

Feynmans Pathintegral i 1 Dimension med fokus på sinusbaner

Tue Boesen (20061036)
tjb06@phys.au.dk

12. marts 2010

Abstract

This bachelor project consists of a general theoretical part in which Feynmans path integral is introduced. The basis of this theoretical part is Feynmans postulates. From these postulates is derived Feynman's path integral and the resulting terminology. It is shown that the theory of Feynman's path integral is mathematical equivalent with the Schrödinger formulations of quantum mechanics. In conclusion of this general theoretical part is a derivation of the normalisation factor for sinusoidal paths and zigzag paths.

The last part of the project develops a method to finding the energy levels for a system with a general potential from the propagator. The potential is restricted to space-dependence only and the paths to the types previously mentioned. From this restricting is found an expression which is suitable for numerical calculations. The expression is tested numerically on a harmonic potential to determine the precision of the method, which is found to be with an error of less than 10 %, even for the first approximation.

Indhold

1	Forord	1
2	Indledning	2
3	Feynmans pathintegral	3
3.1	Feynmans postulater	3
3.2	Kvantemekanisk sandsynlighedsteori	3
3.3	Feynmans Pathintegral	4
3.4	Relationen til Schrödinger billedet	7
3.5	Delkonklusion	9
4	Normaliseringsfaktor for forskellige banetyper	10
4.1	Zigzagbaner	10
4.2	Sinusbaner.	13
4.3	Delkonklusion	15
5	Fra propagator til energispektrum	16
5.1	Energispektrum for stedafhængigt potential	17
5.1.1	Propagatoren	17
5.1.2	Den skalerede fouriertransformerede propagator	18
5.2	Delkonklusion	21
6	Simulering med harmonisk oscillator	22
6.1	Delkonklusion	25
7	Detaljerede udregninger til simulering	26
7.1	$n = 1$, x_0 droppes	26
7.1.1	Sinusbaner	26
7.1.2	Zigzagbaner	26
7.2	n lige, $n > 1$, x_0 droppes	27
7.2.1	Sinusbaner	27
7.2.2	Zigzagbaner	28
8	Konklusion og perspektivering	30
9	Appendix	31
9.1	Længere udregninger fra opgaven	31
9.1.1	(4.22-4.23) - Virkning for fri partikel ved sinusbaner	31
9.1.2	(5.16-5.17) - Integralrepræsentation af Hankelfunktion	32
9.2	Matlab kode	34
9.2.1	$n = 1$, x_0 droppet	34
9.2.2	Zigzagbaner, $n = 2$, x_0 droppet	34
9.2.3	Sinusbaner, $n = 2$, x_0 droppet	35
9.2.4	Sinusbaner, $n = 4$, x_0 droppet	36

1 Forord

Man siger normalt at kvantemekanikken kan beskrives ud fra 3 fundamentalt forskellige formuleringer¹. Den differentielle metode kaldet Schrödinger billedet, den algebraiske kaldet Heisenberg billedet og den geometriske kaldet Feynmans pathintegral metode. Både Schrödinger og Heisenberg billedet introduceres som hovedregel i et normalt kvantemekanisk kursus mens Feynmans pathintegral metode er noget kun de færreste har fået mere end blot et overfladisk indtryk af og det typisk først i videregående kvantemekaniske kurser.

Grunden til at man ikke lærer om Feynmans pathintegral metode skyldes to ting, dels er den matematisk ækvivalent med de allerede kendte formuleringer, det vil sige der fundamentalt set ikke er noget nyt i teorien, desuden er metoden matematisk meget besværlig, idet enhver udregning i realiteten starter med uendelig mange integraler der skal løses over hele rummet, dette gør metoden upraktisk for mange af de simple systemer man typisk regner på i kvantemekanik, som f.eks. den uendelige potentialbrønd, harmonisk potential osv. Tilgængeld bidrager Feynmans pathintegral til kvantemekanikken på en række andre punkter. Rent forståelsesmæssigt hjælper Feynmans pathintegral på den intuitive forståelse der hidtil har manglet i udledningen af kvantemekanikken. Derudover er det typisk Feynmans pathintegral metode der benyttes i kvantefeltteorien, idet Feynmans pathintegral, i modsætningen til Schrödinger og Heisenberg billedet, betragter tid og rum ens, i ånd med relativitetsteorien.

¹Formuleringer som vekselvirknings billedet regnes her ikke for en fundamental formulering idet den er en blanding af den differentielle og den algebraiske formulering.

2 Indledning

Dette bachelorprojekt handler om Feynmans pathintegral i en dimension. Opgaven tager udgangspunkt i de to postulater Feynman kom med i sin originale artikel omkring pathintegraler[5]. Fra disse to postulater introduceres pathintegralformalismen. Der vil i denne sammenhæng ikke være tale om en fuldstændig matematisk udledning af denne, idet dette alene kunne konstituere et bachelorprojekt på matematik. Det essentielle ved første del af opgaven er at overblikket bliver bevaret og at det geometriske billede der ligger i Feynmans pathintegral bliver fremhævet. Jeg vil herefter vise at pathintegralet er matematisk ækvivalent med Schrödinger billedet, hvormed jeg har koblet pathintegralet til kvantemekanikken. Alt dette hører til den generelle introduktion til Feynmans pathintegral og skulle gerne sætte læseren i stand til at forstå den efterfølgende del af opgaven. I den efterfølgende del af opgaven benyttes Feynmans pathintegral metode på specifikke systemer. Der introduceres to forskellige banetyper; zigzagbaner og sinusbaner. For hver af disse to banetyper beregnes en normaliseringsfaktor. Disse normaliseringsfaktorer benyttes herefter i en længere udregning. Udregningen giver en metode hvormed energiniveauerne for et kvantemekanisk system kan beregnes ved hjælp af pathintegraler. Endelig testes metoden på en harmonisk oscillator ved hjælp af MATLAB simuleringer.

Jeg vil undervejs i opgaven benytte meget der er almindeligt kendt fra kvantemekanikken. Dette vil jeg gøre uden bevis da projektet handler om Feynmans pathintegral og ikke om kvantemekanik i almindelighed. Hvad angår niveauet i opgaven så er projektet forfattet med den hensigt at en person med 3 års fysik studier bør kunne læse og forstå opgaven.

3 Feynmans pathintegral

3.1 Feynmans postulater

Feynmans pathintegral teori bygger på to postulater. Disse to blev originalt formuleret af Feynman i 1948[5] på følgende måde:

1. *If an ideal measurement is performed, to determine whether a particle has a path lying in a region of space-time, then the probability that the result will be affirmative is the absolute square of a sum of complex contributions, one from each path in the region.*
2. *The paths contribute equally in magnitude. but[sic] the phase of their contribution is the classical action (in units of \hbar); i.e., the time integral of the Lagrangian taken along the path.*

Det første der umiddelbart bemærkes i ovenstående er at alle baner a priori har samme vægt. Dette kunne friste en til at tro at en fodbold følgende ovenstående postulater ville have lige så stor sandsynlighed for at bevæge sig i sinus baner som i parabler når man sparkede til den. Det er altså ikke umiddelbart klart at de to postulater er foreneligt med hvad vi klassisk observerer. Dette vil dog blive vist i slutningen af afsnit 3.3 når de relevante størrelser er blevet introduceret.

3.2 Kvantemekanisk sandsynlighedsteori

Inden jeg starter på Feynmans pathintegral, er det på sin plads at få genopfrisket de relevante egenskaber der gør sig gældende i kvantemekanisk sandsynlighedsteori¹. Specielt hvordan denne adskiller sig fra den klassiske sandsynlighedsteori. Den noget specielle sandsynlighedsteori der anvendes i kvantemekanik illustreres lettest gennem et multispalte eksperiment:

Partikler skydes fra en position (a), gennem en multispalte og ind i en detektor (b). $P_j(b, a)$ er sandsynligheden for at en partikel startende i a til tiden t_a flyver gennem spalte j og rammer detektoren i b til tiden t_b med alle andre spalter lukket. $P(b, a)$ er sandsynligheden for at en partikel fra a rammer detektoren i position b hvis alle spalter er åbne. Den simple intuitive forventning ville da være at

$$P(b, a) = \sum_j P_j(b, a), \quad (3.1)$$

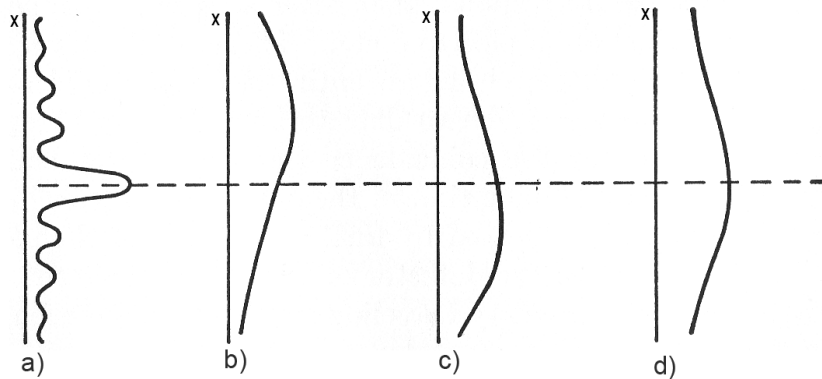
men dette er kun rigtigt så længe man detekterer hvilken spalte partiklerne flyver igennem². Hvis der ikke foregår nogen detektion (forstyrrelse) af hvilken spalte partiklerne vælger ændres resultatet derimod drastisk, se figur 1.

For at få en sandsynlighedsteoretisk matematisk beskrivelse der korrekt beskriver det observerede indføres, i overensstemmelse med Feynmans første postulat, den totale komplekse amplitude $\Phi(b, a)$, samt den partielle amplitude $\phi_j(b, a)$ hvorom der gælder:

$$P_j(b, a) = |\phi_j(b, a)|^2, \quad \Phi(b, a) = \sum_j \phi_j(b, a), \quad P(b, a) = |\Phi(b, a)|^2. \quad (3.2)$$

¹For dem der ikke er familiære med den kvantemekaniske sandsynlighedsteori, eller som blot ønsker et uddybende kendskab kan anbefales [6] og [5]

²Dette svarer til et klassisk system. I klassiske systemer gælder formel (3.1) altid.



Figur 1: Her ses sandsynligheden for at en partikel rammer detektoren i position x . b) svarer til tilfældet hvor 1. hul er åbent og resten lukket. c) svarer til tilfældet hvor 2. hul er åbne og resten lukket. d) er hvad vi på baggrund af b) og c) ville forvente rent klassisk hvis begge huller var åbne. a) er hvad vi rent faktisk ser hvis begge huller er åbne. Vi ser altså at der sker interferens hvilket giver en anden sandsynlighedsfordeling end hvad man klassisk ville forvente.

3.3 Feynmans Pathintegral

Feynmans pathintegral kan ses som en kvantemekanisk udvidelse af mindstevirkningsprincippet¹.

I dette underafsnit vil jeg udlede pathintegral formalismen på baggrund af Feynmans postulater. Udledningen kommer til at foregå i en dimension da udvidelsen til flere dimensioner er ganske lige til og ikke bidrager noget nyt rent fysisk².

Det er altid vigtigt, når det er muligt, at få en intuitiv forståelse for det man skal til at udlede, inden man starter på alle de matematiske udregninger.

En meget simpel måde at komme fra et multispalte eksperiment til pathintegral formalismen er ved at forestille sig at der i stedet for blot en skærm med et par spalter, indsættes mange skærme med mange spalter i hver. I grænsen hvor hele rummet består af skærme og hver skærm udelukkende består af spalter opstår pathintegralet.

I henhold til ovenstående har vi at sandsynligheden for at en partikel bevæger sig fra a til b er $P(b, a)$. Og ud fra formel (3.2) ved vi at der må eksistere en tilhørende amplitude $K(b, a)$ således at

$$P(b, a) = |K(b, a)|^2. \quad (3.3)$$

$K(b, a)$ er summen over alle de partielle amplituder³. Vi kan opskrive dette matematisk ved at benytte funktionalet $\Phi[x(t)]$ der angiver banebidraget for

¹Mindstevirkningsprincippet siger at partikler bevæger sig i baner med ekstrimum energi. Mindstevirkningsprincippet er klassisk beskrevet mange steder, [13] giver en lang og meget grundig beskrivelse, mens [6, s. 26-27] blot indeholder det vigtigste.

