noch einige Fragen offen. So ist zum Beispiel die Frage nach dem Versagen der Filterdiagonalisierung einer Autokorrelationsfunktion zur Gewinnung von Eigenwerten bei Doppelmuldenpotentialen noch ungeklärt. Weiterhin ist eine nähere Untersuchung des Zusammenhangs der Genauigkeit der gewonnenen Eigenwerte mit einem gegebenen Unitaritätsmaß notwendig. Die genauere Betrachtung von Systemen mit Resonanzen (Streusystemen) und explizit zeitabhängigen Systemen wäre Stoff genug für eine weitere Diplomarbeit.



# Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden zunächst zwei Methoden zur Herleitung der semiklassischen Näherung des Zeitentwicklungsoperators im Phasenraum vorgestellt. Die Methode nach Miller und Weissman greift dabei den Begriff der Korrespondenzrelation auf, der eine „natürliche“ Brücke zwischen Quantenmechanik und klassischer Mechanik bildet. Die alternative Herleitung greift auf Pfadintegralmethoden zurück. Es treten jeweils verschiedene Problemstellungen in den Vordergrund. So ist zum Beispiel ein zentraler Punkt der Herleitung nach Miller und Weissman die Äquivalenz von Phasenfunktionen und klassischen Generatoren. Die erstmalige Herleitung mittels Pfadintegralmethoden wirft hingegen unmittelbar die Frage nach dem Zusammenhang zwischen einem gegebenen Hamiltonoperator und dem ihm zuzuordnenden klassischen System auf.

Aus der semiklassischen Näherung des Phasenraumpropagators konnte durch Umschreibung in die Ortsraumdarstellung und Integration über die Endzustände der Herman-Kluk-Propagator hergeleitet werden. Daran anschließend wurden die Eigenschaften dieser Anfangswertdarstellung diskutiert. Es konnte gezeigt werden, daß diese Näherung im semiklassischen Limes unitär ist und für zeitumkehrinvariante Quantensysteme die Zeitumkehrrelation erfüllt. Die Äquivalenz des Herman-Kluk-Propagators zum Van Vleck-Gutzwiller-Propagator wurde diskutiert. Wie erwartet konnte gezeigt werden, daß die semiklassische Näherung im Fall des Harmonischen Oszillators exakt ist und die Feynman-Soriau-Formel reproduziert.

Nach diesen theoretischen und grundlegenden Abschnitten wurde die numerische Implementierung des Herman-Kluk-Propagators dargestellt und eine phasenraumsensitive Integrationsroutine beschrieben. Zur Auswertung der Ergebnisse wurden drei Methoden zur Gewinnung von Energieeigenwerten von Quantensystemen vorgestellt: Fouriertransformation, Matrixdiagonalisierung und Filterdiagonalisierung. Die numerische Implementierung des Herman-Kluk-Propagators stellte sich als äußerst aufwendig heraus, so daß sich zur Zeit der numerische Aufwand für Semiklassik und Quantenmechanik noch deutlich unterscheidet.

Der letzte Schwerpunkt der Arbeit beschäftigte sich mit der Interpretation der aus der Implementierung des Herman-Kluk-Propagators gewonnenen Ergebnisse. Zunächst wurde als Testsystem der Fall des Harmonischen Oszillators untersucht. Wie erwartet konnten bis auf die Berücksichtigung numerischer Fehler Eigenwerte und Wellenfunktionen dieses Systems exakt reproduziert werden. Die Diskussion des Morse-Potentials und des quartischen Oszillators hingegen zeigte eine Diskrepanz zwischen den semiklassischen und den exakten quantenmechanischen Ergebnissen, die auf die semiklassischen

Näherungen zurückgeführt wurden. Trotzdem konnten Eigenwerte, Wellenfunktionen und Autokorrelationsfunktionen in guter Genauigkeit gewonnen werden. Die Anwendung des Herman-Kluk-Propagators auf Tunnel-, Resonanz- und explizit zeitabhängige Quantensysteme zeigte die universelle Anwendbarkeit dieser Methode.

