

Semiklassische Betrachtung von zwei Bosonen auf einer Linie mit Kontaktwechselwirkung



Zulassungsarbeit

von
Benjamin Geiger
aus
Regensburg

vorgelegt am: 22. Juli 2014

durchgeführt am
Institut I für theoretische Physik
der Universität Regensburg

unter Anleitung von
Prof. Dr. Klaus Richter

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	5
2. Vorbereitende Konzepte	7
2.1. Notation und Konventionen	7
2.2. Propagator und Zustandsdichte	7
2.3. Semiklassische Zustandsdichte	9
2.4. Freier Propagator und Randkorrekturen	10
2.5. Vielteilchen-Propagator	12
2.6. Lokale Zustandsdichte für eindimensionale Systeme	14
3. Herleitung des Propagators für ein Deltapotential	17
3.1. Exakte Lösungen für den Potentialtopf mit Delta-Barriere	17
3.2. Propagator für eine Delta-Barriere	19
4. Zustandsdichte in einer Dimension mit Kontaktwechselwirkung	25
4.1. Herleitung der Zustandsdichte	25
4.2. Grenzfälle	27
4.3. Vergleich mit der quantenmechanischen Zustandsdichte	28
5. Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie mit Kontaktwechselwirkung	31
5.1. Zustandsdichte mit Randkorrekturen	31
5.2. Korrekturen von den Ecken	33
5.3. Zusammenfassung und Analyse	42
5.4. Vergleich mit den quantenmechanischen Lösungen	44
6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie	51
6.1. Quantenmechanische lokale Zustandsdichte	51
6.2. Semiklassische lokale Zustandsdichte	53
6.3. Verhalten in der Nähe des Randes	65
6.4. Vergleich der Ergebnisse	67
7. Ausblick	71
A. Anhang	73
A.1. Umformung des Produkts aus Wellenfunktionen	73
A.2. Numerische Berechnung der Wellenzahlen	74
A.3. Bestimmung der Differentialgleichungen bei der lokalen Zustandsdichte . .	74
A.4. Laplace-Transformation	77

1. Einleitung

Anfang des vergangenen Jahrhunderts führten neue experimentelle Ergebnisse wie z.B. die diskreten Absorptions- bzw. Emissionsspektren bei Atomen und der bei elektromagnetischen Wellen festgestellte Teilchencharakter zu Unstimmigkeiten mit den bis dahin etablierten Theorien. Die aus der darauffolgenden Suche nach neuen Theorien hervorgegangene Quantenmechanik und die auf ihr aufbauenden Theorien bilden bis heute die am besten bestätigten physikalischen Theorien und sind dementsprechend der Hauptbestandteil der modernen Physik. Allerdings sind diese Theorien um ein vielfaches komplizierter als die klassischen Theorien und können selbst für vergleichsweise einfache physikalische Systeme oft nur mit Hilfe numerischer Methoden überprüfbare Vorhersagen treffen. Da die Quantenmechanik in makroskopischen Dimensionen die gleichen Vorhersagen macht wie die newtonsche Theorie, müssen sich klassische Trajektorien in irgendeiner Weise auch in den quantenmechanischen Ergebnissen widerspiegeln. Die semiklassische Physik ist im Übergang zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik angesiedelt und liefert einerseits analytische Näherungen für die exakten quantenmechanischen Lösungen und andererseits Interpretationsmöglichkeiten der gefundenen Lösungen in diesem Kontext. Vor allem bei Systemen, die sich klassisch chaotisch verhalten und quantenmechanisch nicht exakt lösbar sind, liefert der semiklassische Ansatz gute Ergebnisse. Gutzwiller [3] stellte 1971 mit seiner Spurformel eine Möglichkeit vor, die quantenmechanische Zustandsdichte eines solchen Systems allein mit Hilfe der Eigenschaften der klassisch erlaubten periodischen Trajektorien zu approximieren. Balian und Bloch [5] leiteten mit semiklassischen Methoden kurz später eine sehr einfache Entwicklung des nicht oszillierenden Teils der Zustandsdichte in Potenzen der Energie her und verallgemeinerten damit die schon viel früher von Weyl [15] aufgestellte (und nach ihm benannte) Entwicklung.

Eine der größten Herausforderungen in der aktuellen Forschung bildet die Einbeziehung der Wechselwirkung in Systemen aus mehreren Teilchen. Für relativistische Streuprozesse liefert die Quantenelektrodynamik gute Ergebnisse, während im nichtrelativistischen Fall die Bornsche Näherung verwendet werden kann (in beiden Fällen handelt es sich um Störungstheorien). Für nichtrelativistische wechselwirkende Teilchen in einem begrenzten Gebiet können diese jedoch in der Regel zu keinem Zeitpunkt als unabhängig betrachtet werden. Für einzelne Atome wurde sehr früh von Thomas und Fermi eine Näherungslösung vorgeschlagen, die für hohe Kernladungszahlen qualitativ gute Ergebnisse liefert. Später konnten mit Hilfe der Hartree-Fock Näherung die wichtigsten Eigenschaften von Atomen sehr gut beschrieben werden. Für fermionische oder bosonische Gase gibt es ebenfalls zahlreiche Ansätze, jedoch verkompliziert die Einbeziehung der Wechselwirkung in jedem Fall die Rechnungen. Ist man lediglich an der mittleren Zustandsdichte eines solchen Gases interessiert, könnte die semiklassische Physik wie im nichtwechselwirkenden Fall möglicherweise einfache, universelle und analytisch erfassbare Ergebnisse liefern. Q. Hummel [6] stellte dazu 2014 einen Formalismus zur semiklassischen Berechnung der Zustandsdichte für beliebig viele Fermionen bzw. Bosonen vor, die sich in einem begrenzten Volumen beliebiger Dimension befinden und nicht miteinander wechselwirken. Der Formalismus berücksichtigt dabei bereits die quantenmechanische

1. Einleitung

Ununterscheidbarkeit der Teilchen.

Um diesen Formalismus auf wechselwirkende Systeme zu erweitern, ist es sinnvoll, zuerst den einfachsten Fall eines Systems aus zwei Teilchen in einem eindimensionalen Volumen (d.h. auf einer begrenzten Linie) zu betrachten. Diese Arbeit beschäftigt sich deshalb mit einem System aus zwei Bosonen auf einer Strecke der Länge L , die einer Kontaktwechselwirkung in Form eines Delta-Potentials $V(q_1, q_2) = \alpha\delta(q_1 - q_2)$ unterliegen. Dieses kann als Grenzfall eines sehr kurzreichweitigen Potentials aufgefasst werden, was für hohe Teilchenenergien eine physikalisch sinnvolle Näherung darstellt. Neben der Vereinfachung der Rechnungen hat dieses Potential den folgenden Vorteil: ein System aus beliebig vielen Bosonen auf einer Linie mit einer δ -artigen Wechselwirkung kann quantenmechanisch exakt gelöst werden [7] und lässt deshalb einen einfachen Vergleich der semiklassischen Näherungen mit dem quantenmechanischen Ergebnis zu.

Im ersten Abschnitt der Arbeit werden die grundlegenden mathematischen und physikalischen Konzepte vorgestellt, die zur Berechnung der Zustandsdichte für das System aus zwei Bosonen benötigt werden. Der darauffolgende Abschnitt beschäftigt sich mit der Herleitung des eindimensionalen Propagators für ein Delta-Potential und verallgemeinert das bereits von Manoukian gefundene Ergebnis [8]. Um die grundlegenden Eigenschaften dieses Ergebnisses zu ergründen schließt sich eine kurze Betrachtung eines Einteilchenproblems unter der Verwendung des hergeleiteten Propagators an. Dabei wird auch die Formulierung der Wechselwirkung als gemischte Randbedingung hervorgehoben, was die Rechnungen in den darauf folgenden Abschnitten vereinfacht.

Der nächste Abschnitt befasst sich in aller Ausführlichkeit mit der Zustandsdichte für das System aus zwei wechselwirkenden Bosonen. Dabei wird zuerst die Weyl-Entwicklung bis zur Ordnung $E^{-\frac{1}{2}}$ berechnet. Die Rechnungen und das Ergebnis sind dabei sehr überschaubar und lassen hoffen, dass für höhere Teilchenzahlen keine weiteren Korrekturen verwendet werden müssen. Diese Korrekturen werden im Anschluss berechnet und analysiert. Im Vergleich mit den exakten quantenmechanischen Lösungen wird dann ersichtlich, dass die höheren Korrekturen im Allgemeinen vernachlässigbar sind bzw. durch einfachere Ausdrücke ersetzt werden können.

Im letzten Abschnitt wird die lokale Zustandsdichte und die Teilchendichte für das System berechnet und mit den quantenmechanischen Ergebnissen verglichen. Dieser Abschnitt gestaltet sich sehr technisch und zeigt, dass auch für das vergleichsweise einfache System aus zwei wechselwirkenden Bosonen die lokalen Eigenschaften semiklassisch beschrieben werden können, der dazu benötigte Aufwand im Vergleich jedoch sehr hoch ist. In einem Unterabschnitt wird das Verhalten in unmittelbarer Nähe des Randes aus der Potenzreihenentwicklung der lokalen Zustandsdichte gewonnen. Dieses liefert ein sehr einfaches Ergebnis, das die Wechselwirkung in einfacher Form widerspiegelt.

2. Vorbereitende Konzepte

2.1. Notation und Konventionen

- Vektoren werden in dieser Arbeit im Vergleich zu skalaren Größen als aufrecht stehende, fett gedruckte Buchstaben gekennzeichnet. Beispiel: x, t, β sind Skalare, \mathbf{x} ist ein Vektor.
- Die auftretenden Funktionen hängen oft von mehreren Variablen ab. Falls die Abhängigkeit von einer bestimmten Variable in einem gegebenen Zusammenhang nicht relevant ist, so wird diese oft weggelassen, um die Notation zu vereinfachen.
- Treten in einer Formel die Koordinaten q_1 und q_2 auf, so sind damit immer die physikalischen Koordinaten gemeint (die Umkehrung gilt nicht).

2.2. Propagator und Zustandsdichte

Der Propagator eines quantenmechanischen Systems ist definiert als [3]

$$K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) := \langle \mathbf{x}' | \hat{U}(t) | \mathbf{x} \rangle, \quad (1)$$

mit dem Zeitenwicklungs-Operator $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$. Der Propagator entspricht einer Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, ein Teilchen, das sich zum Zeitpunkt 0 am Ort \mathbf{x} befand, nach der Zeit t am Ort \mathbf{x}' zu finden. Per Definition erfüllt der Propagator für $t \neq 0$ die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = \hat{H}_{\mathbf{x}} K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) \quad (2)$$

und für $t = 0$ gilt $K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, 0) = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$.

Sind die stationären Lösungen des Systems bekannt, so gilt¹

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\psi_n\rangle \langle \psi_n|. \quad (3)$$

Sei Ω der Konfigurationsraum des Systems und $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \Omega$. Der Propagator kann dann mit $\langle \mathbf{x} | \psi_n \rangle = \psi_n(\mathbf{x})$ als

$$K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n^*(\mathbf{x}') \psi_n(\mathbf{x}) \quad (4)$$

geschrieben werden. Die Spur des Propagators für ein System mit Konfigurationsraum Ω wird definiert als

$$\text{Tr} K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) := \int_{\Omega} d\mathbf{x} K(\mathbf{x}, \mathbf{x}, t),$$

und entspricht der Spur des Zeitentwicklungs-Operators.

¹Für ein kontinuierliches Spektrum muss die Summe durch ein Integral ersetzt werden.

2. Vorbereitende Konzepte

Die exakte Zustandsdichte für ein System mit diskreten Eigenenergien E_n ist gegeben durch $\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$ und gibt über das Integral

$$\int_{E_0}^{E_0+\Delta E} dE \rho(E) \quad (5)$$

die Anzahl der Zustände mit einer Energie im Intervall $[E_0, E_0+\Delta E]$ an. Die Zählfunktion wird deshalb definiert als

$$\mathcal{N}(E) := \int_{-\infty}^E dE' \rho(E'). \quad (6)$$

Sie gibt die Anzahl der Zustände mit einer Energie $E' < E$ an. Die Zählfunktion ist im Vergleich zur Zustandsdichte eine Funktion im klassischen Sinne und wird deshalb für den Vergleich von quantenmechanischer und semiklassischer Zustandsdichte verwendet. Die Zählfunktion für ein System mit diskretem Spektrum ist eine stückweise konstante Funktion

$$\mathcal{N}(E) = \sum_n \Theta(E - E_n) \quad (7)$$

mit der Heaviside-Theta-Funktion $\Theta(E)$.