²Pathintegral formalismen i multidimensioner er beskrevet mange steder, blandt andet i [10] og [7].

³Vi skal senere vise at denne amplitude er identisk med hvad man normalt kalder kernen eller propagatoren i kvantemekanik.

hver enkelt bane fra a til b^1 , det vil sige:

$$K(b, a) = \sum_{\text{Alle baner fra } a \text{ til } b} \Phi[x(t)]. \quad (3.4)$$

Fra Feynmans 2. postulat får vi

$$\Phi[x(t)] = C e^{(i/\hbar)S[x(t)]}, \quad (3.5)$$

hvor S er den klassiske virkning. Lagrangefunktionen der definerer virkningen restringeres til kun at afhænge af rum, hastighed og tid. Dette gøres for at sikre at virkningen kan separeres i for- og fremtid [5, s. 10-17]², hvilket er nødvendigt i den videre udvikling af pathintegral formalismen.

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(\dot{x}, x, t) \quad (3.6)$$

Som følge af restriktionen på Lagrangefunktionen fås at virkningen af en arbitrær bane kan opdeles således at:

$$S[\gamma] = S[\gamma_1] + S[\gamma_2], \quad (3.7)$$

hvor γ_1 udgør en del af banen γ og γ_2 udgør den resterende del.

Ved indsættelse af formel (3.5) og (3.6) i formel (3.4) fås:

$$K(b, a) = \sum_{\text{Alle baner fra } a \text{ til } b} C e^{(i/\hbar) \int_{t_a}^{t_b} dt L(\dot{x}, x, t)}. \quad (3.8)$$

Det store problem er nu at give mening til denne sum. Mængden af baner gør at dette umiddelbart virker som en uoverskuelig opgave³. Metoden til at bestemme amplituden er at indele tiden i ækvivalente tidsskridt af længden ϵ , således at:

$$t_0 = t_a, \quad t_{N+1} = t_b, \quad \epsilon = t_{i+1} - t_i, \quad (N+1)\epsilon = t_b - t_a. \quad (3.9)$$

Til hvert tidsskridt t_i knyttes en position x_i og en bane konstrueres nu ved at forbinde alle x_i 'erne. Typen af baner hvormed man vælger at forbinde de forskellige x_i 'er kaldes banetypen og har tit stor betydning for hvor besværlig et system bliver at regne på⁴. Summen over alle baner konstrueres så ved at integrere alle, bortset fra x_0 og x_{N+1} der er begyndelses- og slutpunkterne som er fikseret, x_i 'erne over samtlige værdier, hvilket giver:

$$K_N(b, a) \sim \int \int \dots \int dx_1 dx_2 \dots dx_N \Phi[x(t)]. \quad (3.10)$$

Summen over alle baner er nu grænsen hvor $N \rightarrow \infty$ det vil sige $\epsilon \rightarrow 0$. For at denne grænse har mening skal der defineres en normaliseringsfaktor. Denne

¹Banebidraget svarer altså til $P_j(b, a)$ der blev introduceret i forrige underafsnit.

²Det kan endvidere vises at hvis Lagrangefunktionen havde afhængt af højere tidsafledte end hastigheden, kunne vi have fået diskontinuerte hastigheder eller uendelig acceleration [6, s. 34].

³Kardinaliteten af banerne er \aleph_2 , hvilket betyder at banerne har en høj orden af uendelighed [3].

⁴Typisk forbindes punkterne med rette linjer, en sådan bane kaldes en zigzagbane. En anden måde at forbinde punkterne er med sinusbaner. Begge disse to måder skal vi se nærmere på i afsnit 4.

må naturligvis afhænge af ϵ . Desværre er det endnu ikke lykkedes nogen at finde en generelt gældende normaliseringsfaktor for alle banetyper [6, s. 33], i praksis er dette dog kun et matematisk problem. For de banetyper der benyttes i denne opgave er grænsen veldefineret¹. Normaliseringsfaktoren A , er dermed både afhængig af banetype og ϵ . Amplituden er da givet som

$$K(b, a) = \lim_{N \rightarrow \infty} A \int \int \dots \int dx_1 dx_2 \dots dx_N e^{(i/\hbar)S[b, a]} \quad (3.11)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} A \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N dx_j e^{(i/\hbar)S[b, a]}, \quad (3.12)$$

hvor der med $S[b, a]$ menes at virkningen er restringeret til de baner der starter i $a = x_0$ og slutter i $b = x_{N+1}$. Per konstruktion gennemløber banerne i $S[b, a]$ alle x_i 'erne. Dette kan vi eksplicit skrive ud ved at benytte formel (3.7):

$$K(b, a) = \lim_{N \rightarrow \infty} A \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N dx_j e^{(i/\hbar) \sum_{j=0}^N S[x_{j+1}, x_j]}. \quad (3.13)$$

Fra formel (3.7) og ovenstående er det klart at der nødvendigvis må gælde at

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} K(b, c) K(c, a) dx_c. \quad (3.14)$$

For at lette notationen indføres pathintegralet $\int_a^b \mathcal{D}x(t)$ som værende den normaliserede integration over alle baner fra a til b . Dermed kan amplituden skrives som

$$K(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}x(t) e^{(i/\hbar)S[x(t)]}. \quad (3.15)$$

For at opsummere ovenstående, så er ideen at vi ønsker at bestemme amplituden, $K(b, a)$. Amplituden er givet som en sum over alle baner. For at kunne arbejde videre med summen er vi nødt til at få den skrevet ned på en mere konkret form. En måde er ved at lave en infinitesimal opsplnitning i tiden, hvilket er det vi gør.

De relevante størrelser er nu blevet indført, så det er på tide at få relationen til klassisk mekanik på plads. Den umiddelbare uforenlighed med klassisk mekanik der blev beskrevet lige efter Feynmans postulater skyldes at alle baner vægtes ens. Løsningen på problemet ligger dog også i postulatet idet det i sidste ende bliver den komplekse fase givet ved $e^{\frac{i}{\hbar}S}$ udvælger den rigtige bane. Så selvom alle baner a priori har samme vægt, viser det sig at det kun er de baner der ligger nær den klassiske bane der bidrager². For alle andre baner vil selv små ændringer i positionen x fører til store ændringer i $\frac{S}{\hbar}$ fordi \hbar er så lille en størrelse. Denne ændring betyder at $e^{\frac{i}{\hbar}S}$ vil oscillere, hvilket gør at integralet vil gå mod 0 for alle endelige ændringer i positionen³

¹Feynman gik selv så langt som til at skrive at normaliseringsfaktoren var veldefineret for alle situationer der så vidt han kunne se havde praktisk betydning [6, s. 33].

²Den klassiske bane for en partikel er entydigt bestemt og man kan vise at denne bane ekstremiserer den klassiske virkning [9, s. 117].

³For løsninger ved numeriske metoder er dette alt afgørende idet disse kun integrerer et endeligt interval omkring den klassiske bane.

3.4 Relationen til Schrödinger billedet

I dette underafsnit vil jeg vise at kvantemekanikken ligger i pathintegralet. Mere specifikt vil jeg udlede Schrödingers ligning på baggrund af Feynmans postuler.

Vi antager at amplituden $K(b, a)$ er identisk med propagatoren som vi kender fra kvantemekanik¹. Vi ved om propagatoren at der gælder[9, s. 110]:

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_b, t_b; x_a, t_a) \psi(x_a, t_a) dx_a, \quad (3.16)$$

hvilket vil sige at propagatoren kan ses som tidsudviklingsoperatoren der udvikler en bølgefunktion i tid og rum, hvor bølgefunktionen selv angiver vægten. Schrödingers ligning er af differential form. Det vil derfor være nærliggende at gøre t_b til et infinitimalt tidsskridt i forhold til t_a . Vi husker at virkningen er givet ved Lagrangefunktionen som:

$$S = \int_{t_a}^{t_b} dt L(\dot{x}, x, t). \quad (3.17)$$

For små tidsskridt approksimeres x, \dot{x} med middelhastigheden og middelpositionen. Vi får da at det om propagatoren gælder:

$$K(x, t + \epsilon; y, t) = A \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} L \left(\frac{x-y}{\epsilon}, \frac{x+y}{2} \right) \right\}, \quad (3.18)$$

dermed bliver den tilhørende bølgefunktion

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} A \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} L \left(\frac{x-y}{\epsilon}, \frac{x+y}{2} \right) \right\} \psi(y, t) dy. \quad (3.19)$$

For at relatere teorien til Schrödinger billedet restringeres Lagrangefunktionen²:

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x, t), \quad (3.20)$$

dermed fås

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} A \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x-y)^2}{\epsilon} \right\} \exp \left\{ -\epsilon \frac{i}{\hbar} V \left(\frac{x+y}{2}, t \right) \right\} \psi(y, t) dy. \quad (3.21)$$

Vi bemærker at $\frac{(x-y)^2}{\epsilon}$ bliver en meget stor størrelse medmindre x og y ligger meget tæt. Hvis denne faktor bliver stor, exponentialet oscillerer voldsomt hvilket betyder at integralet over y bliver meget lille. Med andre ord får vi altså kun et reelt bidrag til integralet når $x \approx y$. Vi indfører en ny variabel, $y = x + \eta$, således får vi kun et bidrag når η er lille. Vores ligning får med den nye variabel formen:

$$\psi(x, t + \epsilon) = A \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{\eta^2}{\epsilon} \right\} \exp \left\{ -\epsilon \frac{i}{\hbar} V \left(x + \frac{\eta}{2}, t \right) \right\} \psi(x + \eta, t) d\eta. \quad (3.22)$$

¹En mere elegant måde at gøre dette er ved at resonere sig frem til at dette må være tilfældet. Feynman gjorde dette i sin originale artikel [5].

²Det at man bliver nødt til at begrænse Lagrangefunktionen antyder at man kan vises mere med pathintegral formalismen en med Schrödinger billedet.

ψ ekspanderes nu i en potensrække. Vi beholder kun led op til ϵ i tid og op til η^2 i rum. η ekspanderes til 2. orden fordi hovedbidraget til integralet kommer når η har orden $\sqrt{\epsilon}$. Grunden til dette er at der i exponentialet står $\frac{\eta^2}{\epsilon}$, så når η^2 har orden ϵ oscillerer eksponentialet mindst, hvilket dermed giver det største bidrag til integralet.

$$\psi(x, t) + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = A \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \epsilon} \right\} \exp \left\{ -\epsilon \frac{i}{\hbar} V \left(x + \frac{\eta}{2}, t \right) \right\} \left[\psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{2} \eta^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] d\eta. \quad (3.23)$$

Tilsvarende ekspanderes potentialet¹. Herefter ekspanderes exponentialet med potentialet. Derved fås:

$$\psi(x, t) + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = A \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \epsilon} \right\} \left[1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x, t) \right] \left[\psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{2} \eta^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] d\eta. \quad (3.24)$$

Vi sammenligner nu led af samme orden. Til 0. orden i ϵ og η fås:

$$\psi(x, t) = A \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \epsilon} \right\} \psi(x, t) d\eta. \quad (3.25)$$

Vi kan nu direkte aflæse vores normaliseringskonstant, A , til at være:

$$\frac{1}{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \epsilon} \right\} d\eta = \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m}}. \quad (3.26)$$

Til første orden i η reduceres til kun at have led på højre side, hvilket da nødvendigvis må give 0.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \epsilon} \right\} \eta d\eta = 0. \quad (3.27)$$

Til første orden i ϵ og 2. orden i η får vi:

$$\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = A \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \epsilon} \right\} \left[\frac{1}{2} \eta^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x, t) \psi(x, t) \right] d\eta. \quad (3.28)$$

Det andet led i integralet er trivielt løst idet η afhængigheden kun befinder sig i exponentialet. Det første led kan enten slås op i en integraltabel eller løses ved opsplitning i to produkter og skift til polære koordinater. Resultatet bliver:

$$\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar \epsilon}{2im} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i\epsilon}{\hbar} V \psi. \quad (3.29)$$

Dette er netop vores normale Schrödinger ligning, ved at gange igennem med $\frac{i\hbar}{\epsilon}$ fås den mere normale form:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \psi = H \psi. \quad (3.30)$$

¹ $\epsilon V(x, \frac{\eta}{2}, t)$ ekspanderes til $\epsilon V(x, t)$ da alle andre led har orden højere end ϵ .