Trotz dieser ermutigenden Ergebnisse bleiben einige Fragen offen. So ist unter anderem zu klären, in wieweit eine Bestimmung von Imaginärteilen von Resonanzen mittels dieser semiklassischen Anwendung möglich ist. Auch eine genauere Diskussion des zeitabhängigen Fehlers der semiklassischen Näherung ist notwendig. Dies wird Gegenstand zukünftiger Untersuchungen sein.

# Anhang A

## Mathematischer Anhang

### A.1 Reelle und komplexe Gaußintegrale

Das eindimensionale Gaußintegral

$$I(a) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \text{für } a > 0 \quad (\text{A.1})$$

läßt sich durch den folgenden Trick einfach berechnen:

$$I^2(a) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x^2+y^2)} dx dy = \int_{r=0}^{\infty} \int_{\phi=0}^{2\pi} r e^{-ar^2} d\phi dr = \frac{\pi}{a}. \quad (\text{A.2})$$

Durch quadratische Ergänzung erhalten wir auch das allgemeinere Gaußintegral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2 + bx) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right). \quad (\text{A.3})$$

Dieses Resultat läßt sich leicht auf mehrere Dimensionen verallgemeinern. Ist  $A$  eine symmetrische, positiv definite und somit auch invertierbare  $n \times n$ -Matrix, so gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^n} \exp(-x^t A x + b^t x) d^n x = \frac{\pi^{n/2}}{\sqrt{\det A}} \exp\left(\frac{b^t A^{-1} b}{4}\right). \quad (\text{A.4})$$

Diese Beziehung bleibt auch dann gültig, wenn  $A$  eine komplexe Matrix und  $b$  ein komplexer Vektor ist.

### A.2 Stationäre Phase und „steepest descent“

#### A.2.1 Stationäre Phase

Bei der Methode der stationären Phase betrachtet man Integrale der Art

$$F(\hbar) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) \exp\left(\frac{i}{\hbar} f(x)\right) dx. \quad (\text{A.5})$$

Gesucht ist der dominante Beitrag zu diesem Integral im Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$ . Für kleine Werte von  $\hbar$  variiert der Exponent bei einer kleinen Änderung von  $f(x)$  sehr stark. Beiträge solcher Gebiete werden sich folglich bei der Integration wegheben, und es tragen nur die Stellen  $x_i$  bei, in deren Umgebung  $f(x)$  sich im wesentlichen nicht ändert, das heißt, Stellen mit

$$f'(x_i) = 0. \quad (\text{A.6})$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit liege nur eine solche Stelle  $x_0$  vor. Die Taylorentwicklung von  $f(x)$  um  $x_0$  kann dann geschrieben werden als

$$f(x) = f(x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2 + o((x - x_0)^2). \quad (\text{A.7})$$

Brechen wir diese Entwicklung nach dem quadratischen Glied ab, so erhalten wir durch Integration für  $F(\hbar)$

$$F(\hbar) = \left( \frac{2\pi\hbar}{|f''(x_0)|} \right)^{1/2} g(x_0) \exp\left( \frac{i}{\hbar}f(x_0) + \frac{i\pi\mu}{4} \right) = O(\sqrt{\hbar}) \quad (\text{A.8})$$

mit  $\mu = \text{sign}f''(x_0)$ . Daß dieser Term tatsächlich im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  das Integral dominiert, kann leicht eingesehen werden. Ist nämlich  $f'(x) \neq 0$ , so ist  $f(x)$  lokal auf einem Intervall  $[\alpha, \beta]$  um  $x$  umkehrbar, das heißt,  $f^{-1}(x)$  existiert. Dann können wir in Gleichung (A.5) die Substitution  $y = f(x)$  durchführen und erhalten das Integral