Mit dem Parameter $\beta = \frac{i}{\hbar}t$ rechnet man²

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_E[\rho(E)](\beta) &= \int_{-\infty}^{\infty} dE \rho(E) e^{-\beta E} = \sum_n e^{-\beta E_n} \\ &= \sum_n e^{-\beta E_n} \int_{\Omega} d\mathbf{x} \psi_n^*(\mathbf{x}) \psi_n(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\Omega} d\mathbf{x} \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n^*(\mathbf{x}) \psi_n(\mathbf{x}) \\ &= \text{Tr } K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t), \end{aligned}$$

wobei $\mathcal{L}_E[f(E)](\beta)$ die beidseitige Laplace-Transformation von $f(E)$ mit dem Parameter β ist. Die Zustandsdichte entspricht also der invers Laplace-Transformierten der Spur des Propagators:

$$\rho(E) = \mathcal{L}_{\beta}^{-1} \left[\text{Tr } K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) \right] (E). \quad (8)$$

Da die (inverse) Laplace-Transformation linear ist, führt ein Gesamtpropagator der Form $K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = \sum_i \lambda_i K_i(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t)$ zu einer Zustandsdichte der Form $\rho(E) = \sum_i \lambda_i \rho_i(E)$. Das bedeutet, dass jeder Summand im Propagator einzeln betrachtet werden kann.

Für einen Hamilton-Operator der Form $\hat{\mathcal{H}} = \sum_k \hat{\mathcal{H}}_k$ mit $[\hat{\mathcal{H}}_k, \hat{\mathcal{H}}_l] = 0$, können die Lösungen der Schrödingergleichung als Produktzustände der Form $|\psi\rangle = \bigotimes_k |\psi_k\rangle$ geschrieben werden, wobei $|\psi_k\rangle$ eine Lösung der SGL $\hat{\mathcal{H}}_k |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle$ ist. Der Propagator

²In der Rechnung muss angenommen werden, dass $\sum_n e^{-\beta E_n}$ konvergiert. Das ist z.B. für $t=0$ nicht erfüllt. Tatsächlich müsste die Funktionenfolge $\sum_{n \leq N} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n^*(\mathbf{x}) \psi_n(\mathbf{x})$ auf Ω gleichmäßig gegen $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}, t)$ konvergieren.

des Systems ist dann

$$K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x}' | e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_k \hat{H}_k} | \mathbf{x} \rangle = \prod_k \langle \mathbf{x}'_k | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_k} | \mathbf{x}_k \rangle = \prod_k K(\mathbf{x}'_k, \mathbf{x}_k, t)$$

und die Spur des Propagators ist gegeben durch

$$\text{Tr} K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = \prod_k \text{Tr} K(\mathbf{x}'_k, \mathbf{x}_k, t).$$

Hier sind die \mathbf{x}_k Koordinaten in zueinander orthogonalen Unterräumen, die jeweils zu einem der Hamilton-Operatoren in der Ortsdarstellung gehören. Der Propagator für ein System mit unabhängigen orthogonalen Koordinaten kann so zum Beispiel als das Produkt der eindimensionalen Propagatoren geschrieben werden.

2.3. Semiklassische Zustandsdichte

Im semiklassischen Limit wird das Plancksche Wirkungsquantum als klein angesehen, d.h. man betrachtet das asymptotische Verhalten der Quantenmechanik im formalen Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$. Als Beispiel wird hier eine stark verkürzte Darstellung der Herleitung der Gutzwillerschen Spurformel angeführt. Diese richtet sich nach [3] und soll nur die grundsätzlichen Ideen aufzeigen. Der Propagator für ein System kann immer als ein Pfadintegral formuliert werden. Dazu betrachtet man die Propagation eines Teilchens von dem Punkt a zum Punkt b im Konfigurationsraum. Nun wird zuerst ein dritter Punkt c im Konfigurationsraum eingefügt, der bei der Propagation von a nach b passiert wird und anschließend über die Position dieses Punkts integriert. Dieser Vorgang wird formal unendlich oft wiederholt wobei letztendlich über alle möglichen Wege von a nach b integriert werden muss. In den Integralen tritt die klassische Wirkung bzw. die Hamiltonsche Prinzipalfunktion für jeden Weg mit dem Vorfaktor $\frac{1}{\hbar}$ als Phase auf. Da \hbar sehr klein ist, bewirkt eine kleine Änderung der Wirkung bereits starke Oszillationen, die sich im Integral gegenseitig aufheben. Der Wert des Pfadintegrals ist deshalb hauptsächlich von den Pfaden mit stationärer Phase abhängig. Da nach dem Hamiltonschen Prinzip die klassisch erlaubten Trajektorien genau diejenigen mit stationärer Wirkung sind, tragen ebenjene verstärkt zum Wert des Integrals bei. Formal kann deshalb eine Stationäre-Phasen-Näherung im Integral durchgeführt werden, bei der nur die klassisch erlaubten Trajektorien übrig bleiben. Nach weiteren Näherungen bleiben im Zuge der Spurbildung bei einer erneuten Stationären-Phasen-Näherung nur die klassischen geschlossenen Phasenraum-Trajektorien übrig. Die so erhaltene Spurformel ermöglicht es, die quantenmechanische Zustandsdichte nach und nach durch das Hinzunehmen immer längerer periodischer Bahnen zu approximieren. Für die kürzeste im weitesten Sinne periodische Bahn der Länge Null kann die Spurformel nicht benutzt werden, jedoch kann deren Beitrag auch ohne Stationäre-Phasen-Näherung berechnet werden. Insgesamt zeigt sich, dass die semiklassische Zustandsdichte in einen mittleren und in einen oszillierenden Anteil aufgespalten werden kann:

$$\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \rho_{\text{osz}}(E).$$

2. Vorbereitende Konzepte

Dabei kommen die Beiträge zur mittleren Zustandsdichte hauptsächlich von den Bahnen der Länge Null. Diese Arbeit beschäftigt sich ausschließlich mit dieser mittleren Zustandsdichte. Deshalb wird der Überstrich im Rest der Arbeit weggelassen.

2.4. Freier Propagator und Randkorrekturen

Ein Beispiel für ein System mit kontinuierlichem Spektrum ist das freie Teilchen. Der eindimensionale Propagator für ein freies Teilchen ist gegeben durch [3]

$$K_0(x', x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(x'-x)^2}. \quad (9)$$

Für ein Teilchen in einem Gebiet Ω der Dimension D mit dem Kastenpotential $U(\mathbf{x}) = 0$ für $\mathbf{x} \in \Omega$ und $U(\mathbf{x}) = \infty$ für $x \notin \Omega$ kann die Zustandsdichte in erster Näherung mit Hilfe des freien Propagators berechnet werden. Das kann nach [5] wie folgt begründet werden: Das mittlere Verhalten von $\rho(E)$ ist bestimmt durch das Verhalten der Laplace-Transformierten (als Funktion von t) bei kleinen Zeiten. In führender Ordnung ist die Zustandsdichte somit durch das Verhalten des Propagators für kurze Zeiten bestimmt. Aus diesem Grund wird angenommen, dass der Einfluss der Berandung S von Ω nur bei den Punkten in ihrer unmittelbaren Nähe eine Rolle spielt und bei der Propagation im Innern von Ω vernachlässigt werden kann. Deshalb kann dort der freie Propagator verwendet werden, der (in orthogonalen Koordinaten) als das Produkt der eindimensionalen freien Propagatoren geschrieben werden kann. Mit der allgemeinen Identität

$$\mathcal{L}_x[x^{\nu-1}\Theta(x)](\tau) = \int_0^\infty dx x^{\nu-1} e^{-\tau x} = \frac{1}{\tau^\nu} \int_0^\infty dx x^{\nu-1} e^{-x} = \frac{\Gamma(\nu)}{\tau^\nu} \quad (10)$$

für $\text{Re } \tau > 0$ ergibt sich aus dem freien Propagator die Zustandsdichte

$$\begin{aligned} \rho_0(E) &= \mathcal{L}_\beta^{-1} \left[\int_\Omega d\mathbf{x} K_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}, t) \right] (E) \\ &= \mathcal{L}_\beta^{-1} \left[\int_\Omega d\mathbf{x} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{\frac{D}{2}} \right] (E) \\ &= V_\Omega \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{D}{2}} \mathcal{L}_\beta^{-1} \left[\frac{1}{\beta^{\frac{D}{2}}} \right] (E) \\ &= V_\Omega \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{D}{2}} \frac{E^{\frac{D}{2}-1}}{\Gamma(\frac{D}{2})} \Theta(E). \end{aligned}$$

Dabei ist V_Ω das D -dimensionale Volumen des Gebiets Ω und $\Theta(E)$ die Heaviside-Funktion. In führender Ordnung ist die Zustandsdichte eines „freien“ Teilchens in einem begrenzten Gebiet also nur vom Volumen des Gebiets und der Energie E abhängig. In dieser Arbeit sind nur die Fälle $D = 1$ und $D = 2$ relevant:

$$\rho_0(E) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}} & D = 1 \\ \frac{A}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \Theta(E) & D = 2 \end{cases} \quad (11)$$

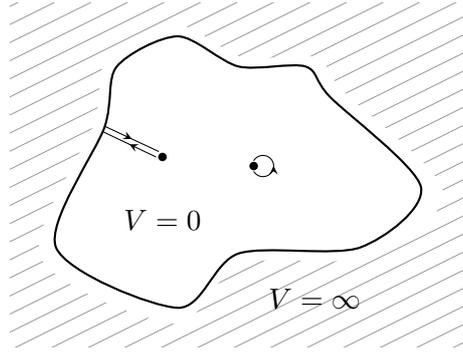


Abbildung 1: Veranschaulichung der für die mittlere Zustandsdichte relevanten Trajektorien. Weit vom Rand entfernt müssen nur die Trajektorien der Länge Null berücksichtigt werden. In unmittelbarer Nähe des Randes kommen Reflexionen dazu.

mit der Länge l bzw. der Fläche A .

Um den Einfluss der Berandung S zu berücksichtigen, kann die Methode der Spiegelbilder verwendet werden [5]. Mit der Annahme, dass die Berandung nur bei Punkten in ihrer unmittelbaren Nähe eine Rolle spielt, kann diese lokal als Ebene genähert werden. In dieser Arbeit sind die physikalischen Begrenzungen tatsächlich durch Punkte oder Strecken gegeben (also Ebenen niedriger Dimension). In dem hier gewählten System muss die Wellenfunktion am Rand verschwinden (Dirichlet-Randbedingung). Das bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit für die Propagation eines Teilchen auf den Rand null ist. Der Propagator muss also zusätzlich zu (2) für $\mathbf{x}_s \in S$ die Bedingung $K(\mathbf{x}_s, \cdot, t) = 0$ erfüllen. Ebenfalls wichtig ist der Fall, dass die Normalenableitung der Wellenfunktion auf dem Rand verschwinden muss (Neumann-Randbedingung). Die Bedingung für den Propagator ist für diesen Fall $\frac{\partial}{\partial n} K(\mathbf{x}, \cdot, t)|_{\mathbf{x}_s} = 0$. Für den eindimensionalen Fall mit einer Dirichlet- (–) bzw. Neumann-Randbedingung (+) bei $x = 0$ erfüllt der Propagator

$$K(x', x, t) = K_0(x', x, t) \pm K_0(-x', x, t) \quad (12)$$

alle geforderten Eigenschaften. Analog muss in höheren Dimensionen der freie Propagator um den an dem entsprechenden Rand gespiegelten Propagator ergänzt werden. Anschaulich wird bei der Propagation nun nicht nur der Pfad der Länge Null, sondern auch der (klassisch erlaubte) Pfad berücksichtigt, auf dem das Teilchen am Rand reflektiert wird (siehe Abb. 1). Da angenommen wird, dass die Randbeiträge fast ausschließlich von der Propagation in unmittelbarer Nähe des Randes abhängen, kann die Spurbildung bei der Koordinate Senkrecht zum Rand bis ins unendliche ausgedehnt werden. Insgesamt kann gezeigt werden, dass die Zustandsdichte für ein beliebiges Gebiet Ω so um einen Beitrag proportional zur Oberfläche S ergänzt wird [5]. Dabei können die Randkorrekturen separat berechnet werden, was die Berechnung stark vereinfachen kann, da das Koordinatensystem so gewählt werden kann, dass die Koordinate senkrecht zur Berandung einer Koordinatenachse entspricht. Die Randkorrektur für den eindimensionalen

2. Vorbereitende Konzepte

Fall ergibt sich aus (12) wie folgt:

$$\begin{aligned} \text{Tr}K_0(-x, x, t) &= \int_0^\infty dx \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(2x)^2} = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^\infty dx \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}x^2} = \frac{1}{4} \\ \Rightarrow \rho_{Rand}(E) &= \pm \mathcal{L}_\beta^{-1} \left[\text{Tr} K_0(-x, x, t) \right] (E) = \pm \frac{1}{4} \delta(E), \end{aligned} \quad (13)$$

wobei die Vorzeichen für die Neumann- (+) bzw. Dirichlet-Randbedingung (-) stehen. Für den zweidimensionalen Fall mit einer Strecke S der Länge l als Begrenzung in x_2 -Richtung ist der gespiegelte Propagator durch $K'(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = K_0(x'_1, x_1, t)K_0(-x'_2, x_2, t)$ gegeben und es gilt

$$\begin{aligned} \text{Tr}K'(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) &= \int_S dx_1 \int_0^\infty dx_2 \frac{m}{2\pi i\hbar t} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(2x_2)^2} = \frac{l}{4} \sqrt{\frac{m}{2\pi \hbar^2 \beta}} \\ \Rightarrow \rho_{Rand}(E) &= \pm \mathcal{L}_\beta^{-1} \left[\text{Tr} K_R(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) \right] (E) = \pm \frac{l}{8\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}}. \end{aligned} \quad (14)$$

Für gekrümmte Berandungen kann auch ein weiterer von der Krümmung abhängiger Beitrag hergeleitet werden. Dieser ist jedoch für diese Arbeit nicht relevant. Stattdessen werden an mehreren Stellen Eck-Korrekturen berechnet. Diese ergeben sich prinzipiell wieder aus Spiegelungen des Propagators an den beteiligten Rändern.