3.5 Delkonklusion

I dette afsnit tog jeg udgangspunkt i Feynmans postulater. Jeg har herfra indført formalismen der typisk bliver benyttet ved udregninger med Feynmans pathintegral. Endelig har jeg vist at Feynmans pathintegral kan betragtes som en alternativ formulering af kvantemekanikken. Dette betyder at vi kan bruge resultater derfra i det følgende.

4 Normaliseringsfaktor for forskellige banetyper

Ved inførelsen af pathintegralet blev det bemærket at der skulle indføres en banetype der forbandt startspunktet med slutpunktet, muligvis med mellemliggende integrationsvariable. Valget af banetype er udelukkende notation og kan derfor ikke have nogen indflydelse på resultatet. Tilgængæld kan banetypen have stor indflydelse på udregningen der fører til resultatet. For hver banetype er det nødvendigt at bestemme den tilhørende normaliseringsfaktor. Dette foregår typisk ved at man vælger en banetype, udregner propagatoren for den frie partikel og vælger normaliseringsfaktoren således at propagatoren passer for den frie partikel.

Vi ved fra kvantemekanik at for den frie partikel er propagatoren givet som¹:

$$K(x_b, x_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}} \exp \left\{ \frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)} \right\} \quad (4.1)$$

og Lagrangefunktionen er givet som

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2}. \quad (4.2)$$

4.1 Zigzagbaner

Den første banetype vi ser på er zigzagbanerne. En zigzagbane består af et antal lige baner. En lige bane er en bane beskrevet ved et ret linjestykke der går fra et punkt i rumtiden til et andet punkt. Zigzagbanen består dermed af et antal rette linjestykker der går fra startpunkt til slutpunkt, en skitse af en zigzagbane kan ses i figur 2

I udledningen af Schrödingers ligning fandt vi normaliseringsfaktoren for en lige bane. Udvidelse til zigzagbane kan da laves ud fra formel (3.14). I det følgende har jeg dog alligevel valgt at tage den traditionelle udledning af normaliseringsfaktoren for zigzagbaner med. Dette har jeg fordi zigzagbaner er simple baner at benytte ovenstående metode på. Så inden jeg går videre til de mere besværlige sinusbaner, er det min overbevisning at det er bedst at se metoden benyttet på det simple tilfælde. Normaliseringsfaktoren for zigzagbaner markeres med et sænket Z, A_Z .

Ønsker man et udtryk for hvorledes de lige baner der udgør zigzagbanen er givet så kunne følgende være en måde at angive dem på:

$$x(t) = x_i + (x_{i+1} - x_i) \frac{t - t_i}{\epsilon}, t \in [t_i, t_{i+1}]. \quad (4.3)$$

For en lige bane er \dot{x} en konstant:

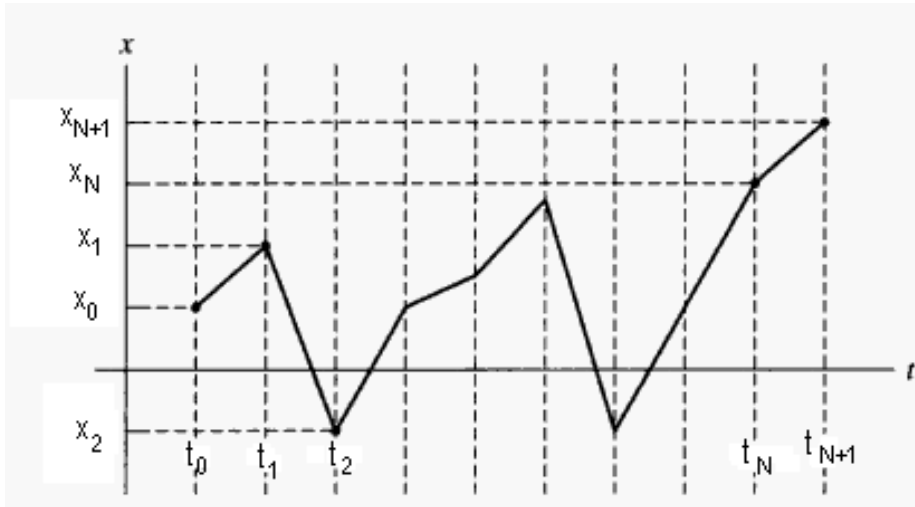
$$\dot{x} = \frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}, \quad (4.4)$$

¹En udledning til resultatet kan blandt andet ses i [9, s. 110-112].

så den klassiske virkning bliver:

$$\begin{aligned}
 S &= \int_{t_a}^{t_b} \frac{m\dot{x}^2}{2} dt \\
 &= \frac{m\dot{x}^2}{2} \cdot [t_b - t_a] \\
 &= \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}.
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Opsplitningen i $(N + 1)$ ækvidistante tidsskridt af længden ϵ foretages ligesom i formel (3.9), en skitse kan ses i figur 2. Det følger da af formel (3.7) at virkningen



Figur 2: Her ses hvorledes en zigzagbane opdelt i ækvidistante tidsskridt kunne tænkes at se ud. Enhver lige bane varer netop i et tidsskridt. Denne zigzagbane er altså opbygget af $N + 1$ lige baner.

kan skrives som:

$$S = \frac{m}{2\epsilon} \sum_{j=0}^N (x_{j+1} - x_j)^2. \tag{4.6}$$

Virkningen indsættes i det approksimative udtryk for propagatoren svarende til formel (3.12):

$$K_N(x_b, x_a) = A_{N,Z} \int \cdots \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar\epsilon} \cdot \sum_{j=0}^N (x_{j+1} - x_j)^2 \right\}. \tag{4.7}$$

Metoden er nu at vælge normaliseringskonstanten A således at K_N i grænsen hvor $N \rightarrow \infty$ giver formel (4.1). Den mest naturlige måde at gøre dette på er ved at vælge A således at K_N giver formel (4.1) for alle N .

$A_{0,Z}$ bestemmes da til følgende:

$$K_0(x_b, x_a) = A_{0,Z} \exp \left\{ \frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar\epsilon} \right\}, \tag{4.8}$$

dermed fås:

$$A_{0,Z} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}}. \tag{4.9}$$

For $N = 1$ får vi:

$$K_1(x_b, x_a) = A_{1,Z} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar\epsilon} [(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2] \right\}. \quad (4.10)$$

Dette integral kan løses ved tabelopslag. Fra [12, s. 109] har vi følgende integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(ax^2+bx+c)} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{(b^2-4ac)/4a}, \quad (4.11)$$

hvilket nemt kan omskrives til:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{a(x_1-x)^2} e^{b(x_2-x)^2} dx = \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}} e^{\frac{ab}{a+b}(x_1-x_2)^2}. \quad (4.12)$$

Ved at benytte ovenstående integral fås:

$$K_1(x_b, x_a) = A_{1,Z} \sqrt{\frac{i\pi\hbar\epsilon}{m}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar(2\epsilon)} (x_2 - x_0)^2 \right\}. \quad (4.13)$$

Husk at $x_0 = x_a$ og $x_2 = x_b$, dermed fås:

$$A_{1,Z} = \frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} = A_{0,Z}^2. \quad (4.14)$$

For $N > 1$ får vi flere integraler indeni hinanden der alle skal løses. Problemet bliver heldigvis meget simplere idet det bemærkes at integralerne alle er gaussiske, hvor hver af integrationsvariablene kun er i to af ledene. Gaussiske integraler giver ved integration gaussiske funktioner. Det betyder at vi kan integrere hver variabel uafhængigt af de andre ved brug af formel (4.12). Løses integralerne i (4.7) en af gangen fås:

$$K_N(x_b, x_a) = A_{N,Z} \left(\frac{2i\pi\hbar\epsilon}{m} \right)^{\frac{N}{2}} \frac{1}{\sqrt{N+1}} \exp \left\{ \frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar(N+1)\epsilon} \right\}, \quad (4.15)$$

så

$$A_{N,Z} = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}}. \quad (4.16)$$

For lige baner viste normaliseringsfaktoren sig at have en simpel potensafhængighed af N . Dermed bliver det generelle udtryk for propagatoren med zigzagbaner:

$$K(x_b, T; x_a, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N dx_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T L(\dot{x}_{N,L}, x_{N,L}, t) dt \right\}. \quad (4.17)$$

En anden måde at skrive det generelle udtryk er på følgende måde:

$$K(x_b, T; x_a, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} C_{N,Z} (iT)^{-(N+1)/2} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N dx_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T L(\dot{x}_{N,L}, x_{N,L}, t) dt \right\}, \quad (4.18)$$

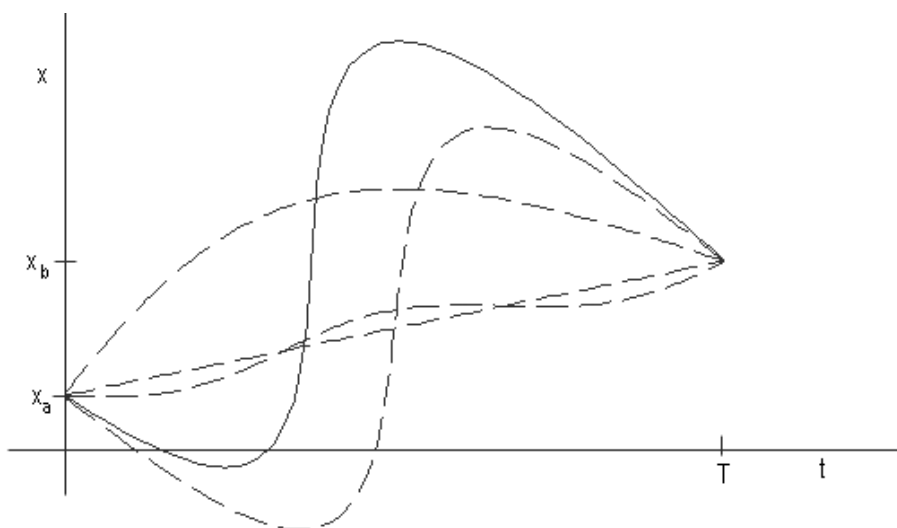
hvor

$$C_{N,Z} = \left(\frac{m(N+1)}{2\pi\hbar} \right)^{(N+1)/2}. \quad (4.19)$$

Her har vi eksplicit trukket iT afhængigheden ud af konstanten. Dette er gjort ved at udnytte at $T = (N+1)\epsilon$. Grunden til denne omskrivning er at den nu er på samme form som det udtryk der i næste underafsnit vil blive udledt for sinusbaner. At dette er praktisk, vil komme til udtryk i afsnit 5.

4.2 Sinusbaner.

I det følgende findes den tilsvarende normaliseringsfaktor for sinusbaner. Normaliseringsfaktoren for sinusbaner markeres med et sænket S, A_S . Med en sinus-



Figur 3: Hver af de stiplede baner er en vægtet sinusbane. Den fuldt optrukne bane er summen af de forskellige sinusbaner og er ment som et eksempel på hvorledes en vilkårlig bane kan opbygges af en linearkombination af sinus baner.

bane, fra rumtidskoordinaterne (x_a, t_a) til rumtidskoordinaterne (x_b, t_b) , menes en bane givet ved:

$$x(t) = x_0(t) + \sum_{j=1}^n x_j \sin\left(\frac{\pi j t}{t_b - t_a}\right), \quad (4.20)$$

hvor x_0 er den lige bane fra x_a til x_b og x_j er vægten af den enkelte sinusbane. Lad $t_a = 0$ og $t_b = T$, da bliver den klassiske virkning for en fri partikel:

$$S = \int_0^T \frac{m\dot{x}^2}{2} dt. \quad (4.21)$$

Ved indsættelse af baneudtrykket i virkningen fås:

$$S = \frac{m}{2} \int_0^T \left[\dot{x}_0 + \frac{\pi}{T} \sum_{j=1}^n x_j j \cos\left(\frac{\pi j t}{T}\right) \right]^2 dt. \quad (4.22)$$

Vi benytter nu at \dot{x}_0 er uafhængig af t . Herved fås ved en længere udregning¹:

$$S = \frac{m}{2T} \left\{ (x_b - x_a)^2 + \frac{\pi^2}{2} \sum_{j=1}^n x_j^2 j^2 \right\}. \quad (4.23)$$

For zigzagbaner var næste skridt at lave en ækvidistant opsplitning af tiden og integrere over de tilhørende rum-variable. Dette er ikke nødvendigt med sinusbanerne idet disse allerede udgør et komplet sæt der udspejler hele rummet. Den interessante variabel for sinusbaner er ikke antallet af tidsskridtsopdelinger N da vi kan tage hele rummet i blot et tidsskridt. Vi får i stedet den nye variabel n der angiver hvor mange sinus funktioner vi har medtaget. En skitse af dette kan ses i figur 3. For at få alle baner integreres over alle valg af vægte x_j .