$$\begin{aligned} F(\hbar)|_{[\alpha, \beta]} &= \int_{f(\alpha)}^{f(\beta)} g(f^{-1}(y)) \exp\left( \frac{i}{\hbar}y \right) \frac{dy}{f'(f^{-1}(y))} \\ &= \int_{f(\alpha)}^{f(\beta)} G(y) \exp\left( \frac{i}{\hbar}y \right) dy. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Durch einmalige partielle Integration ergibt sich hieraus

$$\begin{aligned} F(\hbar)|_{[\alpha, \beta]} &= \frac{\hbar}{i} G(y) \exp\left( \frac{i}{\hbar}y \right) \Big|_{f(\alpha)}^{f(\beta)} - \frac{i}{\hbar} \int_{f(\alpha)}^{f(\beta)} G'(y) \exp\left( \frac{i}{\hbar}y \right) dy \\ &= O(\hbar). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Dies verschwindet im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  natürlich schneller als (A.8). Es ist noch anzumerken, daß bei obiger Diskussion vorausgesetzt werden muß, daß die Funktion  $G(y)$  hinreichend „brav“ ist und  $G'(y)$  existiert. Für weitere Details sei auf das Buch von Schulman [Sch81] verwiesen.

Gleichung (A.8) läßt sich auf höhere Dimensionen verallgemeinern. Das zugehörige Integral

$$F(\hbar) = \int \dots \int g(x) \exp\left( \frac{i}{\hbar}f(x) \right) d^n x \quad (\text{A.11})$$

ist in dieser Näherung

$$F(\hbar) = \frac{(2\pi\hbar)^{n/2}}{\sqrt{|\det \text{Hess} f(x_0)|}} g(x_0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} f(x_0) + \frac{i\pi}{2} \text{sig Hess} f(x_0)\right). \quad (\text{A.12})$$

Dabei ist  $\text{Hess} f(x_0)$  die Hesse-Matrix von  $f(x)$  am Punkte  $x_0$  und  $\text{sig Hess} f(x_0)$  die Signatur derselben.

Wir wollen unser Integral über die reelle Achse und die reellen Funktionen  $f(x)$  und  $g(x)$  nun auf komplexe Wegintegrale und Funktionen verallgemeinern [Ble75, Rem84]. Dieser Schritt ist in der Literatur bekannt unter der Bezeichnung

### A.2.2 Die Methode des „steepest descent“

In diesem Abschnitt befassen wir uns mit Integralen der Form

$$F(\hbar) = \int_{\gamma} g(z) \exp\left(\frac{1}{\hbar} f(z)\right) dz, \quad (\text{A.13})$$

wobei  $f(z)$  und  $g(z)$  komplexe Funktionen sind und  $\gamma$  einen komplexen Weg beschreibt. Die Methode des „steepest descent“, auch Sattelpunktmethode genannt, verlangt nun zur Auswertung von Gleichung (A.13) die folgenden Schritte:

- Zunächst müssen wir die kritischen Punkte des Integranden bestimmen. Dies sind bei uns Stellen, für die  $df(z)/dz = 0$  gilt.
- Anschließend werden die Richtungen des steilsten Abstiegs („steepest descent“) von diesen Stellen gesucht.
- Mittels des Cauchyschen Integralsatzes wird nun (falls möglich) der Integrationsweg  $\gamma$  in die Richtungen des steilsten Abstiegs deformiert.
- Entlang dieses deformierten Weges wird das Integral dann ausgewertet.