2.5. Vielteilchen-Propagator

Da in dieser Arbeit ein System aus zwei Teilchen betrachtet wird, ist es sinnvoll die Eigenschaften eines Zweiteilchen-Propagators allgemein zu charakterisieren. Für ein besseres Verständnis werden diese Eigenschaften hier für beliebig viele Teilchen hergeleitet. Gegeben sei ein System aus N identischen Teilchen in D Dimensionen. Die Gesamtwellenfunktionen für ein solches System muss antisymmetrisch (Fermionen) oder symmetrisch (Bosonen) sein. Das entspricht dem Umstand, dass die Teilchen quantenmechanisch nicht unterscheidbar sind. Die antisymmetrischen bzw. symmetrischen Lösungen der Schrödinger-Gleichung bilden einen Unterraum des gesamten Hilbertraums. Der Projektionsoperator auf diesen Unterraum kann für die Teilchenkoordinaten $\mathbf{x} := (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ im Konfigurationsraum Ω^N direkt angegeben werden. Um diesen zu vereinfachen wird der Begriff der fundamentalen Domäne eingeführt: Die Gruppe S_N der Permutationen über $\{1, \dots, N\}$ operiert auf der Menge Ω^N gemäß $P(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = (\mathbf{x}_{P(1)}, \dots, \mathbf{x}_{P(N)})$. Die Bahnen $S_N \mathbf{x} = \{P\mathbf{x} | P \in S_N\}$ der Elemente $\mathbf{x} \in \Omega^N$ unter S_N sind entweder disjunkt oder gleich. Eine fundamentale Domäne \mathcal{F} wird definiert als ein Vertretersystem der Bahnen in Ω^N unter S_N . Im folgenden werden zur Vereinfachung nur Zustände betrachtet, bei denen $\mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_j$ für beliebige Indices $i, j \in \{1, \dots, N\}, i \neq j$ gilt. Sind \mathbf{x} und \mathbf{x}' zwei Vertreter der selben Bahn, so legen sie (bis auf Vorzeichen) den gleichen symmetrischen (+) bzw. antisymmetrischen (-) Zustand

$$|\mathbf{x}\rangle^\pm := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} (\pm)^P |P\mathbf{x}\rangle \quad (15)$$

fest. Durch die Beschränkung auf die Fundamentale Domäne liefert diese Beziehung eine Bijektion zwischen dem Unterraum der (anti-)symmetrischen Zustände und der Fundamentalen Domäne. Außerdem sind für verschiedene Elemente $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathcal{F}$ die durch (15) festgelegten Zustände orthogonal. Der Projektions-Operator ist damit gegeben durch

$$\hat{P}_{\pm} = \int_{\mathcal{F}} dx^{ND} |\mathbf{x}\rangle^{\pm} \langle \mathbf{x}|^{\pm} = \int_{\mathcal{F}} dx^{ND} \frac{1}{N!} \sum_{P, Q \in S_N} (\pm)^{P \circ Q} |P\mathbf{x}\rangle \langle Q\mathbf{x}|. \quad (16)$$

Für einen beliebigen Zustand $|\mathbf{x}'\rangle$ mit $\mathbf{x}' \in \Omega^N$ existiert nun ein eindeutiges $R \in S_N$ mit $R\mathbf{x}' \in \mathcal{F}$. Also gilt

$$\begin{aligned} \hat{P}_{\pm} |\mathbf{x}'\rangle &= \int_{\mathcal{F}} dx^{ND} \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} (\pm)^{P \circ R^{-1}} |P\mathbf{x}\rangle \delta(R^{-1}\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} (\pm)^{P \circ R} |P \circ R\mathbf{x}'\rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} (\pm)^P |P\mathbf{x}'\rangle \end{aligned}$$

unabhängig von R . Dabei wurde benutzt, dass $\text{sgn}(P^{-1}) = \text{sgn}(P)$ gilt und S_N transitiv auf sich selbst operiert. Die Summation über die Permutationen Q ist damit äquivalent zur Ausweitung der Integration auf Ω^N :

$$\hat{P}_{\pm} = \int_{\Omega^N} dx^{ND} \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} (\pm 1)^P |P\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| \quad (17)$$

Dieser Projektionsoperator ist auch für beliebige Zustände mit evtl. nicht paarweise verschiedenen Teilchenkoordinaten verwendbar. Das kann leicht mit einem beliebigen Zustand verifiziert werden. Die Herleitung erfordert lediglich etwas mehr Schreibaufwand und die Verwendung der Isotropiegruppe $\{P \in S_N \mid P\mathbf{x} = \mathbf{x}\}$ von \mathbf{x} .

Als Projektionsoperator ist \hat{P}_{\pm} idempotent und hermitesch. Außerdem kommutiert er wegen $[\hat{P}_{\pm}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$ mit dem Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t)$. Deshalb ist der Propagator für das System durch

$$K_{\pm}(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x}' | \hat{P}_{\pm} \hat{U}(t) \hat{P}_{\pm} | \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x}' | \hat{P}_{\pm} \hat{U}(t) | \mathbf{x} \rangle \quad (18)$$

gegeben. Ist der Propagator für N identische unterscheidbare Teilchen gegeben durch $K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t)$, so erhält man den Propagator für das System aus N identischen ununterscheidbaren Teilchen (also Bosonen (+) oder Fermionen (-)) daraus also wie folgt:

$$K_{\pm}(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} (\pm)^P K(P\mathbf{x}', \mathbf{x}, t). \quad (19)$$

Dabei sind \mathbf{x} und \mathbf{x}' beliebige Teilchenkonfigurationen. Eine Spurbildung erfolgt deshalb über den gesamten Konfigurationsraum Ω^N . In manchen Fällen ist es sinnvoll die Integration nicht über den gesamten Konfigurationsraum auszudehnen, sondern nur die fundamentale Domäne zu betrachten. Nimmt man wieder paarweise verschiedene Teilchenkoordinaten an, so besteht jede Bahn aus genau $N!$ Elementen. Der Propagator für die

2. Vorbereitende Konzepte

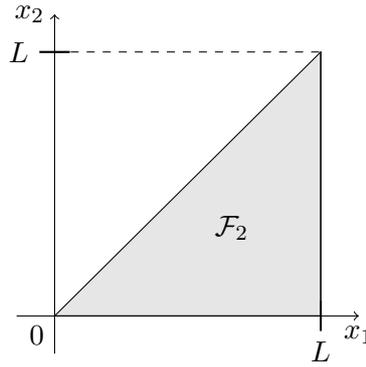


Abbildung 2: Fundamentale Domäne \mathcal{F}_2 für das System aus zwei Teilchen auf einer Linie der Länge L .

fundamentale Domäne muss mit $N!$ multipliziert werden, da diese Mehrfachzählungen nun wegfallen. Anders ausgedrückt: der Vorfaktor $\frac{1}{N!}$ korrigiert die Mehrfachzählungen bei der Integration über den gesamten Konfigurationsraum.

In dieser Arbeit ist vor allem eine spezielle fundamentale Domäne für zwei Teilchen auf einer Linie der Länge L von Interesse. Diese kann in der Form $\mathcal{F}_2 = \{\mathbf{x} \in [0, L]^2 | x_2 \leq x_1\}$ angegeben werden und ist in Abb. 2 graphisch dargestellt. Der freie Propagator für zwei unterscheidbare identische Teilchen auf einer Geraden kann als das Produkt der eindimensionalen Propagatoren geschrieben werden. Der auf die fundamentale Domäne beschränkte (anti-)symmetrische Propagator für die ununterscheidbaren Teilchen ist deshalb (ohne Randkorrekturen) gegeben durch

$$K_{\pm}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = K_0(x'_1, x_1)K_0(x'_2, x_2) \pm K_0(x'_2, x_1)K_0(x'_1, x_2).$$

Das entspricht aber genau dem Propagator für ein Teilchen in zwei Dimensionen mit einer Neumann- bzw. Dirichlet-Randkorrektur bei $x_1 = x_2$. Das System aus zwei ununterscheidbaren Teilchen auf einer Strecke der Länge L ist deshalb äquivalent zu einem System aus einem (virtuellen) Teilchen in dem zweidimensionalen Gebiet $G = \mathcal{F}_2$ mit einer Neumann-Randbedingung für Bosonen bzw. einer Dirichlet-Randbedingung für Fermionen (siehe hierzu auch [6]).

2.6. Lokale Zustandsdichte für eindimensionale Systeme

Die Lokale Zustandsdichte enthält zusätzlich zur Information über das Spektrum auch Informationen über die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Teilchen. Für ein Teilchen auf einer Linie der Länge L ist sie gegeben durch

$$\rho(x, E) = \sum_n \delta(E - E_n) |\psi_n(x)|^2 = \mathcal{L}_{\beta}^{-1} \left[K(x, x, t = -i\hbar\beta) \right] (E), \quad (20)$$

d.h. die Integration bei der Spurbildung des Propagators wird weggelassen. Für mehrere Teilchen ist man lediglich daran interessiert, mit welcher Wahrscheinlichkeit man in

2.6. Lokale Zustandsdichte für eindimensionale Systeme

einem Gebiet mindestens ein Teilchen findet, wobei die Position der anderen Teilchen keine Rolle spielt. Diese Information bleibt erhalten, wenn man bei der Spurbildung die Integration über genau eine Teilchenkoordinate auslässt. Sind die Wellenfunktionen gegeben durch $\psi_n(\mathbf{x})$ so erhält man die lokale Zustandsdichte durch

$$\begin{aligned}\rho(x, E) &= \mathcal{L}_\beta^{-1} \left[\int_{L^{N-1}} dx^{N-1} K(\mathbf{x}, \mathbf{x}, t) \right] (E) \\ &= \sum_n \delta(E - E_n) \int_{L^{N-1}} dx^{N-1} |\psi_n(\mathbf{x})|^2 \\ &= \sum_n \delta(E - E_n) \frac{n_n(x)}{N}\end{aligned}$$

mit der über $N - 1$ Teilchenkoordinaten gemittelten Teilchendichte

$$n_n(x) = N \int_{L^{N-1}} dx^{N-1} |\psi_n(\mathbf{x})|^2. \quad (21)$$

Diese gibt den Erwartungswert für die Anzahl der Teilchen an, die man in einem infinitesimalen Intervall auf der Linie antrifft. Für ein kontinuierliches Spektrum wird die Teilchendichte zu $n(E, x)$. In diesem Fall erhält man sie aus der lokalen Zustandsdichte mit Hilfe der Normierungsbedingung

$$\int_0^L dx n(x, E) = N,$$

wobei $n(x, E) = A(E) \cdot \rho(x, E)$ gelten muss. Das liefert

$$n(x, E) = \frac{N}{\rho(E)} \rho(x, E).$$

Dabei ist $\rho(x)$ die (globale) Zustandsdichte³.

³Schreibt man für ein diskretes System $\delta(E - E_n) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(E - E_n)$ mit Diracfolgen δ_ϵ , so gilt die Formel auch für diesen Fall.

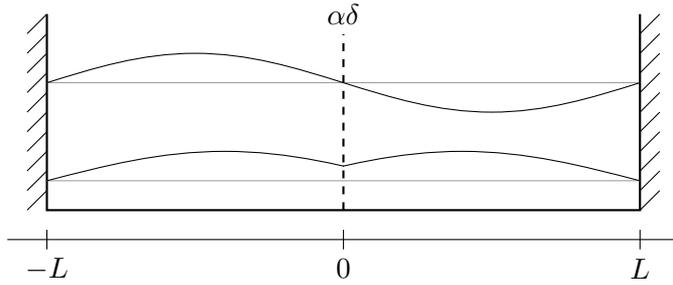


Abbildung 3: Potentialtopf mit δ -Barriere. Die erste symmetrische und die erste anti-symmetrische Lösung (für $\alpha > 0$) sind eingezeichnet.