Vi kan nu indsætte virkningen i et approksimativt udtryk for propagatoren svarende til formel (3.12). Hermed får vi:

$$\begin{aligned} K_n(x_b, T; x_a, 0) &= A_{n,S} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar T} \left[(x_b - x_a)^2 + \frac{\pi^2}{2} \sum_{j=1}^n x_j^2 j^2 \right] \right\} \\ &= A_{n,S} e^{\frac{im}{2\hbar T} (x_b - x_a)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \exp \left\{ \frac{im\pi^2}{4\hbar T} \sum_{j=1}^n x_j^2 j^2 \right\}. \end{aligned}$$

Da der ingen kobling er mellem de forskellige variable kan integralerne løses hver for sig. Resultatet bliver:

$$\begin{aligned} K_n(x_b, T; x_a, 0) &= A_{n,S} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar T} (x_b - x_a)^2 \right\} \prod_{j=1}^n \frac{2}{j} \sqrt{\frac{i\hbar T}{m\pi}} \\ &= A_{n,S} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar T} (x_b - x_a)^2 \right\} \frac{2^n \left(\frac{i\hbar T}{m\pi}\right)^{\frac{n}{2}}}{n!}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Normaliseringsfaktoren bestemmes nu ved at sammenligne ovenstående udtryk med det oprindelige udtryk for propagatoren af en fri partikel som givet i formel (4.1):

$$\begin{aligned} \Rightarrow A_{n,S} &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}} \frac{n!}{2^n \sqrt{\frac{i\hbar T}{m\pi}}^n} \\ &= \frac{n!}{\sqrt{2\pi}} \frac{\pi^{n/2}}{2^n} \left(\frac{m}{\hbar}\right)^{(n+1)/2} \frac{1}{(iT)^{(n+1)/2}} \\ &= C_{n,S} \frac{1}{(iT)^{(n+1)/2}}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Konstanten C_n indføres for at få en konstant der er uafhængigheden af T da T i senere udregninger bliver en variabel. Normaliseringsfaktoren er givet som

$$C_{n,S} = \frac{n!}{\sqrt{2\pi}} \frac{\pi^{n/2}}{2^n} \left(\frac{m}{\hbar}\right)^{(n+1)/2}. \quad (4.26)$$

¹Udregningen kan ses i Appendix 8.1.1.

Det generelle udtryk for propagatoren angivet med sinusbaner er da:

$$K(x_b, T; x_a, 0) = \lim_{n \rightarrow \infty} C_n (iT)^{-(n+1)/2} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T L(\dot{x}_{n,S}, x_{n,S}, t) dt \right\}. \quad (4.27)$$

4.3 Delkonklusion

Vi har nu fundet normaliseringsfaktoren for to forskellige banetyper. Normaliseringsfaktoren for zigzagbanen blev fundet ud fra metoden beskrevet i begyndelsen af afsnittet. Da sinusbanerne udgør et komplet sæt var det for dem ikke nødvendigt at en opsplittning i tiden. Det viste sig at normaliseringsfaktoren for sinusbaner blev noget mere kompliceret end for zigzagbanerne. Dette får dog ikke den store betydning i de følgende udregninger hvor vi arbejder videre med begge banetyper.

5 Fra propagator til energispektrum

Vi antager at ψ_j er et fuldstændigt sæt af energi egenfunktioner og at vi ikke kender de tilhørende energiniveauer.

I det følgende vises hvorledes man helt generelt kan finde et systems energispektrum ud fra propagatoren. Vi udnytter at propagatoren både kan opskrives ud fra Feynmans pathintegral og energi-eigenfunktionerne.

Idet sættet af egenfunktioner er fuldstændigt har vi fra kvantemekanik at en propagator kan skrives som¹:

$$K(x_b, T; x_a, 0) = \sum_j \psi_j(x_b) \psi_j^*(x_a) \exp \left\{ \frac{-iE_j T}{\hbar} \right\}. \quad (5.1)$$

For at bestemme energiniveauerne ser vi på propagatoren for $x_a = x_b$, dermed fås:

$$K(x, T; x, 0) = \sum_j |\psi_j(x)|^2 \exp \left\{ \frac{-iE_j T}{\hbar} \right\}. \quad (5.2)$$

Det næste skridt er at lave en Fouriertransformation til energirummet²:

$$\begin{aligned} \tilde{G}(x, E) &= \int_{-\infty}^{\infty} dT K(x, T; x, 0) \exp \left\{ \frac{iET}{\hbar} \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dT \sum_j |\psi_j(x)|^2 \exp \left\{ \frac{-iE_j T}{\hbar} \right\} \exp \left\{ \frac{iET}{\hbar} \right\} \\ &= \sum_j |\psi_j(x)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dT \exp \left\{ \frac{iT}{\hbar} [E - E_j] \right\} \\ &= \sum_j |\psi_j(x)|^2 2\pi \delta(E - E_j), \end{aligned} \quad (5.3)$$

hvor vi har benyttet notationen $G(x, E) \equiv G(x, E, x, 0)$. Vi bemærker nu at den komplekse eksponentialfunktion der står i formel (5.3) kan splittes op i en lige og ulige del, og eftersom der integreres over et symmetrisk interval ved vi at det kun er den lige del der bidrager. Den lige del af en eksponentialfunktion kan skrives som det halve integral med den dobbelte styrke:

$$\tilde{G}(x, E) = 2 \sum_j |\psi_j(x)|^2 \int_{-\infty}^0 dT \exp \left\{ \frac{iT}{\hbar} [E - E_j] \right\}. \quad (5.4)$$

Vi indfører nu en skaleret fouriertransformation:

$$G(x, E) = \sum_j |\psi_j(x)|^2 \int_{-\infty}^0 dT \exp \left\{ \frac{iT}{\hbar} [E - E_j] \right\} = \sum_j |\psi_j(x)|^2 \pi \delta(E - E_j).$$

Hvis ikke vi kender energiniveauerne så kender vi heller ikke egentilstandene, men hvis vi alligevel skulle vide at $\psi_j(0) \neq 0$ så kan man med fordel sætte $x = 0$.

¹Dette er blot tidsudviklingen af en bølgefunktion skrevet med anden notation end Dirac notationen vi er vant til. Hvis man ikke kender dette fra kvantemekanik står der et eksempel på hvorledes man kommer frem til dette i [9, s. 110].

²For en detaljeret gennemgang af hvorledes Fouriertransformationen virker og dens relation til deltafunktionen anbefales [1, kap. 15].

På denne måde vil man få skalerede deltafunktioner hvor energiniveauerne direkte kan aflæses ud fra. Hvis $\psi_j(0) = 0$ bliver skaleringsfaktoren på den tilhørende deltafunktion 0. Dette betyder at man ikke vil kunne aflæse det tilhørende energiniveau. Ved sådanne tilfælde skal man enten finde et x hvor $\psi_j(x) \neq 0$ eller man kan benytte den helt generelle metode hvilket er at integrere x fra $-\infty$ til ∞ hvor man udnytter at $\psi_j(x)$ er normaliseret. Ved integration fås:

$$\begin{aligned} F(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} G(x, E) dx \\ &= \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_j(x)|^2 dx \pi \delta(E - E_j) \\ &= \pi \sum_j \delta(E - E_j). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Fra ovenstående udtryk kan man direkte aflæse energiniveauerne for et givent potential uafhængigt af hvorledes bølgefunktionerne måtte se ud. Ulempen ved formel (5.5) frem for (??) er dog at den indeholder et ekstra integral der generelt kobler de forskellige variable.

5.1 Energispektrum for stedafhængigt potential

I dette afsnit betragtes et stedafhængigt potential. Ved brug af de to banetyper bestemmes et udtryk for energispektrummet. Udregningen foretages efter metoden beskrevet ovenfor.

5.1.1 Propagatoren

I det følgende findes synkront for zigzagbaner og sinusbaner den generelle stedafhængige propagator.

I opskrivning af den generelle propagator for henholdsvis zigzagbaner og sinusbaner har jeg skrevet udtrykkene på samme form. Dette gør at begge udregninger kan gennemføres på en gang.

Så den generelle propagator er:

$$K(x_b, T; x_a, 0) = \lim_{n \rightarrow \infty} C_n (iT)^{-(n+1)/2} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T L(\dot{x}_n, x_n, t) dt \right\}. \quad (5.6)$$

C_n kan både vælges til sinusbaner eller zigzagbaner. Ved valg af sinusbane er konstanten $C_{n,S}$ som angivet i formel (4.26). Ved valg af zigzagbaner er konstanten $C_{n,Z}$ som angivet i formel (4.19). Af hensyn til overskueligheden vil approksimeringsstallet n samt banetypen blive undertrykt for x og dens afledte.

a har enhed længde og U_0 enhed energi. Vores Lagrangefunktion bliver med det generelle potential af formen:

$$L(\dot{x}, x, t) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - U_0 \phi(x/a). \quad (5.7)$$

Dette indsættes i det approksimative udtryk svarende til propagatoren udregnet

i formel (5.6). Samtidig gøres x dimensionsløs.

$$K_n(x_b, T; x_a, 0) = a^n C_n(iT)^{-(n+1)/2} \quad (5.8)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left(\frac{ma^2}{2} \dot{x}^2 - U_0 \phi(x) \right) dt \right\}. \quad (5.9)$$

Ved at indsætte $x_b = x_a = x$ kan vi direkte benytte virkningen for den frie partikel som beregnet i afsnit 4. Dermed fås:

$$\begin{aligned} K_n(x, T; x, 0) &= a^n C_n(iT)^{-(n+1)/2} \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left(\frac{ma^2}{2} \dot{x}^2 - U_0 \phi(x) \right) dt \right\} \\ &= a^n C_n(iT)^{-(n+1)/2} \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\beta \sigma_n}{T} - U_0 \int_0^T \phi(x) dt \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

De indførte variable er for zigzagbaner følgende:

$$\sigma_{n,Z} = \sum_{j=0}^n (x_{j+1} - x_j)^2, \quad \beta_Z = \frac{ma^2(n+1)}{2}, \quad (5.11)$$

og for sinusbaner følgende:

$$\sigma_{n,S} = \sum_{j=1}^n j^2 x_j^2, \quad \beta_S = \frac{\pi^2 ma^2}{4}. \quad (5.12)$$

Som det næste skiftes integrationsvariablen i potentialledet til en normaliseret tid τ . Dette gøres for at få fjerne tiden T fra integrationsgrænsen.

$$K_n(x, T; x, 0) = a^n C_n(iT)^{-(n+1)/2} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\beta \sigma_n}{T} - U_0 T f_n \right] \right\}. \quad (5.13)$$

De nye variable er defineret som følgende:

$$\tau = \frac{t}{T}, \quad f_n = \int_0^1 \phi(x(\tau)) d\tau. \quad (5.14)$$

5.1.2 Den skalerede fouriertransformerede propagator

I sidste afsnit fandt vi et udtryk for propagatoren. Dette udtryk tager vi nu Fouriertransformen af som beskrevet i begyndelsen af afsnit 5.

$$\begin{aligned} G_n(x, E) &= a^n C_n \mathbb{R} \left\{ \int_0^{\infty} dT (iT)^{-(n+1)/2} \right. \\ &\left. \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\beta \sigma_n}{T} - U_0 T f_n + ET \right] \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Integrationsrækkefølgen ændres og og hermed får vi:

$$G_n(x, E) = a^n C_n \mathbb{R} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \int_0^{\infty} dT (iT)^{-(n+1)/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\beta \sigma_n}{T} - U_0 T f_n + ET \right] \right\} \right\}. \quad (5.16)$$