Dabei nennen wir eine Richtung  $r$  dann eine Richtung des steilsten Abstiegs, wenn sich der Realteil  $u(z)$  des Exponenten  $f(z) = u(z) + iv(z)$  maximal verringert. Sie ist an einer Stelle  $z$ , an der der Gradient von  $u(z)$  nicht verschwindet, gegeben durch

$$r = -\nabla u. \quad (\text{A.14})$$

Nach Durchführung dieser Schritte [Ble75] erhalten wir für das Integral (A.13)

$$F(\hbar) \approx \left(\frac{\pi\hbar}{2|f''(z_0)|}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{1}{\hbar} f(z_0) + i\left((2p+1)\frac{\pi}{2} - \frac{\alpha}{2}\right)\right) \quad p = 0, 1. \quad (\text{A.15})$$

Wir haben dabei vorausgesetzt, daß die zweite Ableitung von  $f(z)$  an der Stelle  $z_0$  nicht verschwindet:

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} \Big|_{z=z_0} = ae^{i\alpha}. \quad (\text{A.16})$$

Welche der oben vorgestellten Verfahren (Gaußintegration, stationäre Phase, Sattelpunktmethode) zur Auswertung eines gegebenen Integrals heranzuziehen ist, muß von Fall zu Fall geprüft werden.



# Anhang B

## Berechnung der Quasienergien eines explizit zeitabhängigen Hamiltonoperators

In diesem Abschnitt ist das in Kapitel 5.6 erwähnte Matlab-Programm zur Bestimmung der Quasienergien eines explizit zeitabhängigen Hamiltonoperators aufgeführt. Zur Bestimmung des Propagationsoperators  $\hat{U}(t)$  aus Gleichung (1.28)

$$\hat{U}(t) = \hat{T} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(\tau) d\tau \right) \quad (\text{B.1})$$

zum Zeitpunkt  $t$  nähern wir diese Beziehung in der Form

$$\hat{U}(t) \approx \prod_{j=0}^{N-1} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_j) \Delta t_j \right) = \prod_{j=0}^{N-1} \hat{U}_{t_j, t_j + \Delta t_j}. \quad (\text{B.2})$$

Dabei bilden die  $t_j, j = 0, \dots, N-1$ , eine Unterteilung des Zeitintervalls  $[0, t]$ . Die Zeitordnung  $\hat{T}$  berücksichtigen wir, indem wir die Propagationsoperatoren  $\hat{U}_{t_j, t_j + \Delta t_j}$  über die einzelnen Zeitintervalle  $\Delta t_j$  von rechts nach links nach zunehmender Zeit  $t_j$  anordnen. Stellen wir nun Gleichung (B.2) noch bezüglich einer Basis dar, so reduziert sich die Auswertung dieser Beziehung auf Matrizenmultiplikationen. Das zugehörige Matlab-Programm ist im Anschluß aufgeführt.

```
% Parameterliste:  
% Programm: leo.m  
hbar=0.02;  
chi=0.1;  
g1=0.005;  
g2=0.01;  
Omega=0.5;  
T=2*pi/Omega;
```

```

M=input('Größe der Propagationsmatrix: ');
N=input('Anzahl der Zeitschritte: ');
n=1:M-1; m=sqrt(n);
aminus = sqrt(hbar)*diag(m,1); % Matrixdarstellung des
                                % Vernichtungsoperators
aplus  = sqrt(hbar)*diag(m,-1); % Matrixdarstellung des
                                % Erzeugungsoperators

am2=aminus^2;
ap2=aplus^2;
H=zeros(M);
U=eye(M);      % U(0)=Identität
delta_t=T/N;   % Zeitschritt delta_t
for j=0:N-1
    t=(j+0.5)*T/N;
    fprintf('Zeit: %d \n', t);
    % Hamiltonoperator zum Zeitpunkt t berechnen:
    H=chi*(ap2*am2+2*hbar*aplus*aminus+hbar^2/2*eye(M))+...
        g1 *(aminus*exp(i*Omega*t)+aplus*exp(-i*Omega*t))+...
        g2 *(am2*exp(i*Omega*t)+ap2*exp(-i*Omega*t));
    % Propagation über Zeitschritt delta_t
    U=expm(-i*H*delta_t/hbar)*U;
end
% Nun steht die Propagationsmatrix U(T) zur Verfügung.

```

Die Quasienergien bzw. -winkel erhalten wir nun einfach durch Diagonalisierung der dem Operator  $\hat{U}(t = T)$  zugeordneten Propagationsmatrix, wobei  $T$  die Periode des Hamiltonoperators ist.