3. Herleitung des Propagators für ein Deltapotential

In diesem Abschnitt soll der Propagator für ein Teilchen der Masse m auf einer unendlich ausgedehnten Linie mit einem Potential der Form $U(x) = \alpha\delta(x)$ (sprich Deltapotential bei $x = 0$ der Stärke α) hergeleitet werden. Dabei ist α ein beliebiger reeller Parameter. Dazu werden zuerst die Lösungen der Schrödingergleichung für ein beschränktes System der Länge $2L$ berechnet, um dann den gesuchten Propagator aus dem Grenzübergang $L \rightarrow \infty$ zu erhalten. Um die Ergebnisse der folgenden Abschnitte übersichtlicher schreiben zu können, werden an dieser Stelle zwei α -abhängige Größen definiert:

$$\kappa := \frac{m\alpha}{\hbar^2}, \quad (22)$$

$$\mu := \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}. \quad (23)$$

Dabei hat κ die Dimension einer Wellenzahl und μ die einer Energie. Ab Abschnitt 4.2 wird ein Einheitensystem gewählt, in dem $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$ gilt. In diesem Fall vereinfachen sich obige Beziehungen zu

$$\kappa = \frac{\alpha}{2}, \quad \mu = \kappa^2.$$

3.1. Exakte Lösungen für den Potentialtopf mit Delta-Barriere

Gegeben sei ein unendlicher Potentialtopf der Breite $2L$ symmetrisch zum Ursprung (vgl. Abb. 3). In der Mitte des Topfes befindet sich ein δ -Potential der Form $U(x) = \alpha\delta(x)$ der Stärke $\alpha \in \mathbb{R}$. Der Hamiltonoperator in Ortsdarstellung ist dann für $x \in [-L, L]$ gegeben durch

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \alpha\delta(x). \quad (24)$$

3. Herleitung des Propagators für ein Deltapotential

Die Lösungen der Schrödingergleichung $\hat{\mathcal{H}}\psi(x) = E\psi(x)$ müssen im Ursprung stetig sein. Weiter gilt:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi''(x) \\ &\stackrel{\text{SGL}}{=} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx -\frac{2m}{\hbar^2} (E - \alpha\delta(x))\psi(x) \\ &= \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0). \end{aligned}$$

Da das System symmetrisch zum Ursprung ist, sind alle stationären Lösungen entweder symmetrisch oder antisymmetrisch. Für die antisymmetrischen Lösungen folgt aus der Stetigkeit $\psi(0) = 0$. Für diese ist obige Bedingung also äquivalent zur Stetigkeit der Ableitung im Ursprung. Die antisymmetrischen Lösungen werden also von der δ -Barriere nicht beeinflusst und entsprechen genau den bekannten antisymmetrischen Lösungen für einen unendlichen Potentialtopf. Sie sind gegeben durch

$$\psi_n^-(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin(k_n^- x) \quad k_n^- = \frac{n\pi}{L}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (25)$$

Für die symmetrischen Lösungen folgt mit der Definition (22) für die rechtsseitige Ableitung im Ursprung die Bedingung

$$\psi'(0^+) = \kappa \cdot \psi(0). \quad (26)$$

Für $\kappa = 0$ ergibt dies eine Neumann-Randbedingung, während der Grenzfall $\kappa \rightarrow \infty$ nur für $\psi(0) = 0$, also Dirichlet-Randbedingungen, erfüllt werden kann. Deshalb spricht man bei einer Randbedingung der Form (26) von einer gemischten Randbedingung.

Im Folgenden wird zuerst nur $\alpha \geq 0$ bzw. äquivalent $\kappa \geq 0$ betrachtet. Der Fall $\kappa < 0$ wird am Ende des Abschnitts separat behandelt.

Der Ansatz $\psi(x) = A \sin(k(|x| - L))$ erfüllt die Randbedingungen $\psi(-L) = \psi(L) = 0$ und für die Ableitung gilt $\psi'(x) = \text{sgn}(x) A k \cos(k(|x| - L))$. Die Bedingung (26) liefert dann

$$\tan(kL) = -\frac{k}{\kappa}. \quad (27)$$

Dies ist eine transzendente Gleichung mit jeweils einer Lösung für kL in jedem Intervall $(n\pi - \frac{\pi}{2}, n\pi + \frac{\pi}{2})$ mit $n \in \mathbb{Z}$ (vgl. Abb. 4). Dabei ist für jede Lösung k_n auch $-k_n$ eine Lösung, liefert aber keine linear unabhängige Wellenfunktion ψ . Außerdem ist für $k = 0$ die Wellenfunktion ψ identisch Null. Deshalb kann man sich auf $n \in \mathbb{N}$ beschränken⁴. Nach der Normierung auf dem Intervall $[-L, L]$ ergeben sich die symmetrischen Lösungen zu

$$\begin{aligned} \psi_n^+(x) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \left(1 - \frac{\sin(2k_n^+ L)}{2k_n^+ L} \right)^{-\frac{1}{2}} \sin(k_n^+ (|x| - L)) \\ k_n^+ &= -\kappa \tan(k_n^+ L), \quad \text{mit } k_n^+ L \in (n\pi - \frac{\pi}{2}, n\pi + \frac{\pi}{2}) \end{aligned} \quad (28)$$

3.2. Propagator für eine Delta-Barriere

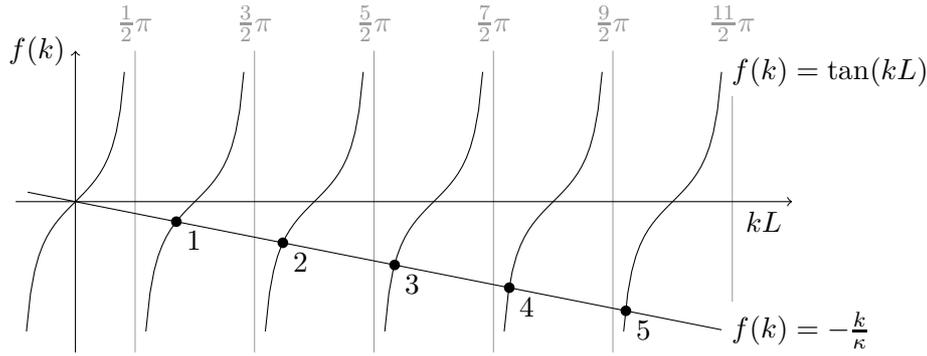


Abbildung 4: Graphische Lösungen der transzendenten Gleichung $\tan(kL) = -\frac{k}{\kappa}$ für $\kappa > 0$. In jedem Intervall $(n\pi - \frac{\pi}{2}, n\pi + \frac{\pi}{2})$ existiert genau eine Lösung.

Die obige Herleitung ist auch für den Fall $\kappa < 0$ gültig, weshalb die Wellenfunktionen in (28) auch für $\kappa < 0$ Lösungen darstellen. Allerdings existiert für $\kappa L \in (-1, 0)$ eine weitere Lösung k_0 der Gleichung (27) mit $k_0 L \in (0, \frac{\pi}{2})$. Es gibt jedoch nicht nur für $\kappa L \in (-1, 0)$ eine zusätzliche Lösung: der Ansatz $\psi(x) = A \sinh(k(|x| - l))$ erfüllt ebenfalls die Randbedingung $\psi(\pm L) = 0$. Aus (26) ergibt sich die transzendenten Gleichung

$$\tanh(kL) = -\frac{k}{\kappa}. \quad (29)$$

Diese Gleichung hat für $\kappa L \in (-\infty, -1)$ eine nicht verschwindende Lösung k'_0 . Aufgrund der Symmetrie kann wieder die positive Lösung gewählt werden. Setzt man den Ansatz in die Schrödingergleichung ein, so zeigt sich, dass die zugehörige Energie negativ sein muss. Tatsächlich geht der hier gewählte Ansatz aus dem ursprünglichen Ansatz durch die Ersetzung ($k \rightarrow ik$), also einer imaginären Frequenz, hervor⁵. Die Normierung liefert die Wellenfunktion

$$\psi_0^+(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \left(\frac{\sinh(2k'_0 L)}{2k'_0 L} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}} \sinh(k'_0(|x| - L)). \quad (30)$$

Die zusätzlichen Lösungen der transzendenten Gleichungen (27) und (29) sind in Abb. 5 graphisch dargestellt. Für $\kappa L = -1$ gibt es keine weitere Lösung. Dieser Fall ist aber vernachlässigbar.

3.2. Propagator für eine Delta-Barriere

Im dem vorhergehenden Unterkapitel wurden die exakten (reellen) Lösungen für das beschränkte Problem berechnet. Der Propagator für dieses System ist damit gegeben

⁴Es gibt verschiedene Konventionen für die natürlichen Zahlen \mathbb{N} . In dieser Arbeit ist $0 \notin \mathbb{N}$

⁵Damit kann diese Lösung als innerhalb des Potentialtopfs gebundener Zustand angesehen werden.

3. Herleitung des Propagators für ein Deltapotential

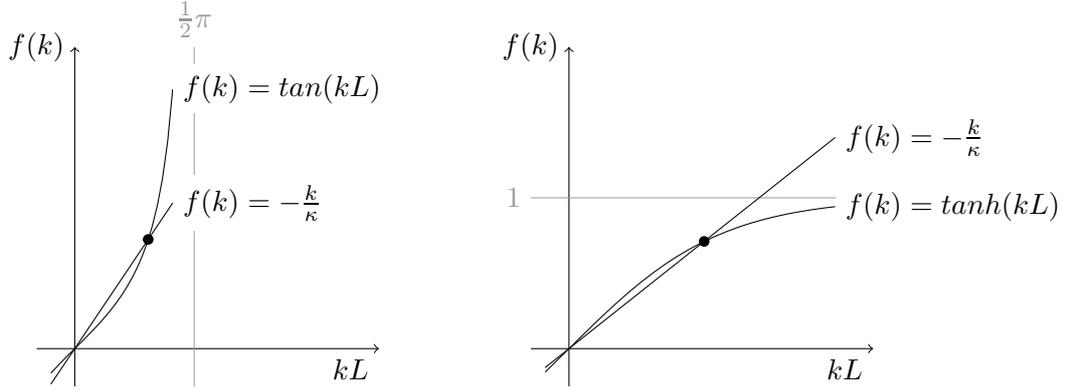


Abbildung 5: Zusätzliche Lösungen für $\kappa < 0$. Links: positive Lösung der Gleichung $\tan(kL) = -\frac{k}{\kappa}$ für $\kappa L > -1$. Rechts: Lösung der Gleichung $\tanh(kL) = -\frac{k}{\kappa}$ für $\kappa L < -1$.

durch

$$K_{[\delta]}(x', x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{i\hbar}{2m}(k_n^+)^2} \psi_n^+(x') \psi_n^+(x) + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{i\hbar}{2m}(k_n^-)^2} \psi_n^-(x') \psi_n^-(x).$$

Für $\kappa < 0$ m Um den Propagator für das unbeschränkte System zu erhalten, muss der Grenzübergang $L \rightarrow \infty$ durchgeführt werden. Dazu werden zuerst die symmetrischen Lösungen des beschränkten Systems für große Werte von L genähert. Die mit $n = 0$ indizierten Lösungen für $\kappa < 0$ werden am Ende dieses Abschnitts separat behandelt. Bis dahin gilt $n \in \mathbb{N}$. Für großes L vereinfachen sich die Wellenfunktionen in (28) zu

$$\psi_n^+(x) \approx \frac{1}{\sqrt{L}} \sin(k_n(|x| - L)) \quad (31)$$

und man erhält (Herleitung im Anhang, Indices weggelassen)

$$\psi^+(x') \psi^+(x) = \frac{1}{2L} \left[\cos(k(x' + x)) + \cos(k(x' - x)) - 2 \operatorname{Re} \frac{e^{ik(|x'| + |x|)}}{1 + i\frac{k}{\kappa}} \right]. \quad (32)$$

Bemerkenswert an dieser Darstellung ist, dass $\Lambda^+(k, x', x) := L \cdot \psi^+(x') \psi^+(x)$ nicht mehr explizit von der Ausdehnung L des Systems abhängt. Implizit ist jedoch k von L abhängig. Für große Werte von L kann diese Abhängigkeit stark vereinfacht werden. Gleichung (27) ergibt mit der Ersetzung $u := kL$ die Gleichung $\tan(u) = -\frac{u}{\kappa L}$. Im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ sind die Lösungen dieser Gleichung gegeben durch $u_n = k_n L = n\pi$ und damit

$$k_n = \frac{n\pi}{L}. \quad (33)$$

Die Differenz $k_{n+1} - k_n = \frac{\pi}{L}$ nimmt mit L ab, d.h. die k_n rücken immer näher zusammen. Formal gilt für beliebige $n \in \mathbb{N}$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} L(k_{n+1} - k_n) = \pi. \quad (34)$$

3.2. Propagator für eine Delta-Barriere

Außerdem konvergiert k_1 gegen Null. Damit können wir den symmetrischen Anteil des Propagators für das unbeschränkte System in geschlossener Form angeben als

$$\begin{aligned}
K_\delta^+(x', x, t) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{i\hbar}{2m} k_n t} \psi_n^+(x') \psi_n^+(x) \\
&= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{\infty} (k_{n+1} - k_n) \cdot e^{-\frac{i\hbar}{2m} k_n^2 t} \Lambda^+(k_n, x', x) \cdot \frac{1}{L(k_{n+1} - k_n)} \\
&= \int_0^\infty dk e^{-\frac{i\hbar}{2m} k^2 t} \Lambda^+(k, x', x) \frac{1}{\pi} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{i\hbar}{2m} k^2 t} \Lambda^+(k, x', x).
\end{aligned}$$

Dabei wurde die Definition des Riemannschen Integrals mit der Zerlegung der positiven k -Achse in Intervalle $[k_n, k_{n+1})$ verwendet, sowie im letzten Schritt die Symmetrie des Integranden bezüglich k ausgenutzt.