Som det næste løses integralet over T ¹. Resultatet bliver:

$$G_n(x, E') = B_n \mathbb{R} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \left(\frac{z}{\sigma_n} \right)^{(n-1)/2} H_{(n-1)/2}^{(1)}(z) \right\}, \quad (5.17)$$

hvor $H_n^{(1)}(z)$ er den første slags Hankelfunktion til orden n . Resten af de nye funktioner og variable er givet som følgende:

$$B_n = \pi a^n C_n \left(\frac{\hbar}{2\beta} \right)^{(n-1)/2}, \quad z = \frac{2}{\hbar} \sqrt{U_0 \beta \sigma_n} \sqrt{E' - f_n}, \quad E' = \frac{E}{U_0}. \quad (5.18)$$

Fra formel (5.17) kan vi nu gå to veje. Man kan indsætte en værdi for x og beregne nogle energiniveauer. Fordelen ved dette er at man sparer et integral og får udtrykket forsimplet. Ulempen er at man ikke er garanteret at finde nogle energiniveauer og selv hvis man gør kan man ikke sige hvormange man ikke har fundet. Den eneste sikre måde at finde alle energiniveauerne er ved at integrere $G_n(x, E')$ over x hvormed der fås:

$$F_n(E') = B_n \int_{-\infty}^{\infty} dx \mathbb{R} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^n dx_j \left(\frac{z}{\sigma_n} \right)^{(n-1)/2} H_{(n-1)/2}^{(1)}(z) \right\}. \quad (5.19)$$

Ved at omdefinere x til x_0 kan integralet sættes sammen med de andre integraler. Således får vi:

$$F_n(E') = B_n \mathbb{R} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=0}^n dx_j \left(\frac{z}{\sigma_n} \right)^{(n-1)/2} H_{(n-1)/2}^{(1)}(z) \right\}. \quad (5.20)$$

Formel (5.17) og formel (5.20) ses at have samme form. Uanset om man sætter $x = 0$ eller integrerer over x så vil det følgende være ens for begge metoder. I det følgende vælges at arbejde videre med den generelle metode, men resultatet kan under alle skridt i processen omformes til den anden metode ved blot at droppe integralet over x og sætte $x = 0$. Konstanten B_n har ingen betydning i vores søgen efter energiniveauerne, så der defineres en ny funktion:

$$R_n(E') = F_n(E')/B_n = \mathbb{R} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=0}^n dx_j \left(\frac{z}{\sigma_n} \right)^{(n-1)/2} H_{(n-1)/2}^{(1)}(z) \right\}. \quad (5.21)$$

¹Kort fortalt gøres dette ved at omskrive ovenstående udtryk til en af integralrepræsentationerne for Hankelfunktionen, udregningen af dette er at finde i Appendix 8.1.3.

Vi ønsker nu at bestemme den reelle del af (5.21). Første skridt bliver at bestemme hvornår z er imaginær.

$$z = \frac{2}{\hbar} \sqrt{U_0 \beta \sigma_n} \sqrt{E' - f_n}. \quad (5.22)$$

Vi ser at $z \geq 0$, så længe $E' \geq f_n$ og at den ellers vil være imaginær.

Det næste vi har behov for er et kendskab til hvorledes Hankelfunktionen behandler forskellige typer inputs. Mere specifikt skal vi vide hvorledes Hankelfunktionens output ser ud når man indsætter henholdsvis reelle tal større end 0 og imaginære tal større end 0.

Det viser sig at $H_\nu(x)$ generelt har kompleks output og det samme gælder for $H_\nu(i \cdot x)$ medmindre ν er et naturligt tal. Hvis ν er et lige tal så vil $H_\nu(i \cdot x)$ kun have et imaginært output, og hvis ν er ulige så vil $H_\nu(i \cdot x)$ kun have reelt output ($x \in \mathbb{R}_+$).

Endvidere ved vi at Hankelfunktionen kan splittes op i reel og imaginær del:

$$H_n^{(1)}(z) = J_n(z) + iY_n(z), \quad (5.23)$$

hvor J_n er den n 'te Besselfunktion af første slags og Y_n er den n 'te Besselfunktion af anden slags.

Hvis $E' \geq f_n$ så bliver $z \geq 0$. Det betyder at vi skal bruge den reelle del af $H_n^{(1)}(z)$; det vil sige $J_n(z)$. Spørgsmålet er nu om der også kommer et reelt bidrag hvis $f_n > E'$.

$f_n > E'$ medfører at z er imaginær. Dette betyder at $z^{(n-1)/2}$ både kan være reel og imaginær alt afhængig af værdien af n . for n lige fås:

$$i^{(n-1)/2} = i^{n/2} \frac{1}{\sqrt{i}} = i^{n/2} e^{-i\pi/4}. \quad (5.24)$$

De tilhørende Hankelfunktioner $H_{(n-1)/2}(ix)$ er givet som:

$$H_{(n-1)/2}(ix) = \exp\left\{(-1)^{n/2+1} i\pi/4\right\} \cdot y, \quad (5.25)$$

hvor y er reel. Ved kombination af formel (5.24) og formel (5.25), fås da altid noget imaginært.

For ulige n må vi igen splitte op i yderligere to tilfælde:

Hvis $n = \{1, 5, 9, \dots\}$ så bliver $z^{(n-1)/2}$ reel. Derfor skal den kombineres med den reelle del af $H_{(n-1)/2}(i \cdot x)$ hvilket er 0.

Hvis $n = \{3, 7, 11, \dots\}$ så bliver $z^{(n-1)/2}$ imaginær med en hel potens af i . Derfor skal denne kombineres med den imaginære del af $H_{(n-1)/2}(i \cdot x)$ hvilket ikke er 0.

Sammendraget af ovenstående overvejelser bliver altså at: Formel (5.21) gælder generelt for alle n :

For n lige eller $n = \{1, 5, 9, \dots\}$ reduceres dette til:

$$R_n(E') = \int_D \prod_{j=0}^n dx_j \left(\frac{z}{\sigma_n}\right)^{(n-1)/2} J_{(n-1)/2}(z), \quad (5.26)$$

hvor D er integrations-domænet hvorom der gælder:

$$E' \geq f_n. \quad (5.27)$$

For n lige kan vi yderligere reducere vores udtryk. Ved at benytte Rayleighs formel med $n = 2k + 2, k \in \mathbb{N}$ fås¹:

$$R_n(E') = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_D \prod_{j=0}^n dx_j \sigma_n^{(1-n)/2} z^{2k+1} \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^k \frac{\sin z}{z}. \quad (5.28)$$

For $n = \{3, 7, 11, \dots\}$ kommer der et ekstra led i formel (5.26) som beskrevet ovenfor. Dette ekstra led vil jeg ikke gøre mere ud af end blot at bemærke at det eksisterer hvis man vælger n fejlagtigt.

5.2 Delkonklusion

Vi har nu set hvorledes man med udgangspunkt i propagatoren kan finde de tilhørende energiniveauer. Efter længere udregninger har vi fundet at formel (5.26 - 5.28) kan benyttes til at finde energispektret for et generelt stedafhængigt potential i en dimension². Hvis vi ved at normen af energi-egenfunktionerne antager en værdi forskellig fra 0 i et givent punkt y , så kan vi udnytte dette til at droppe integralet over x_0 og i stedet sætte $x_0 = y$.

I det følgende afsnit vil jeg teste præcisionen af ovenstående formel for et harmonisk potential.

¹Rayleighs formel står beskrevet i [1, s. 730].

²Udvidelsen til højere dimensioner står beskrevet i [2, s. 4].

6 Simulering med harmonisk oscillator

I dette afsnit laves en simulering af hvorledes formel (5.26 - 5.28) stemmer overens med kendte energiniveauer. Til dette benytter vi et harmonisk potential. Grunden til at vi benytter et harmonisk potential er at dette repræsenterer det simpleste system hvor vi kender løsningen eksakt fra kvantemekanik. Samtidig giver sinusbanerne den bedste chance for at give et godt resultat¹. Vi vælger:

$$\phi(x) = x^2, \quad (6.1)$$

hvilket giver:

$$f_n = \int_0^1 d\tau x^2(\tau). \quad (6.2)$$

Som energienhed vælges:

$$U_0 = \hbar\omega. \quad (6.3)$$

a kan da findes ud fra potentialet:

$$\begin{aligned} \frac{m\omega^2 x^2}{2} &= U_0 \phi(x/a) = \hbar\omega \frac{x^2}{a^2} \\ \Rightarrow a^2 &= \frac{2\hbar}{m\omega}. \end{aligned} \quad (6.4)$$

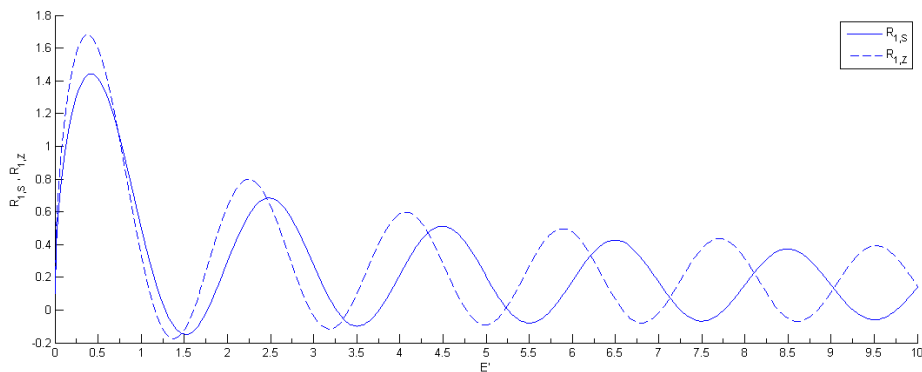
Ved at vælge U_0 på ovenstående måde kan energiniveauerne i en harmonisk oscillator skrives som

$$\begin{aligned} E(n) &= \left(\frac{1}{2} + n\right)\hbar\omega \\ &= \left(\frac{1}{2} + n\right)U_0 \\ \Rightarrow E'(n) &= \left(\frac{1}{2} + n\right). \end{aligned} \quad (6.5)$$

Simuleringen laves med $x_0 = 0$. Dette gøres der er flere forskellige problemer ved at beholde x_0 først og fremmest er det endnu en variabel der numerisk skal integreres over. For det andet så bliver det besværligt at finde integrationsdomænet D , idet der i virkningen fra potentialet vil komme blandede led. Endelig så viser det sig fra simuleringer at koblingen mellem ledene gør deltafunktionerne sværere at bestemme. Det at vi sætter $x_0 = 0$ betyder at vi kun kan se de energiniveauer der har $\psi_j(0) \neq 0$. Det betyder at vi kun ser energiniveauerne for de lige bølgefunktioner fra en harmonisk oscillator. Det vil sige at vi kun bør se en top for $n = \{0.5, 2.5, 4.5, \dots\}$. På figur 4 ses første approksimation til energiniveauerne og i tabel 1 er angivet de relevante toppe og medianer.

Sinusbanerne er som forventet bedre til et harmonisk potential end zigzagbanerne. Det er dog stadig bemærkelsesværdigt hvor godt det første approksimative udtryk stemmer overens med den eksakte værdi. Ved at antage at deltafunktionerne ligger ved maksimum, fås for grundtilstandsenergien en afvigelse på 16%. For de efterfølgende energitilstande er afvigelsen på under 1%. Denne

¹Det er klart at hvor godt de forskellige banetypers toppe stemmer overens med den eksakte værdi, helt kommer an på typen af potential der bliver benyttet. Hvis de stabile bølgefunktioner for et givent potential minder meget om sinus funktioner vil vi forvente at disse er særligt velegnede at simulere systemet med.



Figur 4: Her ses den første approksimation, $n = 1, x = 0$, til energiniveauerne for en harmonisk oscillator. Simuleringen tog ca. 10 sekunder på en 1.8 GHz bærbar.