# Literaturverzeichnis

- [Bec98] M. H. Beck and H.-D. Meyer, *Extracting accurate bound-state spectra from approximate wave packet propagation using the filter-diagonalization method*, *J. Chem. Phys.* **109** (1998) 3730.
- [Ble75] N. Bleistein and R. A. Handelsman, *Asymptotic expansions of integrals*, Holt, Rinehart and Winston, New York, 1975.
- [Bur99] B. Burghardt and J. Stolze, *Numerical evaluation of coherent-state integrals in quantum dynamics*, *J. Phys. A* **32** (1999) 2075.
- [Cah69] K. E. Cahill and R. J. Glauber, *Ordered Expansions in Boson Amplitude Operators*, *Phys. Rev.* **177** (1969) 1857.
- [Chi91] M. S. Child, *Semiclassical mechanics with molecular applications*, Oxford University Press, Oxford, 1991.
- [Coh97] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Quantenmechanik*, W. de Gruyter, Berlin, New York, 1997.
- [Com85] A. Comtet, A. D. Bandrauk and D. K. Campbell, *Exactness of Semiclassical Bound State Energies for Supersymmetric Quantum Mechanics*, *Physics Letters* **150B** (1985) 159.
- [Cre90] M. Crescimanno, *Exactness of the supersymmetric JWKB quantization formula*, *J. Math. Phys.* **31** (1990) 2946.
- [Dir58] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, Oxford, 1958.
- [Dit92] W. Dittrich and M. Reuter, *Classical and Quantum Dynamics*, Springer, Berlin, Heidelberg, 1992.
- [Dor80] J. R. Dormand and P. J. Prince, *A family of embedded Runge-Kutta formulae*, *JCAM* **6(1)** (1980) 19.
- [Dor86] J. R. Dormand and P. J. Prince, *A reconsideration of some embedded Runge-Kutta formulae*, *JCAM* **15** (1986) 203.

- [Feh70] E. Fehlberg, *Klassische Runge-Kutta-Formeln vierter und niedrigerer Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle und ihre Anwendung auf Wärmeleitungsprobleme*, *Computing* **6** (1970) 61.
- [Frö69] N. Fröman, *The energy levels of double – well potentials II*, *Arkiv för Fysik* **40(36)** (1969) 497.
- [Gol80] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, 1980.
- [Gra88] G. Grawert, *Quantenmechanik*, Aula-Verlag, Wiesbaden, 1988.
- [Gro97] F. Grossmann, V. A. Mandelshtam, H. S. Taylor, and J. S. Briggs, *Harmonic inversion of semiclassical short time signals*, *Chem. Phys. Lett.* **279** (1997) 355.
- [Gro98a] F. Grossmann, *Semiclassical coherent–state path integrals for scattering*, *Phys. Rev. A* **57** (1998) 3256.
- [Gro98b] F. Grossmann and Jr. A. L. Xavier, *From the coherent state path integral to a semiclassical initial value representation of the quantum mechanical propagator*, *Phys. Lett. A* **243** (1998) 243.
- [Gro99] F. Grossmann, *A Hierarchy of Semiclassical Approximations based on Gaussian Wavepackets*, *Comm. At. Mol. Phys.* **34** (1999) 141.
- [Gue98] B. E. Guerin and M. F. Herman, *A numerical test of different integral conditioning approximations for a semiclassical initial value representation for wavepacket propagation*, *Chem. Phys. Lett.* **286** (1998) 361.
- [Gut67] M. C. Gutzwiller, *Phase-Integral Approximation in Momentum Space and the Bound States of an Atom*, *J. Math. Phys.* **8** (1967) 1979.
- [Hel77] E. J. Heller, *Generalized theory of semiclassical amplitudes*, *J. Chem. Phys.* **66(12)** (1977) 5777.
- [Her84] M. F. Herman and E. Kluk, *A semiclassical justification for the use of non-spreading wavepackets in dynamic calculations*, *Chem. Phys.* **91** (1984) 27.
- [Her86] M. F. Herman, *Time reversal and unitarity in the frozen Gaussian approximation for semiclassical scattering*, *J. Chem. Phys.* **85** (1986) 2069.
- [Kay94a] K. G. Kay, *Integral expressions for the semiclassical time–dependent propagator*, *J. Chem. Phys.* **100** (1994) 4377.
- [Kay94b] K. G. Kay, *Numerical study of semiclassical initial value methods for dynamics*, *J. Chem. Phys.* **100** (1994) 4432.
- [Kay97] K. G. Kay, *Semiclassical tunneling in the initial value representation*, *J. Chem. Phys.* **107** (1997) 2313.