Für die antisymmetrischen Lösungen (25) gilt sogar für endliche Längen L für alle $n \in \mathbb{N} : L(k_{n+1} - k_n) = \pi$. Ersetzt man in obiger Herleitung $\psi^+(x')\psi^+(x)$ durch

$$\psi^-(x')\psi^-(x) = \frac{1}{L} \sin(kx') \sin(kx) = \frac{1}{2L} [\cos(k(x' - x)) - \cos(k(x' + x))]$$

und definiert entsprechend $\Lambda^- := L\psi^-(x')\psi^-(x)$, so erhält man bis auf Indizierung den gleichen Ausdruck für den antisymmetrischen Anteil. Insgesamt folgt

$$\begin{aligned}
K_\delta(x', x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{i\hbar}{2m} k^2 t} \Lambda^+(k, x', x) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{i\hbar}{2m} k^2 t} \Lambda^-(k, x', x) \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{i\hbar}{2m} k^2 t} \cos(k(x' - x)) - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{i\hbar}{2m} k^2 t} \operatorname{Re} \frac{e^{ik(|x'|+|x|)}}{1 + i\frac{k}{\kappa}}.
\end{aligned}$$

An dieser Stelle kann der Spezialfall $\alpha = 0$ bzw. $\kappa = 0$ betrachtet werden, der den freien Propagator liefern sollte. Dazu muss lediglich folgender Grenzwert berechnet werden ($z = |x'| + |x|$):

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \operatorname{Re} \frac{e^{ikz}}{1 + i\frac{k}{\kappa}} = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\cos(kz) + \frac{k}{\kappa} \sin(kz)}{1 + (\frac{k}{\kappa})^2} = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\kappa^2 \cos(kz) + \kappa \sin(kz)}{\kappa^2 + k^2} = 0$$

Der Propagator ist für $\kappa = 0$ mit der Abkürzung $d := x' - x$ gegeben durch:

$$\begin{aligned}
K_\delta(x', x, t) \Big|_{\kappa=0} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{i\hbar}{2m} k^2 t} \cos(kd) \\
&= \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{i\hbar}{2m} k^2 t} (e^{ikd} + e^{-ikd}) \\
&= \frac{1}{4\pi} e^{-\frac{m}{2i\hbar t} d^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{i\hbar t}{2m} (k - \frac{md}{\hbar t})^2} + e^{-\frac{i\hbar t}{2m} (k + \frac{md}{\hbar t})^2} \\
&= \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{m}{2i\hbar t} d^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{i\hbar t}{2m} k^2} \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} e^{-\frac{m}{2i\hbar t} d^2}
\end{aligned}$$

3. Herleitung des Propagators für ein Deltapotential

und stimmt mit dem bekannten Ausdruck für den freien Propagator überein. Für $\kappa \neq 0$ kann das zweite Integral in K_δ nicht auf elementare Funktionen reduziert werden. Es kann jedoch in eine einfachere Form gebracht werden. Dazu substituiert man $z := |x'| + |x|$ und betrachtet das Integral

$$I(\epsilon) := \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{i\hbar}{2m}k^2t} \operatorname{Re} \frac{e^{ik(z+\epsilon)}}{1 + i\frac{k}{\kappa}}. \quad (35)$$

Für $\epsilon = 0$ entspricht es genau dem gesuchten Integral in K_δ . Wegen

$$|I(\epsilon)| \leq \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left| e^{-\frac{i\hbar}{2m}k^2t} \operatorname{Re} \frac{e^{ik(z+\epsilon)}}{1 + i\frac{k}{\kappa}} \right| \leq \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{1 + (\frac{k}{\kappa})^2} = \frac{\kappa}{2} \quad (36)$$

ist es für beliebige $\epsilon \in \mathbb{R}$ beschränkt. Weiter erfüllt es die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial \epsilon} - \kappa\right)I(\epsilon) &= -\kappa \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{i\hbar}{2m}k^2t} \cos(k(z+\epsilon)) \\ &= -\kappa \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(z+\epsilon)^2} \\ &=: f(\epsilon). \end{aligned}$$

Die homogene Lösung dieser Differentialgleichung ist $I_0(\epsilon) = ae^{\kappa\epsilon}$ mit einem zunächst unbekanntem komplexen Parameter a . Sei nun $\kappa \geq 0$. Die Greensche Funktion

$$G(\epsilon) := -\Theta(-\epsilon)e^{\kappa\epsilon}$$

ist eine spezielle Lösung der Differentialgleichung $(\frac{\partial}{\partial \epsilon} - \kappa)G(\epsilon) = \delta(\epsilon)$. Die Faltung von G mit f liefert eine spezielle Lösung der Differentialgleichung für $I(\epsilon)$. Die allgemeinen Lösungen sind also gegeben durch

$$\begin{aligned} I(\epsilon) &= I_0(\epsilon) + (G * f)(\epsilon) \\ &= I_0(\epsilon) + \kappa \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon' \Theta(\epsilon' - \epsilon) e^{\kappa(\epsilon - \epsilon')} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(z + \epsilon')^2} \\ &= ae^{\kappa\epsilon} + \kappa \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} e^{\kappa\epsilon} \int_{\epsilon}^{\infty} d\epsilon' e^{-\kappa\epsilon'} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(z + \epsilon')^2} \end{aligned}$$

mit dem noch zu bestimmenden (eventuell von κ abhängenden) Parameter a . Für $\kappa \rightarrow 0$ muss für beliebige $\epsilon \in \mathbb{R}$ $I(\epsilon) \rightarrow 0$ erfüllt sein. Das lässt schon $a = 0$ vermuten. Tatsächlich muss $I(\epsilon)$ beschränkt sein. Das Integral auf der rechten Seite ist für jedes $\epsilon \in \mathbb{R}$ beschränkt durch

$$\left| \kappa \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \int_0^{\infty} d\epsilon' e^{-\kappa\epsilon'} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(z + \epsilon' + \epsilon)^2} \right| \leq \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}, \quad (37)$$

während die homogene Lösung $ae^{\kappa\epsilon}$ für $a \neq 0$ unbeschränkt ist. Daraus folgt $a = 0$. Der Propagator für eine Deltabarriere ist für $\kappa \geq 0$ damit gegeben durch

$$K_\delta(x', x, t) = K_0(x', x, t) - \kappa \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(|x'| + |x| + \epsilon)^2}. \quad (38)$$

3.2. Propagator für eine Delta-Barriere

Dies ist kein neues Ergebnis. In [8] wird dieser Propagator über die quantenmechanische Greensche Funktion hergeleitet. Dort wird jedoch $\kappa > 0$ vorausgesetzt. Für $\kappa < 0$ konvergiert das Integral auf der rechten Seite jedoch nicht. Dieses Problem wird durch die Verwendung einer anderen Greenschen Funktion gelöst: durch Addieren von $e^{\kappa\epsilon}$ zu G erhält man die Greensche Funktion

$$G'(\epsilon) := \Theta(\epsilon)e^{\kappa\epsilon}.$$

Durch die Faltung von G' mit f erhält man die allgemeine Lösung für $\kappa < 0$

$$\begin{aligned} I(\epsilon) &= ae^{\kappa\epsilon} - \kappa \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon' \Theta(\epsilon - \epsilon') e^{\kappa(\epsilon - \epsilon')} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(z + \epsilon')^2} \\ &= ae^{\kappa\epsilon} - \kappa \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{\kappa\epsilon} \int_{-\epsilon}^{\infty} d\epsilon' e^{\kappa\epsilon'} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(z - \epsilon')^2}. \end{aligned}$$

Analog folgt auch hier $a = 0$. In Abschnitt 3.1 wurde für $\kappa < 0$ abhängig vom Betrag von κL eine weitere Lösung gefunden, für die nun der Grenzfall $L \rightarrow \infty$ betrachtet wird. Für ausreichend große Längen L ist $\kappa L < -1$ erfüllt und die Wellenfunktion des Zustands ist gegeben durch

$$\psi_0^+(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \left(\frac{\sinh(2k_0 L)}{2k_0 L} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}} \sinh(k_0(|x| - L)) = \sqrt{2k_0} \frac{\sinh(k_0(|x| - L))}{\sqrt{\sinh(2k_0 L) - 2k_0 L}}.$$

Die Lösung von (29) ist im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ wegen $\lim_{L \rightarrow \infty} \tanh(kL) = \Theta(k) - \Theta(-k)$ durch $k = -\kappa = |\kappa|$ gegeben. Außerdem ist aus der graphischen Betrachtung leicht ersichtlich, dass mit wachsender Länge L auch die Lösung von (29) größer wird. Im Limes kann also ohne Beschränkung der Allgemeinheit $k \in [\frac{|\kappa|}{2}, |\kappa|]$ angenommen werden. Damit ist die folgende Grenzwertbildung gerechtfertigt:

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \psi_0^+(x) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sqrt{2k} \frac{\sinh(k(|x| - L))}{\sqrt{\sinh(2kL) - 2kL}} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sqrt{k} \frac{e^{k(|x| - L)} - e^{-k(|x| - L)}}{\sqrt{e^{2kL} - e^{-2kL} - 4kL}} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sqrt{k} \frac{e^{k|x|} e^{-2kL} - e^{-k|x|}}{\sqrt{1 - e^{-4kL} - 4kL e^{-2kL}}} \\ &= -\sqrt{|\kappa|} e^{\kappa|x|}. \end{aligned}$$

Das ist die Lösung der Schrödingergleichung für das unbeschränkte System mit einer δ -Barriere bei $x = 0$ mit der Energie $E_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 = -\mu$ (siehe (23)). Nun kann der Propagator für das Unbeschränkte System auch für negative Werte von κ angegeben werden:

$$\begin{aligned} K_\delta(x', x, t) &= K_0(x', x, t) + \kappa \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \int_0^\infty d\epsilon e^{\kappa\epsilon} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(|x'| + |x| - \epsilon)^2} \\ &\quad - \kappa e^{\frac{i}{\hbar}\mu t} e^{\kappa(|x'| + |x|)}. \end{aligned}$$

3. Herleitung des Propagators für ein Deltapotential

Für beliebige Werte von κ kann der Propagator folgendermaßen geschrieben werden:

$$K_\delta(x', x, t) = K_0(x', x, t) - |\kappa| \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \int_0^\infty d\epsilon e^{-|\kappa|\epsilon} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(|x'|+|x|+\text{sgn}(\kappa)\epsilon)^2} + \Theta(-\kappa) |\kappa| e^{\frac{i}{\hbar}\mu t} e^{-|\kappa|(|x'|+|x|)}. \quad (39)$$

Das ist ein fundamentales Ergebnis, das für die folgenden Abschnitte benötigt wird. Zum Zwecke der Übersichtlichkeit wird in den folgenden Abschnitten in Einheiten gearbeitet, für die $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$ gilt. Die Zeitabhängigkeit der Propagation wird in die rein imaginäre Größe $\beta = \frac{i}{\hbar}t$ integriert (β ist die über die Laplace-Transformation zu E konjugierte Variable). Der freie Propagator vereinfacht sich damit zu

$$K_0(x', x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\beta}} e^{\frac{1}{4\beta}(x'-x)^2}.$$

Für die folgenden Abschnitte wird außerdem die Abkürzung

$$K_\kappa(x', x, t) := -\kappa \frac{1}{\sqrt{4\pi\beta}} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(|x'|+|x|\pm\epsilon)^2} + \theta_1^0 \kappa e^{\mu\beta} e^{-\kappa(|x'|+|x|)}$$

eingeführt. In dieser Darstellung wird κ mit $|\kappa|$ identifiziert und die Fallunterscheidung erfolgt durch die unterschiedlichen Vorzeichen. Das obere Zeichen steht ab hier immer für ein positives Potential ($\kappa \geq 0$) und das untere für ein negatives Potential ($\kappa < 0$). Der Vorfaktor des zweiten Summanden ist definiert als

$$\theta_1^0 := \begin{cases} 0 & \kappa \geq 0 \\ 1 & \kappa < 0. \end{cases}$$

4. Zustandsdichte in einer Dimension mit gemischter Randbedingung

In diesem Kapitel soll aus dem oben hergeleiteten Propagator die semiklassische Zustandsdichte für ein Teilchen auf einer Linie der Länge L mit der gemischten Randbedingung (26) bei $x = 0$ und einer Dirichlet-Randbedingung bei $x = L$ hergeleitet und mit den exakten Lösungen verglichen werden. Das gewählte System entspricht dabei genau der rechten Seite des symmetrischen Systems aus Abschnitt 3.1, wobei nur die symmetrischen Lösungen zugelassen werden (die antisymmetrischen Lösungen erfüllen nicht die gemischte Randbedingung).