Eksakt	Sinusbaner		Zigzagbaner	
	Max	Median	Max	Median
0.5	0.42	0.49	0.38	0.44
2.5	2.48	2.50	2.24	2.26
4.5	4.49	4.50	4.07	4.09
6.5	6.49	6.50	5.89	5.90
8.5	8.50	8.50	7.70	7.70

Tabel 1: Her er de forskellige toppe og medianer fra figur 4. Som man kan se passer sinusbanerne rigtig godt overens med den eksakte værdi, specielt når man benytter medianen i stedet for.

afvigelse bliver dog væsentlig mindre når vi i stedet for maksimum benytter medianen der på grund af deltafunktionens natur bør give et mere korrekt resultat¹. Medianen udregnes mellem to på hinanden følgende minima og afvigelsen bliver nu på 2% for grundtilstanden og mindre end 1% for resten.

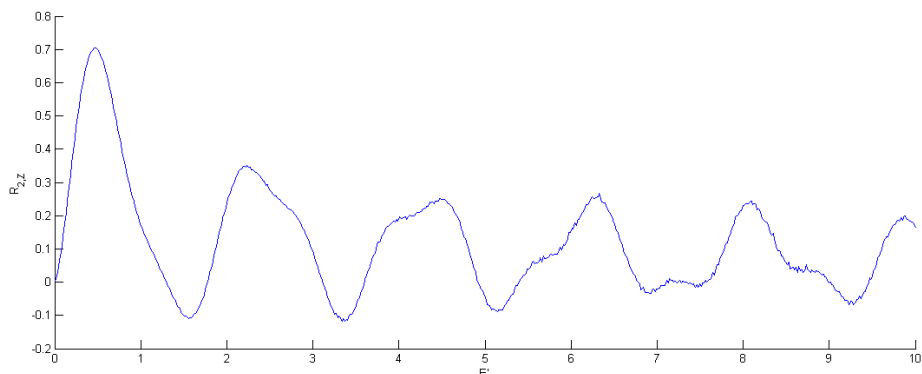
For zigzagbanerne har det laveste energiniveau en afvigelse på 24%. For de højere energiniveauer ligger afvigelsen omkring 10%. Dette hvad enten der benyttes maksimums værdi eller medianværdi. Går vi til højere orden så stiger præcisionen ganske som forventet. For zigzagbanerne ser vi på figur 5 at der opstår falske toppe². Det betyder at vi kan risikere at lave grove fejl ved blot at aflæse maksimum. Den eneste forsvarlige metode er at tage medianen. For zigzagbaner får vi nu en afvigelse på omkring 5 %.

Zigzagbaner		
Eksakt	Max	Median
0.5	0.47	0.52
2.5	2.2	2.37
4.5	4.47	4.32
6.5	6.33	6.24

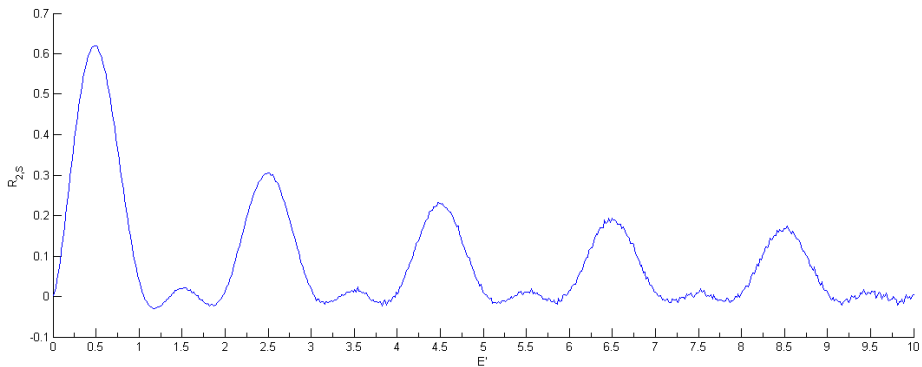
Tabel 2: Her er de forskellige toppe og medianer fra figur 5.

¹Deltafunktionen er matematisk set en grænseovergang, og har strengt taget ikke nogen mening udenfor et integrale. Det er derfor mere naturligt at forbinde deltafunktionen med medianen, der svarer til middelværdien af integralet, end med maksimum.

²Med falske toppe menes der toppe som ikke svarer til et energiniveau.



Figur 5: Her ses den 2. approksimation med zigzagbaner, $n = 2, x = 0$, til energiniveauerne for en harmonisk oscillator. Vi ser som noget nyt at der er kommet falske toppe i vores graf. Støjen der ses for store E skyldes at Monte Carlo simuleringen der benyttes ikke er optimeret. Simuleringen tog ca. 20 minutter på en 1.8 GHz bærbar.



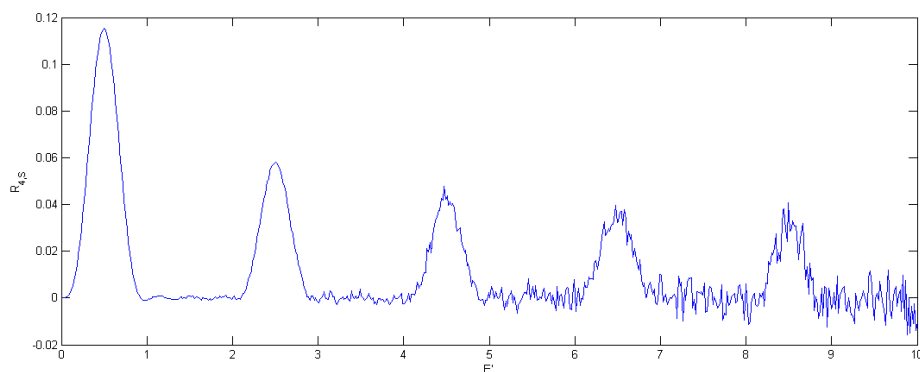
Figur 6: Her ses den 2. approksimation for sinusbanerne, $n = 2, x = 0$, til energiniveauerne for en harmonisk oscillator. Støjen der ses for store E skyldes at Monte Carlo simuleringen der benyttes ikke er optimeret. Simuleringen tog ca. 6 minutter på en 1.8 GHz bærbar.

Højere ordens approksimationer for sinusbanerne kan ses i figur 6-7. Des højere ordenen bliver des mere ligner grafen en linearkombination af deltafunktioner. Disse højere ordens approksimationer er lavet ved Monte Carlo simuleringer¹. Teoretisk set vil højere ordener give mere præcise resultater, men uden uendelig regnekraft eller tid viser det sig at rent praktisk er der en maksimal orden der kan betale sig at gå til. Denne maksimale orden er kendetegnet ved at for højere ordener vil usikkerheden i Monte Carlo simuleringen overskygge unøjagtigheden fra approksimationen². Som eksempel på dette kan man betragte de højere energiniveauer i henholdsvis figur 6 og figur 7. Figur 7 burde teoretisk være den mest præcise, men på grund af usikkerheden i Monte Carlo simuleringen der totalt overskygger unøjagtigheden, er figur 6 mere velegnet til at bestemme de højere energiniveauer. En ting der er vigtig at bemærke er at de simuleringer jeg har lavet her, ikke er blevet optimeret. Hvis f.eks. man benyttede et hurtigere

¹[10] har et afsnit omkring Monte Carlo simuleringer i pathintegraler. Basalt set er det en metode der er god til at udregne integraler i højere dimensioner.

²Usikkerheden i en simpel Monte Carlo simulering går asymptotisk som $\frac{1}{\sqrt{N}}$ hvor N er antal test punkter der benyttes.

programeringsprog end matlab og samtidig udskiftede den meget simple Monte Carlo simulering jeg har lavet med enten en VEGAS eller MISER-Monte Carlo simulering kunne hastigheden hvormed simuleringerne foretages øges drastisk¹. Endelig skal man huske at fordi hver udregning i Monte Carlo simuleringen er uafhængig af den forrige, kan man dog altid zoome ind på et område efter man har lavet den første simulering. Herefter kan man lave en ny og bedre simulering af dette underområde og kombinere denne med den oprindelige simulering for en endnu mere præcis graf.



Figur 7: Her ses 4. ordens approksimation for sinusbanerne, $n = 2, x = 0$, til energiniveauerne for en harmonisk oscillator. Her er støjen endnu værre end den var for 2. ordens tilfældet, det er dog ikke værre end man stadig kan se energiniveauerne. Simuleringen tog ca. 90 minutter på en Core i7 Stationær, med alle kerner i brug.

6.1 Delkonklusion

Ud fra simuleringen kan jeg konkludere flere forskellige ting: Sinusbanerne er velegnet til at finde energiniveauer for oscillator lignende systemer. Selv ved de simpleste approksimationer findes resultater med energiniveauer i den rigtige størrelseorden. Zigzagbanerne kunne tænkes at være velegnet for andre typer systemer. Men for sådanne systemer ville jeg forestille mig at andre metoder der bygger på zigzagbaner er mere velegnet. For eksempel metoden foreslået i [4].

¹Simple Monte Carlo simuleringer mister meget af deres effektivitet hvis integranden varierer voldsomt over små områder, hvilket nærmest må betegnes som essensen af en deltafunktion. Det optimale er derfor at benytte en af de tilpassede Monte Carlo simuleringer, enten VEGAS eller MISER metoden [11].

7 Detaljerede udregninger til simulering

I det følgende beregnes de forskellige relevante størrelser til den numeriske beregning. Disse størrelser kunne naturligvis også beregnes numerisk. Dette ville i mange tilfælde være at foretrække da det er en relativt simpel proces for en computer. Men for at gøre de nødvendige udregninger så klare som mulig, vælger jeg her en analytisk fremgang til problemet.

7.1 $n = 1$, x_0 droppes

Energispektret er givet som formel (5.26). For $n = 1$ fås:

$$R_1(E') = \int_D dx_1 J_0(z). \quad (7.1)$$

Herefter mangler vi blot at finde henholdsvis z og integrations domænet, D . D er defineret ved formel (5.27).

7.1.1 Sinusbaner

For at finde D skal vi først finde potentialet. Dette afhænger af banetypen. For sinusbaner fås et udtryk for potentialet ud fra formel (4.20):

$$x^2(\tau) = x_1^2 \sin^2(\pi\tau). \quad (7.2)$$

Dermed bliver virkningen af potentialet for sinusbaner:

$$\begin{aligned} f_1 &= \int_0^1 d\tau x^2(\tau) \\ &= \frac{1}{2} x_1^2. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Domænet bliver da:

$$\begin{aligned} E' &\geq \frac{x_1^2}{2} \\ \Rightarrow -\sqrt{2E'} &\leq x_1 \leq \sqrt{2E'}. \end{aligned} \quad (7.4)$$

z findes for sinusbaner: Vi har det generelle udtryk fra formel (5.18), for $n = 1$ fås:

$$\begin{aligned} z &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{U_0 \beta} \sqrt{\sigma_{1,S}} \sqrt{E' - f_1} \\ &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{\hbar \omega \frac{m a^2 \pi^2}{4}} \sqrt{x_1^2} \sqrt{E' - \frac{1}{2} x_1^2} \\ &= \sqrt{2} \cdot \pi x_1 \sqrt{E' - \frac{1}{2} x_1^2}. \end{aligned} \quad (7.5)$$

7.1.2 Zigzagbaner

For zigzagbaner har vi:

$$x = \begin{cases} 2x_1\tau, & \tau \in [0, 1/2] \\ 2x_1(1-\tau), & \tau \in [1/2, 1] \end{cases} \quad (7.6)$$

dermed bliver potentialet:

$$\phi(x) = x^2 = \begin{cases} 4x_1^2\tau^2, \tau \in [0, 1/2] \\ 4x_1^2[1 + \tau^2 - 2\tau], \tau \in [1/2, 1] \end{cases} \quad (7.7)$$

så virkningen af potentialet bliver:

$$\begin{aligned} f_1 &= 4x_1^2 \left[\int_0^{1/2} \tau^2 d\tau + \int_{1/2}^1 (1 + \tau^2 - 2\tau) d\tau \right] \\ &= \frac{1}{3}x_1^2. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Domænet bliver så:

$$-\sqrt{3E'} \leq x_1 \leq \sqrt{3E'}, \quad (7.9)$$

og z er givet som:

$$\begin{aligned} z &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{U_0\beta} \sqrt{\sigma_{1,L}} \sqrt{E' - f_1} \\ &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{\hbar\omega m a^2} \sqrt{2x_1^2} \sqrt{E' - f_1} \\ &= 4x_1 \sqrt{E' - f_1}. \end{aligned} \quad (7.10)$$

7.2 n lige, $n > 1$, x_0 droppes

For lige n kan vi som før set benytte formel (5.28).