- [Kla78] J. R. Klauder, *Continuous Representations and Path Integrals, Revisited*, in G. J. Papadopoulos and J. T. Devreese, editors, *Path Integrals*, NATO Advanced Study Institute, Series B: Physics, page 5, New York, 1978. Plenum.
- [Kla79] J. R. Klauder, *Path integrals and stationary-phase approximations*, *Phys. Rev. D* **19** (1979) 2349.
- [Kla87] J. R. Klauder, *Some Recent Results on Wave Equations, Path Integrals and Semiclassical Approximations*, in G. Papanicolaou, editor, *Random Media*, Random Media. Springer, 1987.
- [Klu86] E. Kluk, M. F. Herman, and H. L. Davis, *Comparison of the propagation of semiclassical frozen Gaussian wave functions with quantum propagation for a highly excited anharmonic oscillator*, *J. Chem. Phys.* **84** (1986) 326.
- [Kor82] H. J. Korsch, *On an Improved WKB Quantization*, *Chem. Phys. Lett.* **85** (1982) 558.
- [Kra26] H. A. Kramers, *Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung*, *Z. Phys. A* **39** (1926) 828.
- [Kro97] G. J. Kroes, M. R. Wall, J. W. Pang and D. Neuhauser, *Avoiding long propagation times in wave packet calculations on scattering with resonances: A new algorithm involving filter diagonalization*, *J. Chem. Phys.* **106** (1997) 1800.
- [Lan86] L. D. Landau and E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik: Quantenmechanik*, Harri Deutsch, Frankfurt, 1986.
- [Lou73] W. H. Louisell, *Quantum Statistical Properties of Radiation*, John Wiley, New York, 1973.
- [Mas72] V. P. Maslov, *Theorie des perturbations et methodes asymptotiques*, Dunod, Gautier Villars, Paris, 1972.
- [Mas81] V. P. Maslov and M. V. Fedorink, *Semi-classical approximations in quantum mechanics*, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, 1981.
- [Mes91] A. Messiah, *Quantenmechanik Bd. 1*, W. de Gruyter, Berlin New York, 1991.
- [Mil74] W. H. Miller, *Classical-Limit Quantum Mechanics and the Theory of Molecular Collisions*, *Adv. Chem. Phys.* **25** (1974) 69.
- [Nar97] E. Narevicius, D. Neuhauser, H. J. Korsch, and N. Moiseyev, *Resonances from complex-scaled cross-correlation probability amplitudes by the filter diagonalization method*, *Chem. Phys. Lett.* **276** (1997) 250.
- [Neu90] D. Neuhauser, *Bound state eigenfunctions from wavepackets: Time  $\rightarrow$  energy resolution*, *J. Chem. Phys.* **93**(4) (1990) 2611.