4.1. Herleitung der Zustandsdichte

Entsprechend der in 2.4 vorgestellten Annahme, dass der Rand (in diesem Fall die δ -Barriere) nur die Kurzzeit-Propagation in unmittelbarer Nähe beeinflusst, wird angenommen, dass der Dirichlet-Rand separat behandelt werden kann. Der Propagator ohne die Korrektur von diesem Rand ist gegeben durch den symmetrischen Anteil von K_δ :

$$\begin{aligned} K_\delta^+(x', x, t) &= \frac{1}{2}K_\delta(x', x, t) + \frac{1}{2}K_\delta(-x', x, t) \\ &= \frac{1}{2}K_0(x', x, t) + \frac{1}{2}K_0(-x', x, t) + K_\kappa(x', x, t). \end{aligned}$$

Um den Propagator für das halbierte System zu erhalten muss dieser noch mit dem Faktor 2 Multipliziert werden. Der vollständige Propagator für das gewählte System ist damit gegeben durch

$$K(x', x, t) = K_0(x', x, t) + K_0(-x', x, t) + 2K_\kappa(x', x, t) - K_0(2L - x', x, t). \quad (40)$$

Der letzte Summand ist die aus der Spiegelbildmethode gewonnene Randkorrektur für die Dirichlet-Randbedingung bei $x = L$. Diese Darstellung kann nun auch wie folgt interpretiert werden: der erste Summand entspricht der Näherung eines freien Teilchens, alle weiteren Terme bilden Randkorrekturen entsprechend den gegebenen Randbedingungen (weitere Korrekturen kommen nicht infrage, da es keine Ecken oder Krümmungen geben kann). Somit ist der Anteil

$$K_R(x', x, t) := K_0(-x', x, t) + 2K_\kappa(x', x, t) \quad (41)$$

die Randkorrektur der gemischten Randbedingung bei $x = 0$. Der Grenzfall $\kappa \rightarrow 0$ liefert offensichtlich die Randkorrektur für eine Neumann-Randbedingung. Der Grenzfall $\kappa \rightarrow \infty$ ist nicht so offensichtlich, kann aber mittels partieller Integration leicht eingesehen werden:

$$\begin{aligned} K_\kappa(x', x, t) &= -\frac{\kappa}{\sqrt{2\pi\beta}} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(|x'|+|x|+\epsilon)^2} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{4\pi\beta}} \left\{ e^{-\frac{1}{4\beta}(|x'|+|x|)^2} + \int_0^\infty d\epsilon \frac{1}{2\beta} (|x'| + |x| + \epsilon) e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(|x'|+|x|+\epsilon)^2} \right\}. \end{aligned}$$

4. Zustandsdichte in einer Dimension mit gemischter Randbedingung

Der erste Term in den geschweiften Klammern entspricht nach dem Weglassen der Beiträge genau $K_0(-x', x, t)$ während der zweite Term (nach erneuter partieller Integration) für $\kappa \rightarrow \infty$ verschwindet. Also liefert dieser Grenzfall die Randkorrektur für eine Dirichlet-Randbedingung. Außerdem kann man leicht nachrechnen, dass

$$\frac{\partial}{\partial x} \{K_0(x, \cdot, t) + K_R(x, \cdot, t)\} \Big|_{x=0^+} = \kappa \cdot \{K_0(0, \cdot, t) + K_R(0, \cdot, t)\} \quad (42)$$

gilt, was genau der Propagator-Version der gemischten Randbedingung (26) entspricht.

Um die Zustandsdichte für das gewählte System angeben zu können müssen wir die Spur von K_R berechnen. Dazu berechnen wir zuerst die Spur von $K_\kappa(x', x, t)$. Dabei wird die Spurbildung entsprechend unseren Annahmen bis Unendlich ausgedehnt:

$$\begin{aligned} \text{Tr } K_\kappa(x', x, t) &= \int_0^\infty dx \left(-\kappa \frac{1}{\sqrt{4\pi\beta}} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{\frac{1}{4\beta}(|x|+|x|\pm\epsilon)^2} + \theta_1^0 \kappa e^{\mu\beta} e^{-\kappa(|x|+|x|)} \right) \\ &= -\kappa \frac{1}{\sqrt{4\pi\beta}} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} \int_0^\infty dx e^{-\frac{1}{4\beta}(2x\pm\epsilon)^2} + \frac{\theta_1^0}{2} e^{\mu\beta} \\ &= -\frac{1}{2} \kappa \frac{1}{\sqrt{4\pi\beta}} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} \int_{\pm\epsilon}^\infty dx e^{-\frac{1}{4\beta}x^2} + \frac{\theta_1^0}{2} e^{\mu\beta} \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{4\pi\beta}} e^{-\kappa\epsilon} \int_{\pm\epsilon}^\infty dx e^{-\frac{1}{4\beta}x^2} \right]_{\epsilon=0}^\infty \pm \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{4\pi\beta}} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}\epsilon^2} + \frac{\theta_1^0}{2} e^{\mu\beta} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{4\pi\beta}} \int_0^\infty dx e^{-\frac{1}{4\beta}x^2} \pm \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{4\pi\beta}} e^{\kappa^2\beta} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\frac{1}{4\beta}(\epsilon+2\kappa\beta)^2} + \frac{\theta_1^0}{2} e^{\mu\beta} \\ &= -\frac{1}{4} \pm \frac{1}{4} e^{\mu\beta} \text{erfc}(\sqrt{\mu\beta}) + \frac{\theta_1^0}{2} e^{\mu\beta}. \end{aligned}$$

Im vierten Schritt wurde partiell integriert, wobei der Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung benutzt wurde. Im letzten Schritt wurde der Integrationsweg

$$\gamma : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{C}, \quad \gamma(\epsilon) := \frac{1}{\sqrt{4\beta}}\epsilon + \kappa\sqrt{\beta}$$

über die positive reelle Achse im unendlichen geschlossen (β ist rein imaginär!). Die Integration über den dazu verwendeten Kreisbogen verschwindet dabei, weshalb der ursprüngliche Integrationsweg γ auf die reelle Achse gedreht werden kann. Dieser Trick wird in dieser Arbeit noch sehr oft angewendet, jedoch nicht explizit darauf hingewiesen (in den meisten Fällen kann β auf diese Art als reelle Größe aufgefasst werden). Das Ergebnis wurde dann noch durch die komplementäre Fehlerfunktion ausgedrückt, welche als

$$\text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty dz e^{-z^2}$$

definiert ist. Die Spur von K_R berechnet sich damit zu

$$\begin{aligned} \text{Tr } K_R(x', x, t) &= \text{Tr } K_0(-x', x, t) + 2 \text{Tr } K_\kappa(x', x, t) \\ &= \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} e^{\mu\beta} \text{erfc}(\sqrt{\mu\beta}) + \theta_1^0 e^{\mu\beta} \\ &= -\frac{1}{4} \pm \frac{1}{2} e^{\mu\beta} \text{erfc}(\sqrt{\mu\beta}) + \theta_1^0 e^{\mu\beta}. \end{aligned} \quad (43)$$

Der erste Summand ($-\frac{1}{4}$) entspricht genau der Spur einer Dirichlet-Randkorrektur. Daraus wird ersichtlich, dass die gemischte Randkorrektur sich immer als die Summe einer Dirichlet-Randkorrektur und eines κ - bzw. μ -abhängigen Terms schreiben lässt. Die inverse Laplace-Transformation mit Hilfe von [1] liefert den eindimensionalen gemischten Randbeitrag zur Zustandsdichte:

$$\rho_R(E) = -\frac{1}{4}\delta(E) \pm \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\mu}{E}}\frac{\Theta(E)}{E+\mu} + \theta_1^0\delta(E+\mu). \quad (44)$$

Der Beitrag des freien Propagators und der Dirichlet-Randkorrektur sind in Abschnitt 2.4 Gleichung (13) und (11) gegeben. Die Zustandsdichte für ein Teilchen auf einer Linie der Länge L mit einer gemischten Randbedingung auf der einen und einer Dirichlet-Randbedingung auf der anderen Seite ist damit gegeben durch

$$\rho(E) = \frac{L}{2\pi}\frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}} - \frac{1}{2}\delta(E) \pm \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\mu}{E}}\frac{\Theta(E)}{E+\mu} + \theta_1^0\delta(E+\mu). \quad (45)$$

4.2. Grenzfälle

Die Zustandsdichte sollte für die Grenzfälle $\kappa \rightarrow \infty$ bzw. $\mu \rightarrow \infty$ und $\kappa \rightarrow 0$ bzw. $\mu \rightarrow 0^+$ genau der Zustandsdichte für ein Dirichlet-Dirichlet- (-) bzw. Neumann-Dirichlet-System (+)

$$\rho_{\pm}(E) = \frac{L}{2\pi}\frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}} \pm \frac{1}{4}\delta(E) - \frac{1}{4}\delta(E) \quad (46)$$

entsprechen (hier steht \pm NICHT für das Vorzeichen von κ). Für $\mu \rightarrow \infty$ verschwinden die beiden κ - bzw. μ -abhängigen Summanden in (45) und der gewünschte Grenzfall ist offensichtlich gegeben. Damit der Grenzübergang $\kappa \rightarrow 0$ das richtige Ergebnis liefert, muss die δ -Distribution in der Zustandsdichte kompensiert werden. Also muss folgendes für den Grenzwert gelten:

$$\lim_{\mu \rightarrow 0^+} \delta_{\mu}(E) := \lim_{\mu \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{\mu}{E}}\frac{\Theta(E)}{E+\mu} = \delta(E). \quad (47)$$

Tatsächlich gilt für beliebige negative Energien schon $\delta_{\mu}(E) = 0$. Für beliebige positive Energien gilt $\lim_{\mu \rightarrow 0^+} \delta_{\mu}(E) = 0$. Also konvergiert $\delta_{\mu}(E)$ auf $\mathbb{R} \setminus \{0\}$ punktweise gegen Null. Außerdem konvergiert $\delta_{\mu}(E)$ für $E \rightarrow 0^+$ uneigentlich gegen Unendlich. Es bleibt nur noch zu zeigen, dass das Ergebnis der Integration über die reelle Achse unabhängig von μ den Wert 1 liefert:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_{\mu}(E) &= \int_0^{\infty} dE \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{\mu}{E}}\frac{1}{E+\mu} \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dE \frac{1}{\sqrt{\mu}}\frac{1}{2\sqrt{E}}\frac{1}{1+\frac{E}{\mu}} \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dx \frac{1}{1+x^2} \\ &= \frac{2}{\pi} \arctan(x) \Big|_0^{\infty} = 1. \end{aligned}$$

4. Zustandsdichte in einer Dimension mit gemischter Randbedingung

Die in (45) gegebene Zustandsdichte interpoliert also für $\kappa > 0$ wie gewünscht die Grenzfälle eines Dirichlet-Dirichlet- bzw. Neumann-Dirichlet-Systems. Für $\kappa < 0$ liefert der Grenzfall $\kappa \rightarrow 0^-$ das gleiche Ergebnis wie der Grenzfall $\kappa \rightarrow 0^+$. Der Grenzfall $\kappa \rightarrow -\infty$ muss relativ zum niedrigsten Zustand betrachtet werden. Dieser ist durch $E = -\mu$ gegeben, d.h. die Anregungsenergie ist $E^* = E + \mu$. Der Grenzwert ist

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{\mu \rightarrow \infty \\ \kappa < 0}} \rho(E^* - \mu) &= \lim_{\mu \rightarrow \infty} \frac{L}{2\pi} \frac{\Theta(E^* - \mu)}{\sqrt{E^* - \mu}} - \frac{1}{2} \delta(E^* - \mu) - \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E^* - \mu}} \frac{\Theta(E^* - \mu)}{E^*} + \delta(E^*) \\ &= \delta(E^*). \end{aligned}$$

Anschaulich rücken vom niedrigsten Energieniveau aus gesehen alle anderen Energieniveaus ins unendliche. Das Teilchen würde also sobald es einmal im Grundzustand wäre unendlich viel Energie benötigen um in den nächsthöheren Zustand zu gelangen. Die Wellenfunktion des niedrigsten Zustand ist (siehe Abschnitt 3.2, Normierung angepasst auf \mathbb{R}^+)

$$\psi_\mu(x) = \sqrt{2\kappa} e^{-\kappa x}$$

und erfüllt alle Eigenschaften einer Dirac-Folge. Die Wellenfunktion ist im Grenzfall in der Tat gegeben durch $\psi_\infty(x) = \delta(x)$. Das bedeutet, dass das Teilchen an den Rand mit der gemischten Randbedingung gebunden ist.