Herefter mangler vi blot at finde henholdsvis z og integrations domænet, D . D er defineret ved formel (5.27).

7.2.1 Sinusbaner

For at finde D skal vi først finde potentialet. Potentialet afhænger af banetypen. For sinusbaner fås et udtryk for potentialet ud fra formel (4.20):

$$x(\tau) = \sum_{j=1}^n x_j \sin(\pi j \tau). \quad (7.11)$$

Virkningen af potentialet for sinusbaner bliver da:

$$\begin{aligned} f_n(x_1, x_2) &= \int_0^1 d\tau x^2(\tau) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n x_j^2. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Domænet bliver da:

$$E' \geq \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n x_j^2. \quad (7.13)$$

Det ville ikke være noget problem at bestemme hvorledes domænet kommer til at se ud, men problemet er at den første variabel kommer til at afhænge af den

anden. Dette gør den numeriske udregning besværlig; specielt for højere n hvor det rent praktisk bliver næsten umuligt at udregne.

For højere dimensioner benyttes i stedet Monte Carlo simuleringer. Så tricket er nu at indhylde vores integrationsdomæne i et større domæne D' der ikke har koblingen mellem variablene. Som D' vælger vi blot det største domæne der kan være relevant. D' er domænet afgrænset af følgende:

$$-\sqrt{2E'} \leq x_i \leq \sqrt{2E'}, i = \{1, 2, 3, \dots\}. \quad (7.14)$$

z findes for sinusbaner: Vi har det generelle udtryk fra formel (5.18):

$$\begin{aligned} z &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{U_0 \beta_S \sigma_n} \sqrt{E' - f_n} \\ &= \sqrt{2\pi} \sqrt{\sum_{j=1}^n j^2 x_j^2} \sqrt{E' - \frac{1}{2} \left[\sum_{j=1}^n x_j^2 \right]}. \end{aligned} \quad (7.15)$$

7.2.2 Zigzagbaner

Til zigzagbaner benyttes at

$$x(\tau) = x_i + (x_{i+1} - x_i) \frac{(\tau - \tau_i)}{\epsilon}, \tau \in [\tau_i, \tau_{i+1}] \quad (7.16)$$

$$= x_i + (x_{i+1} - x_i) ((n+1)\tau - i), \tau \in \left[\frac{i}{n+1}, \frac{i+1}{n+1} \right], \quad (7.17)$$

dermed bliver potentialet:

$$\begin{aligned} x^2 &= x_i^2 + (x_{i+1}^2 - x_i^2) [(n+1)^2 \tau^2 + i^2 - 2(n+1)i\tau] \\ &\quad + 2x_i(x_{i+1} - x_i) [(n+1)\tau - i], \tau \in \left[\frac{i}{n+1}, \frac{i+1}{n+1} \right]. \end{aligned} \quad (7.18)$$

Virkningen af potentialet splittes op i stykker af lige baner. Virkningen af en lige bane bliver da:

$$\begin{aligned} \int_{\frac{i}{n+1}}^{\frac{i+1}{n+1}} d\tau x^2 &= \frac{x_i^2}{n+1} + (x_{i+1} - x_i)^2 \left[\frac{(i+1)^3 - i^3}{3(n+1)} + \frac{i^2}{n+1} - i \frac{(i+1)^2 - i^2}{n+1} \right] \\ &\quad + 2x_i(x_{i+1} - x_i) \left[\frac{(i+1)^2 - i^2}{2(n+1)} - \frac{j}{n+1} \right]. \end{aligned} \quad (7.19)$$

Ovenstående virkning kunne findes analytisk fordi potentialet var specielt simpelt. Men uanset om virkningen skal findes analytisk eller numerisk er det vigtigt at bemærke at man kun behøver at finde den en gang. Det er altså ikke noget der skal udregnes hver gang man kører et loop i sin Monte Carlo simulering.

Det næste problem er at bestemme det tilhørende domæne. Desværre er det et problem. Domænet, D , har det problem at maksimum for en variabel afhænger af andre variable. For sinusbaner løste vi dette problem ved at finde et større domæne som variablene altid ville ligge indenfor uafhængigt af hinanden. Desværre har det ikke vist sig nogen nem opgave at finde et tilsvarende domæne for zigzagbanerne. I stedet har jeg benyttet et tilpas stort domæne og derefter

checket at det rent faktisk var stort nok ved at gøre det endnu større og se om grafen ændres.

Endelig skal z bestemmes:

$$z = \frac{2}{\hbar} \sqrt{U_0 \beta_L \sigma_n} \sqrt{E' - f_n} \quad (7.20)$$

$$z = 2\sqrt{n+1} \sqrt{\sigma_n} \sqrt{E' - f_n}. \quad (7.21)$$

8 Konklusion og perspektivering

Opgaven startede ud med en introduktion til Feynmans pathintegral. Jeg synes at introduktionen formåede at sætte fysikken og den geometriske intuitive forståelse i fokus. Næste skridt var at relatere pathintegralet til kvantemekanikken. Denne relation er af afgørende betydning da den betyder at jeg herefter frit kan benytte resultater fra kvantemekanikken. Indtil dette punkt vil indholdet af opgaven mere eller mindre være at finde i enhver introduktion til pathintegralet. Alligevel synes jeg dog at jeg har formået at skrive det på min egen måde og med fokus på de steder jeg synes var relevant, både for den generelle forståelse, men også for forståelse af resten af opgaven. I den næste del af opgaven startede jeg med at regne nogle simple specifikke eksempler. Disse eksempler blev valgt således at de var så relevante som muligt for den efterfølgende del af opgaven. Jeg synes selv eksemplerne gav et godt indblik i hvorledes pathintegralformalismen bruges på specifikke systemer.

Jeg gik herefter videre til et mere kompliceret eksempel. I eksemplet fandt jeg en relation mellem propagatoren og energiniveauerne for et generelt kvantemekanisk system med stedafhængigt potentiale. Udregningen var lang og besværlig og det samme var udtrykkene der blev regnet på. Jeg fandt det derfor nødvendigt gentagende gange at indføre nye variable for at holde fokus på de relevante elementer. Oprindeligt udførte jeg kun udregningen for sinusbaner, dette gjorde det muligt at have en større detaljegråd i nogle af udledningerne, da jeg ikke var bundet til variablerne der både kan repræsentere sinus- og zigzagbaner. Efter længere tids overvejelse konkluderede jeg dog at det var vigtigere at få udregningen for zigzagbaner med end det var udpensle udregningerne for sinusbaner yderligere.

Herefter blev metoden testet på et specifikt potential. Potentialet skulle opfylde visse krav: Det skulle være et potential hvor energiniveauerne var kendt eksakt på forhånd. Bølgefunktionerne til de stationære tilstande i potentialet skulle være optimeret til at kunne beskrives ved sinusfunktioner. På den måde håbede jeg at finde en approksimativ øvre grænse på præcisionen af metoden. Hvis præcisionen havde været meget dårlig for lave n , det vil sige konvergensraten var meget lav, så ville der ikke være nogen grund til at teste metoden yderligere, da andre metoder da ville være klart at foretrække. Dette var dog ikke tilfældet i stedet fandt vi en meget høj præcision. Denne høje præcision betyder at metoden er en mulig kandidat til numerisk at beregne energiniveauerne for mere komplicerede potentialer. Det er ærgeligt at den generelle metode hvor der integreres over x_0 giver ubrugelige resultater for lave n samtidig med at hele udregningen bliver så meget mere besværlig og regnetung at selv en udregning for den laveste orden $n = 1$ med en fornuftig opløsning kommer til at tage en betragtelig tid.

Det kunne være interessant at teste simuleringen på andre mindre ideelle potentialer og se hvorledes præcisionen ville være disse. En anden ting der kunne være interessant ville være at beholde integralet over x_0 og teste om andre potentialer ligeledes giver dårlige resultater for lave n .

9 Appendix

9.1 Længere udregninger fra opgaven

I dette afsnit vises de udregninger der var for lange og besværlige til at have med i selve opgaven.

9.1.1 (4.22-4.23) - Virkning for fri partikel ved sinusbaner

Udregningen der laves her er knyttet til afsnit 4.2 hvor normaliseringsfaktoren for sinusbaner findes.

Vi starter ud med virkningen som angivet i formel (4.22):

$$S = \frac{m}{2} \int_0^T \left[\dot{x}_0 + \frac{\pi}{T} \sum_{j=1}^n x_j j \cos\left(\frac{\pi j t}{T}\right) \right]^2 dt. \quad (9.1)$$

Ved første ekspansion fås:

$$S = \frac{m}{2} \int_0^T \left\{ \dot{x}_0^2 + \left[\frac{\pi}{T} \sum_{j=1}^n x_j j \cos\left(\frac{\pi j t}{T}\right) \right]^2 + 2\dot{x}_0 \frac{\pi}{T} \sum_{j=1}^n x_j j \cos\left(\frac{\pi j t}{T}\right) \right\} dt.$$

Vi bemærker at \dot{x}_0 er uafhængig af t , dermed fås:

$$S = \frac{m}{2} \left\{ \dot{x}_0^2 T + \int_0^T \left[\frac{\pi}{T} \sum_{j=1}^n x_j j \cos\left(\frac{\pi j t}{T}\right) \right]^2 dt + 2\dot{x}_0 \frac{\pi}{T} \sum_{j=1}^n x_j j \int_0^T \cos\left(\frac{\pi j t}{T}\right) dt \right\}.$$

Det sidste led giver trivielt 0. Dermed fås:

$$S = \frac{m}{2} \left\{ \dot{x}_0^2 T + \int_0^T \left[\frac{\pi}{T} \sum_{j=1}^n x_j j \cos\left(\frac{\pi j t}{T}\right) \right]^2 dt \right\}.$$

Ved at hive summen udenfor fås:

$$S = \frac{m}{2} \left\{ \dot{x}_0^2 T + \frac{\pi^2}{T^2} \left[\sum_{j=1}^n \int_0^T \left[x_j j \cos\left(\frac{\pi j t}{T}\right) \right]^2 dt + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1, i \neq j}^n x_i x_j i j \int_0^T \cos\left(\frac{\pi i t}{T}\right) \cos\left(\frac{\pi j t}{T}\right) dt \right] \right\}.$$

Produktet af cosinus funktioner giver nul under integration.

$$\begin{aligned}
S &= \frac{m}{2} \left\{ \dot{x}_0^2 T + \frac{\pi^2}{T^2} \sum_{j=1}^n x_j^2 j^2 \int_0^T \cos^2 \left(\frac{\pi j t}{T} \right) dt \right\} \\
&= \frac{m}{2} \left\{ \dot{x}_0^2 T + \frac{\pi^2}{2T} \sum_{j=1}^n x_j^2 j^2 \right\} \\
&= \frac{m}{2T} \left\{ (x_b - x_a)^2 + \frac{\pi^2}{2} \sum_{j=1}^n x_j^2 j^2 \right\}.
\end{aligned}$$

Herved viser vi at formel (4.22) fører til formel (4.23).

9.1.2 (5.16-5.17) - Integralrepræsentation af Hankelfunktion

I det følgende vises hvorledes man kommer fra formel (5.16) til formel (5.17).