- [Nol96] W. Nolting, *Quantenmechanik, Teil 1: Grundlagen*, Zimmermann-Neufang, 1996.
- [Nol97] W. Nolting, *Analytische Mechanik*, Zimmermann-Neufang, 1997.
- [Pre95] W. H. Press and B. P. Flannery and S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, London, 2. edition, 1995.
- [Pri81] P. J. Prince and R. Dormand, *High order embedded Runge-Kutta formulae*, *JCAM* **7(1)** (1981) 67.
- [Rem84] R. Remmert, *Funktionentheorie 1*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1984.
- [Rit82] M. Rittby, N. Elander and E. Brändas, *Reply to 'Comment on 'Weyl's theory and the complex-rotation method applied to phenomena associated with a continuous spectrum'*, *Phys. Rev. A* **26(3)** (1982) 1804.
- [Sch26] E. Schrödinger, *Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makrophysik*, *Naturwissenschaften* **14** (1926) 664.
- [Sch81] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, John Wiley & Sons, New York, 1981.
- [Sch88] F. Schwabl, *Quantenmechanik*, Springer, Heidelberg, 1988.
- [Sch95] J. L. Schoendorff Ximenez-Carrillo, *Gruppentheoretische und Semiklassische Methoden im Phasenraum : Anwendungen in der Quantenoptik*, Dissertation, Universität Ulm, 1995.
- [Sch96] F. Scheck, *Mechanik*, Heidelberg, Springer, 1996.
- [Sch98] J. L. Schoendorff, H. J. Korsch, and N. Moiseyev, *Semiclassical quantization of a system with mixed regular/chaotic dynamics*, *Europhys. Lett.* **44** (1998) 290.
- [Sep96] M. A. Sepúlveda and F. Grossmann, *Time-dependent semiclassical mechanics*, *Adv. Chem. Phys.* **XCVI** (1996) 191.
- [Tak85] K. Takahashi and N. Saitô, *Chaos and Husimi Distribution Function in Quantum Mechanics*, *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985) 645.
- [Tak86] K. Takahashi, *Wigner and Husimi Functions in Quantum Mechanics*, *Journ. Phys. Soc. Japan* **55** (1986) 762.
- [Tak89] K. Takahashi, *Distribution Functions in Classical and Quantum Mechanics*, *Progr. Theor. Phys. Suppl.* **98** (1989) 109.
- [Vor89] A. Voros, *Wentzel-Kramers-Brillouin method in the Bargmann representation*, *Phys. Rev. A* **40** (1989) 6814.

- [Wal95] M. R. Wall and D. Neuhauser, *Extraction, through filter-diagonalization, of general quantum eigenvalues or classical normal mode frequencies from a small number of residues or a short-time segment of a signal. I. Theory and application to a quantum-dynamics model*, *J. Chem. Phys.* **102**(20) (1995) 8011.
- [Wei82] Y. Weissman, *Semiclassical approximation in the coherent states representation*, *J. Chem. Phys.* **76** (1982) 4067.
- [Wen26] G. Wentzel, *Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik*, *Z. Phys. A* **38** (1926) 518.
- [Xav96a] A. L. Xavier, Jr. and M. A. M. de Aguiar, *Complex Trajectories in the Quartic Oscillator and Its Semiclassical Coherent-State Propagator*, *Ann. Phys. (N.Y.)* **252** (1996) 458.
- [Xav96b] A. L. Xavier, Jr. and M. A. M. de Aguiar, *Semiclassical approximations to the coherent-state propagator for a particle in a box*, *Phys. Rev. A* **54** (1996) 1808.
- [Xav97] A. L. Xavier, Jr. and M. A. M. de Aguiar, *Phase-Space Approach to the Tunnel Effect: A New Semiclassical Traversal Time*, *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 3323.





# Danksagung

Zum Abschluß möchte ich mich bei folgenden Personen für die mir zuteil werdende Unterstützung bedanken:

Herrn Prof. Dr. H. J. Korsch, Herrn Prof. Dr. M. A. M. de Aguiar, Herrn Markus Glück, Herrn Bernd Schellhaaß, Herrn Dr. Andreas Ernesti und Herrn Wolfgang Leyes.

Jeder hat auf seine Art und Weise zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Ein besonderer Dank gebührt meinen Eltern, ohne deren Unterstützung mein Studium nicht möglich gewesen wäre.