4.3. Vergleich mit der quantenmechanischen Zustandsdichte

Da die exakten quantenmechanischen Lösungen für das System bekannt sind, kann die hergeleitete mittlere Zustandsdichte auf ihre Gültigkeit überprüft werden. Vor allem für $\kappa < 0$ ist fraglich, wie groß der Fehler bei der Verwendung des gebundenen Zustands der Energie $-\mu$ ist, falls dieser in den quantenmechanischen Lösungen wegen $|\kappa|L < 1$ nicht auftritt. Außerdem soll überprüft werden, ob die auftretenden δ -Distributionen korrekt sind, da diese im Falle mehrerer Teilchen in die Korrekturen von Ecken mit einfließen. Durch Integration über die Zustandsdichte erhält man die Zählfunktion

$$\mathcal{N}(E) = \left[\frac{L}{\pi} \sqrt{E} - \frac{1}{2} \pm \frac{1}{\pi} \arctan \left(\sqrt{\frac{E}{\mu}} \right) \right] \Theta(E) + \theta_1^0 \Theta(E + \mu).$$

Betrachtet man die Bestimmungsgleichungen für die Wellenzahlen (27) und (29), so zeigt die Substitution $g_n = k_n L$, dass die Lösungen g_n nur von dem Produkt κL abhängen. Ist dieses Produkt konstant, so werden die Energien lediglich mit $\frac{1}{L^2}$ skaliert. Substituiert man entsprechend in der Zählfunktion $E' = EL^2$, so stellt man fest, dass ihr Verhalten nur vom Produkt $\mu L^2 = (\kappa L)^2$ bestimmt ist. Es bietet sich deshalb an, in beiden Fällen die Energie in Einheiten von $\frac{1}{L^2}$ sowie die Stärke des δ -Potentials in Einheiten von $\frac{1}{L}$ auszudrücken. Äquivalent dazu wählt man in den Gleichungen $L = 1$ und variiert nur den Wert von κ . In den Vergleichsplots werden also immer die dimensionslosen Größen

4.3. Vergleich mit der quantenmechanischen Zustandsdichte

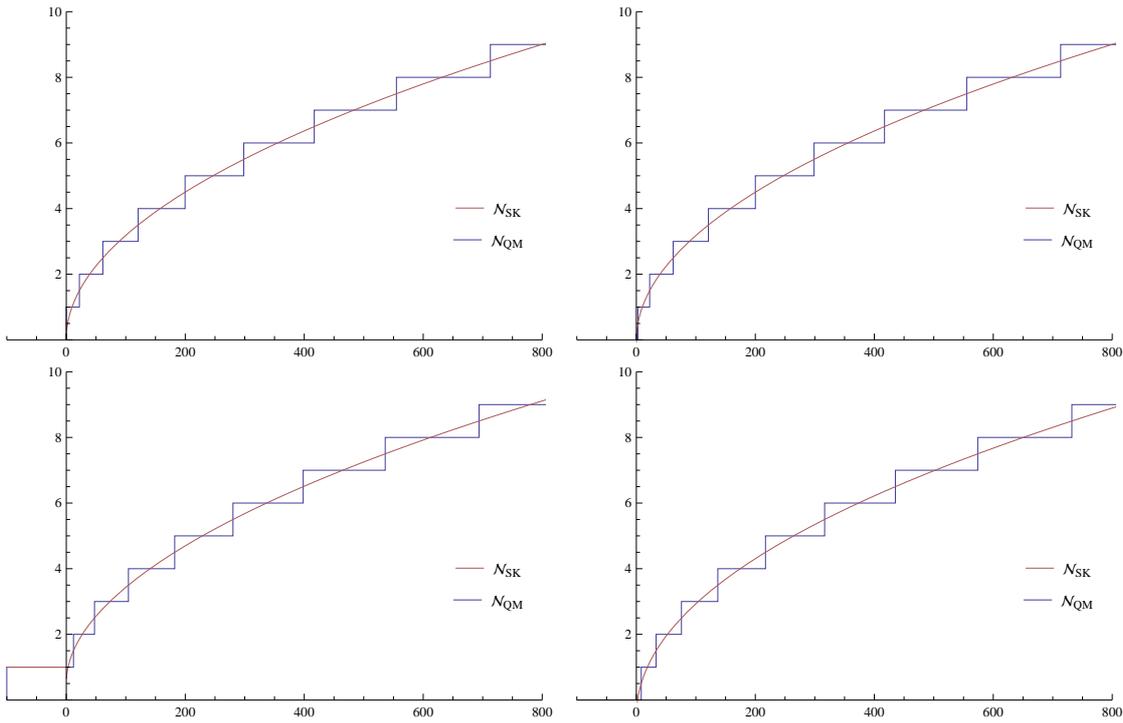


Abbildung 6: Vergleich der Zählfunktionen \mathcal{N}_{QM} und \mathcal{N}_{SK} . Oben links: $\kappa = -0, 1$. Oben rechts: $\kappa = 0, 1$. Unten links: $\kappa = -10$. Unten rechts: $\kappa = 10$.

4. Zustandsdichte in einer Dimension mit gemischter Randbedingung

E' und κ' mit

$$E = E' \cdot \frac{1}{L^2} = E' \cdot \frac{1}{L^2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)$$
$$\kappa = \kappa' \cdot \frac{1}{L} = \kappa' \cdot \sqrt{\frac{1}{L^2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)}$$

verwendet, d.h. es wird $L = 1$ angenommen (der Strich bei E und κ wird weggelassen). In den Plots in Abb. 6 ist jeweils die quantenmechanische und die semiklassische Zählfunktion für verschiedene Werte von κ zu sehen. In allen Fällen verläuft die semiklassische Version optimal durch ihr quantenmechanisches Äquivalent. Für schwache Wechselwirkung (oben) sind die Plots für das attraktive (links) und das repulsive Potential (rechts) kaum mehr zu unterscheiden und der oben genannte Fehler durch die Verwendung des Zustands mit $E = -\mu$ macht sich nicht bemerkbar. Es zeigt sich, dass er selbst für Werte in der Nähe von $\kappa = -1$ vernachlässigbar ist (im Bild nicht zu sehen). Im Plot unten links ist das Verhalten der Zustandsdichte für das attraktive Potential mit $\kappa = -10$ zu sehen. Die beiden Graphen liegen für negative Energien genau übereinander. Die in der Zustandsdichte auftretenden Delta-Distributionen führen also offensichtlich zu den richtigen Korrekturen in der Zählfunktion, welche für beliebige Energien optimal durch die quantenmechanische Zählfunktion verläuft. Das bestätigt die Gültigkeit der in den Herleitungen gemachten Annahmen. Damit sind alle Grundsteine für die Behandlung des eigentlichen Problems dieser Arbeit gelegt.

5. Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie mit Kontaktwechselwirkung

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Zustandsdichte eines Systems aus zwei bosonischen Teilchen auf einer Linie der Länge L . Die Teilchen unterliegen dabei einer Wechselwirkung in Form eines δ -Potentials. Im ersten Teilabschnitt wird die Zustandsdichte mit Randkorrekturen hergeleitet, wobei größtenteils auf die bisherigen Ergebnisse zurückgegriffen werden kann. Der zweite Teilabschnitt befasst sich mit den Korrekturen von den in der Fundamentalen Domäne auftretenden Ecken. Nach einer kurzen Zusammenfassung und Analyse der Ergebnisse wird im vierten Teilabschnitt die semiklassische mit der quantenmechanischen Zustandsdichte verglichen, welche dort zu diesem Zweck berechnet wird.

5.1. Zustandsdichte mit Randkorrekturen

Gegeben sei ein System aus zwei Bosonen der Masse m auf einer Linie der Länge L mit Dirichlet-Randbedingungen bei $q_{1,2} = 0$ und $q_{1,2} = L$ für die Teilchenkoordinaten (q_1, q_2) . Die Teilchen sollen über ein δ -Potential der Form $U(q_1, q_2) = \beta\delta(q_1 - q_2)$ miteinander wechselwirken. Der Hamiltonoperator für dieses System ist gegeben durch

$$\hat{\mathcal{H}}(q_1, q_2) = -\frac{\partial^2}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial q_2^2} + \beta\delta(q_1 - q_2). \quad (48)$$

Durch den unitären Koordinatenwechsel $x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 - q_2)$, $x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 + q_2)$ wird dieser zu

$$\hat{\mathcal{H}}(x_1, x_2) = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \alpha\delta(x_1), \quad (49)$$

wobei $\alpha = \frac{\beta}{\sqrt{2}}$ gilt. Für eine unendlich lange Linie können die beiden Koordinaten unabhängig voneinander betrachtet werden. Der Propagator ist dann gegeben durch das Produkt aus dem freien Propagator und dem Propagator für ein Delta-Potential. Da es sich bei den Teilchen um Bosonen handelt, muss der Propagator entsprechend (19) auf den symmetrischen Unterraum projiziert werden. Für zwei Teilchen besteht die Gruppe der Permutationen nur aus der Identität und einer Transposition, welche die Vertauschung der Koordinaten der beiden Teilchen bewirkt. Diese Vertauschung entspricht in den neuen Koordinaten einem Vorzeichenwechsel in x_1 . Der symmetrische Propagator für das unbeschränkte System ist damit gegeben durch

$$K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = K_\delta^+(x'_1, x_1, t)K_0(x'_2, x_2, t) \quad (50)$$

mit dem bereits bekannten symmetrischen Propagator für eine Delta-Barriere

$$K_\delta^+(x', x, t) = \frac{1}{2}K_0(x', x, t) + \frac{1}{2}K_0(-x', x, t) + K_\kappa(x', x, t). \quad (51)$$

Von diesem Propagator muss nun unter Berücksichtigung der Beschränkung des Systems die Spur (über den gesamten Konfigurationsraum) gebildet und anschließend die Inverse

5. Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie mit Kontaktwechselwirkung

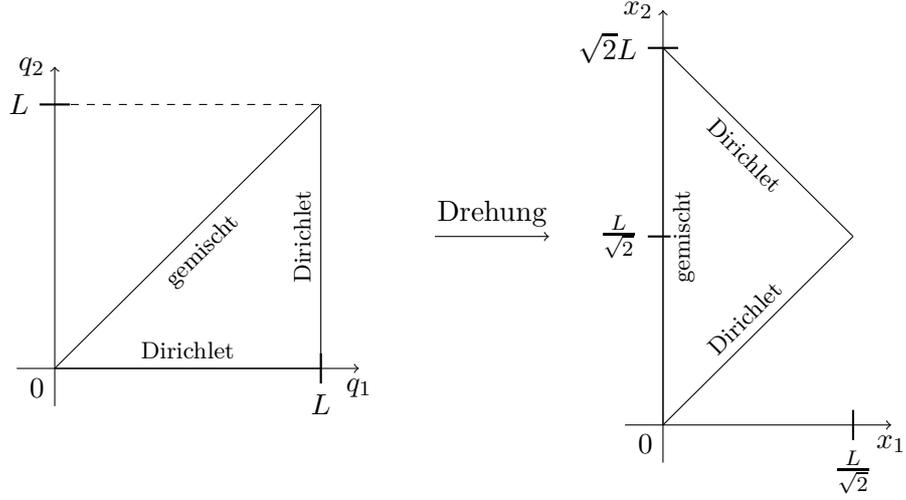


Abbildung 7: Fundamentale Domäne \mathcal{F}_2 mit Randbedingungen für zwei wechselwirkende Teilchen auf einer Linie. Die Wechselwirkung wird durch die gemischte Randbedingung auf der Winkelhalbierenden realisiert. Durch eine Drehung der Koordinatenachsen erhält man das System rechts.