Fra [8, s. 956] har vi følgende integralrepræsentation af Hankelfunktionen:

$$H_\nu^{(1)}(xz) = -\frac{i}{\pi} \exp \left\{ -\frac{1}{2} i \nu \pi \right\} z^\nu \int_0^\infty \exp \left\{ \frac{1}{2} i x \left(t + \frac{z^2}{t} \right) \right\} t^{-\nu-1} dt, \quad (9.2)$$

hvor $0 < \arg z < \frac{\pi}{2}$, $x > 0$ og $-1 < \operatorname{Re} \nu$; eller $\arg z = \frac{\pi}{2}$, $x > 0$ og $-1 < \operatorname{Re} \nu < 1$

Dette bruges til udregning af integralet i ligning (5.16) der er givet som:

$$\begin{aligned}
G_n(x, E) &= a^n C_n \mathbb{R} \left\{ \int_{-\infty}^\infty \prod_{j=0}^n dx_j \int_0^\infty dT (iT)^{-(n+1)/2} \right. \\
&\quad \left. \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\beta \sigma_n}{T} - U_0 T f_n + ET \right] \right\} \right\} \quad (9.3)
\end{aligned}$$

$$= \alpha_n \int_0^\infty dT T^{-(n+1)/2} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\beta \sigma_n}{T} - U_0 f_n T + ET \right) \right\} \quad (9.4)$$

$$= \alpha_n \int_0^\infty dT T^{-(n+1)/2} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\frac{a}{T} + bT \right) \right\}, \quad (9.5)$$

hvor

$$\alpha_n = a^n C_n \mathbb{R} \left\{ \int_{-\infty}^\infty \prod_{j=0}^n dx_j i^{-(n+1)/2} \right\}, \quad a = \beta \sigma_n, \quad b = E - U_0 f_n. \quad (9.6)$$

Ved at sammenligne potensen af integrationsvariablen i henholdsvis (9.5) og (9.2) fås:

$$-\nu - 1 = -(n+1)/2 \quad (9.7)$$

$$\Rightarrow \nu = \frac{n-1}{2}. \quad (9.8)$$

Tilsvarende sammenlignes udtrykkene i de respektive eksponentialfunktioner:

$$\frac{i}{\hbar}\left(\frac{a}{t} + bt\right) = \frac{1}{2}ix \left(t + \frac{z^2}{t}\right) \quad (9.9)$$

$$\Rightarrow x = \frac{2b}{\hbar} \quad (9.10)$$

$$\Rightarrow z = \pm\sqrt{\frac{a}{b}}, \quad (9.11)$$

men da $0 < \arg z \leq \pi/2$ duer kun den positive løsning. Ved at indsætte de fundne værdier for ν, x og z i (9.2) fås

$$H_{(n-1)/2}^{(1)}\left(\frac{2}{\hbar}\sqrt{ab}\right) = -\frac{i}{\pi} \exp\left\{-\frac{1}{4}i(n-1)\pi\right\} \left(\frac{a}{b}\right)^{(n-1)/4} \int_0^\infty \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(bt + \frac{a}{t}\right)\right\} t^{-(n+1)/2} dt, \quad (9.12)$$

dermed fås ved lidt omskrivning at

$$G_n(x, E) = \alpha_n \int_0^\infty \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(bt + \frac{a}{T}\right)\right\} T^{-(n+1)/2} dT \quad (9.13)$$

$$= \alpha_n i\pi H_{(n-1)/2}^{(1)}\left(\frac{2}{\hbar}\sqrt{ab}\right) \exp\left\{\frac{1}{4}i(n-1)\pi\right\} \left(\frac{b}{a}\right)^{(n-1)/4}. \quad (9.14)$$

For at gøre det mere overskueligt indføres nye variable:

$$z = \frac{2}{\hbar}\sqrt{ab} \quad (9.15)$$

$$= \frac{2}{\hbar}\sqrt{\beta\sigma_n(E - U_0 f_n)} \quad (9.16)$$

$$= \left(\frac{2}{\hbar}\sqrt{\beta U_0}\right) \sqrt{\sigma_n[E' - f_n]}, \quad (9.17)$$

hvor $E' = E/U_0$.

Tilsvarende ser vi på:

$$\left(\frac{b}{a}\right)^{(n-1)/4} = \left(\frac{\hbar^2 z^2}{4a^2}\right)^{(n-1)/4} \quad (9.18)$$

$$= \left(\frac{\hbar z}{2a}\right)^{(n-1)/2} \quad (9.19)$$

$$= \left(\frac{z}{\sigma_n}\right)^{(n-1)/2} \left(\frac{\hbar}{2\beta}\right)^{(n-1)/2}. \quad (9.20)$$

Ved indsættelse af de nye variable fås:

$$G_n(x, E') = \alpha_n i\pi \exp\left\{\frac{1}{4}i(n-1)\pi\right\} \left(\frac{\hbar}{2\beta}\right)^{(n-1)/2} \cdot H_{(n-1)/2}^{(1)}(z) \left(\frac{z}{\sigma_n}\right)^{(n-1)/2} \\ = a^n C_n \mathbb{R} \left\{ \int_{-\infty}^\infty \prod_{j=0}^n dx_j i^{(1-n)/2} \pi \exp\left\{\frac{1}{4}i(n-1)\pi\right\} \right. \quad (9.21) \\ \left. \left(\frac{\hbar}{2\beta}\right)^{(n-1)/2} \cdot H_{(n-1)/2}^{(1)}(z) \left(\frac{z}{\sigma_n}\right)^{(n-1)/2} \right\}.$$

Vi indfører nu en ny konstant, B_n , desuden udnyttes at:

$$\exp\left\{-\frac{1}{4}i(n-1)\pi\right\} = i^{(1-n)/2}, \quad (9.22)$$

dermed fås:

$$\begin{aligned} G_n(x, E') &= i^{(1-n)/2} \exp\left\{\frac{1}{4}i(n-1)\pi\right\} B_n \mathbb{R} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=0}^n dx_j H_{(n-1)/2}^{(1)}(z) \left(\frac{z}{\sigma_n}\right)^{(n-1)/2} \right\} \\ &= B_n \mathbb{R} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=0}^n dx_j H_{(n-1)/2}^{(1)}(z) \left(\frac{z}{\sigma_n}\right)^{(n-1)/2} \right\}. \end{aligned} \quad (9.23)$$

Den nye konstant er givet som $B_n = \pi a^n C_n \left(\frac{\hbar}{2\beta}\right)^{(n-1)/2}$.

9.2 Matlab kode

I det følgende er vedlagt den Matlab kode jeg benyttede i mine simuleringer.

9.2.1 $n = 1$, x_0 droppet

```
clear all, clc, close all
hold on
E_max=10 %den maximale energi der beregnes
Antal_punkter=1000 %antal punkter der skal plottes
R_S=[0]
R_Z=[0]
for E=linspace(0,E_max,Antal_punkter)
    R_S=[R_S real(quadgk(@(x_1)besselj(0,sqrt(2)*pi*x_1...
        .*sqrt(E-1/2.*x_1.^2)),-sqrt(2.*E),sqrt(2.*E)))];
    R_Z=[R_L real(quadgk(@(x_1)besselj(0,4*x_1.*sqrt(E-...
        1/3.*x_1.^2)),-sqrt(3.*E),sqrt(3.*E)))];
end
plot(linspace(0,E_max,Antal_punkter),R_S([2:end]));
plot(linspace(0,E_max,Antal_punkter),R_Z([2:end]),'b--');
```

9.2.2 Zigzagbaner, $n = 2$, x_0 droppet

```
clear all, close all, clc
hold on
Nrand = 1000000; %antal tilfældige punkter der benyttes
E_max=10 %den maximale energi der beregnes
Antal_punkter=600 %antal punkter der skal plottes
R=[0];
for E=linspace(0,E_max,Antal_punkter)
    totalvalue=0;
    normaliseringsfaktor=0;
    for nloops=1:Nrand
        X_1 = (rand*2-1)*sqrt(2*E);
        X_2 = (rand*2-1)*sqrt(2*E);
```

```

f_2=4/9*X_1^2+1/9*(X_2-X_1)^2+1/3*X_1*(X_2-X_1)+1/9*X_2^2;
D=E-f_2;
sigma=X_1^2+(X_2-X_1)^2+X_2^2;
if D <= 0
    B=0;
else
    z=2*sqrt(3)*sqrt(sigma)*sqrt(D);
    normaliseringsfaktor=normaliseringsfaktor+1;
    B=sqrt(2/pi)*sin(z)/sqrt(sigma);
end
totalvalue=totalvalue+B;
end
meanvalue=totalvalue/(normaliseringsfaktor+eps);
R=[R meanvalue*sqrt(2*E).^2*(normaliseringsfaktor/Nrand)];
end
plot(linspace(0,E_max,Antal_punkter),R([2:end]))

```

9.2.3 Sinusbaner, $n = 2$, x_0 droppet

```

clear all, close all, clc
hold on
Nrand = 1000000;
E_max=10
Antal_punkter=600
R=[0];
for E=linspace(0,E_max,Antal_punkter)
    totalvalue=0;
    normaliseringsfaktor=0;
    for nloops=1:Nrand
        X_1 = (rand*2-1)*sqrt(2*E);
        X_2 = (rand*2-1)*sqrt(2*E);
f_2=1/2*(X_1^2+X_2^2)
        D=E-f_2;
        sigma=X_1^2+4*X_2^2;
        if D <= 0 %tester om punktet ligger i domænet
            B=0;
        else
            z=sqrt(2)*pi*sqrt(sigma)*sqrt(D);
            normaliseringsfaktor=normaliseringsfaktor+1;
            B=sqrt(2/pi)*sin(z)/sqrt(sigma);
        end
        totalvalue=totalvalue+B;
    end
    meanvalue=totalvalue/(normaliseringsfaktor+eps);
    R=[R meanvalue*sqrt(2*E).^2*(normaliseringsfaktor/Nrand)];
end
plot(linspace(0,E_max,Antal_punkter),R([2:end]));

```

9.2.4 Sinusbaner, $n = 4$, x_0 droppet

```
clear all, close all, clc
hold on
Nrand = 1000000;
E_max=10;
Antal_punkter=600;
R=[0];
for E=linspace(0,E_max,Antal_punkter)
    totalvalue=0;
    normaliseringsfaktor=0;
    for nloops=1:Nrand
        X_1 = (rand*2-1)*sqrt(2*E);
        X_2 = (rand*2-1)*sqrt(2*E);
        X_3 = (rand*2-1)*sqrt(2*E);
        X_4 = (rand*2-1)*sqrt(2*E);
        f_4=1/2*(X_1^2+X_2^2+X_3^2+X_4^2);
        D=E-f_4;
        sigma=X_1^2+4*X_2^2+9*X_3^2+16*X_4^2;
        if D <= 0
            B=0;
        else
            z=sqrt(2)*pi*sqrt(sigma)*sqrt(D);
            normaliseringsfaktor=normaliseringsfaktor+1;
            B=sqrt(2/pi)*(sin(z)-z*cos(z))/sigma^(3/2);
        end
        totalvalue=totalvalue+B;
    end
    meanvalue=totalvalue/(normaliseringsfaktor+eps);
    R=[R meanvalue*sqrt(2*E).^4*(normaliseringsfaktor/Nrand)];
end
plot(linspace(0,E_max,Antal_punkter),R([2:end]));
```

Litteratur

- [1] Weber Hans J. Arfken George B. *Mathematical Method for Physicists*. Elsevier Academic Press, 30 Corporate Drove, Suite 400, Burlington, MA 01803, USA, 2005.
- [2] S. I. Blinnikov og N. V. Nikitin. *Approximations to path integrals and spectra of quantum systems*, 2003.
- [3] A. Bogojevic, A. Balaz og A. Belic. Jaggedness of path integral trajectories. *Physics Letters A*, 345(4-6):258 - 264, 2005.
- [4] A. Dullweber, E. R. Hilf og E. Mendel. Simple quantum mechanical phenomena and the feynman real time path integral. 1995.
- [5] R. P. Feynman. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, 20(2):367-387, Apr 1948.
- [6] Hibbs A.R. Feynman R.P. *Quantum mechanics and path integrals*. McGraw-Hill, Inc., New York, 1965.
- [7] Roepstorff Gert. *Path Integral Approach to Quantum Physics*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1994.
- [8] I. M. Ryzhik I. S. Gradshteyn. *Table of Integrals, Series, and Products, Fourth Edition*. Academic Press Inc., 111 Fifth Avenue, New York, New York, 1965.
- [9] Sakurai J. J. *Modern Quantum Mechanics*. Addison Wesley Longman, Reading, Massachusetts, 1994.
- [10] Bhagwat K. V. Khandekar D. C. Lawande S. V. *Path-integral Methods and their Applications*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., P O box 128, Farrer Road, Singapore 9128, 1993.
- [11] Rudolf Schürer. Adaptive quasi-monte carlo integration based on miser and vegas.
- [12] Murray R. Spiegel. *Mathematical Handbook of Formulas and Tables 2 edition*. McGraw-Hill, 1998.
- [13] John R. Taylor. *Classical Mechanics*. University Science Books, 2005.