Laplace-Transformation bezüglich $\beta = \frac{i}{\hbar}t$ berechnet werden. Jedoch bietet sich auch eine andere (anschaulichere) Vorgehensweise an: Beschränkt man sich bei der Spurbildung auf die Fundamentale Domäne \mathcal{F}_2 , so muss obiger Propagator verdoppelt werden. Der Propagator wird dadurch zu

$$K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = K_0(x'_1, x_1, t)K_0(x'_2, x_2, t) + K_R(x'_1, x_1, t)K_0(x'_2, x_2, t). \quad (52)$$

Das ist aber genau der freie Propagator in zwei Dimensionen mit einer Randkorrektur für eine gemischte Randbedingung bei $x_1 = 0$. Wie im nicht-wechselwirkenden Fall (vgl. letzter Absatz in 2.5) ist das System aus zwei Bosonen auf einer Linie deshalb äquivalent zu einem einzelnen (Quasi-)Teilchen in der Fundamentalen Domäne, wobei bei $q_1 = q_2$ bzw. $x_1 = 0$ nun die gemischte Randbedingung (42) gelten muss. (vgl. Abb. 7). Dabei wurden die Dirichlet-Randbedingung an den Rändern noch nicht berücksichtigt. Diese entsprechen den Physikalischen Enden der Linie und können separat behandelt werden. Die Spur des zweiten Summanden in (52) kann nun als das Produkt der Spur des eindimensionalen freien Propagators und der Spur der gemischten Randkorrektur geschrieben werden, wobei die Länge des Randes mit der gemischten Randbedingung den Wert $\sqrt{2}L$ hat:

$$\begin{aligned} \text{Tr } K_R(x'_1, x_1, t)K_0(x'_2, x_2, t) &= \text{Tr } K_R(x'_1, x_1, t) \cdot \text{Tr } K_0(x'_2, x_2, t) \\ &= \left(-\frac{1}{4} \pm \frac{1}{2}e^{\mu\beta} \text{erfc}(\sqrt{\mu\beta}) + \theta_1^0 e^{\mu\beta} \right) \cdot \frac{\sqrt{2}L}{\sqrt{4\pi\beta}} \end{aligned} \quad (53)$$

5.2. Korrekturen von den Ecken

Der erste Summand in (53) entspricht wieder einer Dirichlet-Randkorrektur, deren Beitrag zur Zustandsdichte bekannt ist. Mit der Identität [1]

$$\mathcal{L}_\beta^{-1}\left[\frac{1}{\sqrt{\beta}}e^{\mu\beta}\operatorname{erfc}(\sqrt{\mu\beta})\right](E) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{\Theta(E)}{\sqrt{E+\mu}}$$

ist der Beitrag des zweiten Summanden in (53) gegeben. Der Faktor $e^{\mu\beta}$ im dritten Summanden von (53) stellt eine Phasenverschiebung dar und bewirkt deshalb eine Verschiebung der Energie um $-\mu$ in der invers Laplace-Transformierten von $\frac{\sqrt{2}L}{\sqrt{4\pi\beta}}$. Die zweidimensionale gemischte Randkorrektur zur Zustandsdichte ist also⁶

$$\rho_R(E) = -\frac{\sqrt{2}L}{8\pi}\frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}} \pm \frac{\sqrt{2}L}{4\pi}\frac{\Theta(E)}{\sqrt{E+\mu}} + \theta_1^0\frac{\sqrt{2}L}{2\pi}\frac{\Theta(E+\mu)}{\sqrt{E+\mu}}. \quad (54)$$

Zusammen mit dem Beitrag der freien Propagation (11) mit $A = \frac{L^2}{2}$ und der Dirichlet-Randkorrektur (14) mit $l = 2L$, ergibt sich die Zustandsdichte für das System aus zwei Bosonen auf einer Linie der Länge L mit δ -artiger Wechselwirkung:

$$\rho(E) = \frac{L^2}{8\pi}\Theta(E) - \frac{(2+\sqrt{2})L}{8\pi}\frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}} \pm \frac{\sqrt{2}L}{4\pi}\frac{\Theta(E)}{\sqrt{E+\mu}} + \theta_1^0\frac{\sqrt{2}L}{2\pi}\frac{\Theta(E+\mu)}{\sqrt{E+\mu}}. \quad (55)$$

Der konstante Summand ist der Beitrag proportional zur Fläche $\frac{L^2}{2}$ der Fundamentaln Domäne, den man durch die Verwendung des freien Propagators erhält. Der zweite Summand ist eine Dirichlet-Randkorrektur proportional zum Umfang $(2+\sqrt{2})L$ von \mathcal{F}_2 . Die gemischte Randbedingung entspricht der Wechselwirkung der beiden Teilchen und muss für $\mu \rightarrow 0$ die Dirichlet-Randbedingung bei $q_1 = q_2$ in eine Neumann-Randbedingung überführen. Das wird durch die letzten beiden Summanden in (55) realisiert, wobei (+) für eine repulsive und (−) für eine attraktive Wechselwirkung steht (entsprechend ist $\theta_1^0 = 0$ für repulsive und $\theta_1^0 = 1$ für attraktive Wechselwirkung).

5.2. Korrekturen von den Ecken

Bei der Berechnung der Randkorrekturen wurde angenommen, dass jeweils alle anderen Ränder effektiv unendlich weit entfernt sind. Das stellt in den meisten Fällen eine gute Näherung dar, jedoch ist diese Annahme bei einer Ecke nicht haltbar. Deshalb sollen nun noch die Korrekturen von den Ecken berechnet werden. In der Fundamentaln Domäne kommen zwei Typen von Ecken vor: eine Ecke, in der zwei Dirichlet-Ränder im rechten Winkel aufeinandertreffen, und zwei Ecken, bei der ein Dirichlet-Rand und ein Rand mit gemischter Randbedingung in einem Winkel von 45° aufeinandertreffen.

Am einfachsten lässt sich die Korrektur der Dirichlet-Dirichlet-Ecke finden. Da die Korrekturen von einer einzelnen Ecke nicht von der restlichen Geometrie des Systems abhängen sollten, wählen wir das System so, dass die Ecke von zwei Halbgeraden gebildet wird. Die Koordinaten sind dann unabhängig voneinander und der Propagator des

⁶Für beliebige Ränder muss $\sqrt{2}L$ durch die Länge dieses Randes ersetzt werden.

5. Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie mit Kontaktwechselwirkung

Systems kann als das Produkt der eindimensionalen Propagatoren geschrieben werden:

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) &= (K_0(x'_1, x_1, t) - K_0(-x'_1, x_1, t))(K_0(x'_2, x_2, t) - K_0(-x'_2, x_2, t)) \\ &= K_0(x'_1, x_1, t)K_0(x'_2, x_2, t) \\ &\quad - K_0(x'_1, x_1, t)K_0(-x'_2, x_2, t) - K_0(-x'_1, x_1, t)K_0(x'_2, x_2, t) \\ &\quad + K_0(-x'_1, x_1, t)K_0(-x'_2, x_2, t). \end{aligned}$$

Nun können die einzelnen Beiträge identifiziert werden: der erste Summand liefert den Beitrag proportional zur Fläche von \mathcal{F}_2 . Die beiden darauffolgenden Summanden liefern genau die Randkorrekturen von den Dirichlet-Rändern. Für die Eckkorrektur muss also nur der letzte Summand betrachtet werden. Von diesem muss die Spur gebildet und vom Ergebnis die inverse Laplace-Transformierte gefunden werden um die Eckkorrektur zur Zustandsdichte zu erhalten:

$$\begin{aligned} \text{Tr}K_0(-x'_1, x_1, t)K_0(-x'_2, x_2, t) &= (\text{Tr}K_0(-x', x, t))^2 = \left(\frac{1}{4}\right)^2 = \frac{1}{16} \\ \Rightarrow \rho_{90^\circ}(E) &= \mathcal{L}_\beta^{-1}\left[\frac{1}{16}\right](E) = \frac{1}{16}\delta(E). \end{aligned} \tag{56}$$

Das ist die Eckkorrektur für eine 90° Dirichlet-Dirichlet-Ecke⁷.

Nun muss entsprechend für die 45° -Ecke vorgegangen werden. Dazu wird der volle Propagator für dieses System benötigt. Betrachtet man zunächst eine 90° -Ecke aus zwei Rändern mit gemischter Randbedingung, so ist der Propagator wieder das Produkt aus zwei einzelnen Propagatoren:

$$K_{90^\circ}(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = (K_0(x'_1, x_1, t) + K_R(x'_1, x_1, t))(K_0(x'_2, x_2, t) + K_R(x'_2, x_2, t)).$$

Um die Randbedingung auf der Diagonalen zu erfüllen muss die Wellenfunktion antisymmetrisch bzgl. $x_1 = x_2$ sein, der Propagator also auf den entsprechenden Unterraum projiziert werden (vgl. Vielteilchenpropagator). Der Propagator für eine 45° -Ecke mit Dirichlet-Randbedingung auf der Geraden $x_1 = x_2$ und einer gemischten Randbedingung auf der x_1 -Achse ist gegeben durch

$$\begin{aligned} K_{45^\circ}(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) &= \frac{1}{2}[K_{90^\circ}((x'_1, x'_2), (x_1, x_2), t) - K_{90^\circ}((x'_2, x'_1), (x_1, x_2), t)] \\ &= \frac{1}{2}[K_0(x'_1, x_1, t)K_0(x'_2, x_2, t) + K_R(x'_1, x_1, t)K_R(x'_2, x_2, t) \\ &\quad + K_0(x'_1, x_1, t)K_R(x'_2, x_2, t) + K_R(x'_1, x_1, t)K_0(x'_2, x_2, t) \\ &\quad - K_0(x'_2, x_1, t)K_0(x'_1, x_2, t) - K_R(x'_2, x_1, t)K_R(x'_1, x_2, t) \\ &\quad - K_0(x'_2, x_1, t)K_R(x'_1, x_2, t) - K_R(x'_2, x_1, t)K_0(x'_1, x_2, t)], \end{aligned} \tag{57}$$

wobei (wenn möglich) die Spurbildung über den gesamten ersten Quadranten erfolgt. Nun wollen wir die Beiträge identifizieren. Bei der Spurbildung gilt $x'_i = x_i$ für $i = 1, 2$. Dadurch können die einzelnen Summanden als Spiegelungen der Koordinaten (x_1, x_2)

⁷Die Betrachtung einer Neumann-Neumann-Ecke liefert genau das gleiche Ergebnis.

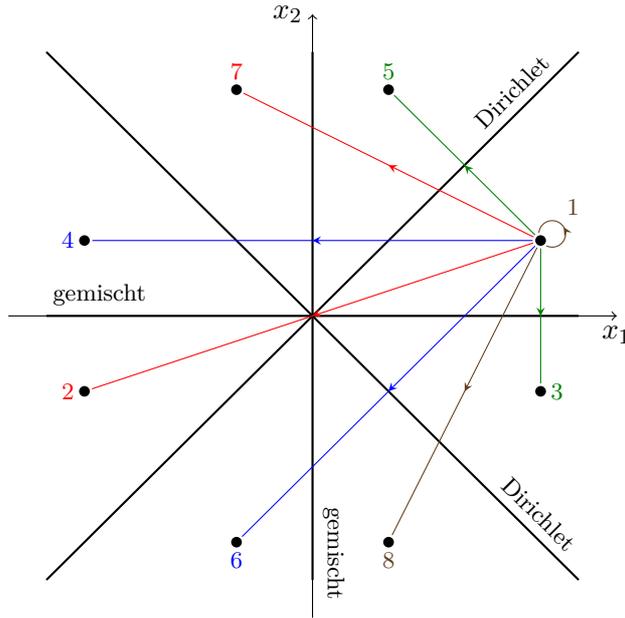


Abbildung 8: Die bei der Spurbildung auftretenden Propagationen entsprechend der einzelnen Summanden im vollen Propagator für die Ecke. Die Endkoordinaten 2 bis 8 entsteht durch (Mehrfach-)Spiegelungen an den vier Geraden.

an den entsprechenden Geraden verstanden werden. In Abb. 8 sind die einzelnen Propagationen zu sehen. Dabei wurden die Summanden in der Reihenfolge ihres Auftretens in (57) nummeriert. Noch anschaulicher ist die äquivalente Darstellung in Abb. 9, aus der ersichtlich wird, dass es sich bei den Trajektorien genau um die klassisch erlaubten geschlossenen Wege handelt. Der erste Summand im Propagator (57) entspricht der Näherung freier Teilchen. Die beiden Summanden in der zweiten Zeile ergänzen sich genau zu der gemischten Randkorrektur (die Koordinaten x_1, x_2 können bei der Spurbildung vertauscht werden). Der zweite Summand in der dritten Zeile enthält den Term $K_0(-x_2, x_1, t)K_0(-x_1, x_2, t)$. Dieser ergänzt sich zusammen mit dem ersten Summanden in der dritten Zeile zu:

$$\begin{aligned} & \text{Tr}[K_0(x'_2, x_1, t)K_0(x'_1, x_2, t) + K_0(-x'_2, x_1, t)K_0(-x'_1, x_2, t)] \\ &= \text{Tr}[K_0(x'_2, x_1, t)^2 + K_0(-x'_2, x_1, t)^2] \\ &= \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 \frac{1}{4\pi\beta} \left\{ e^{-\frac{1}{2\beta}(x_1-x_2)^2} + e^{-\frac{1}{2\beta}(x_1+x_2)^2} \right\}. \end{aligned}$$

Wechselt man nun zu den Koordinaten $q_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), q_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_1)$ so erhält

5. Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie mit Kontaktwechselwirkung

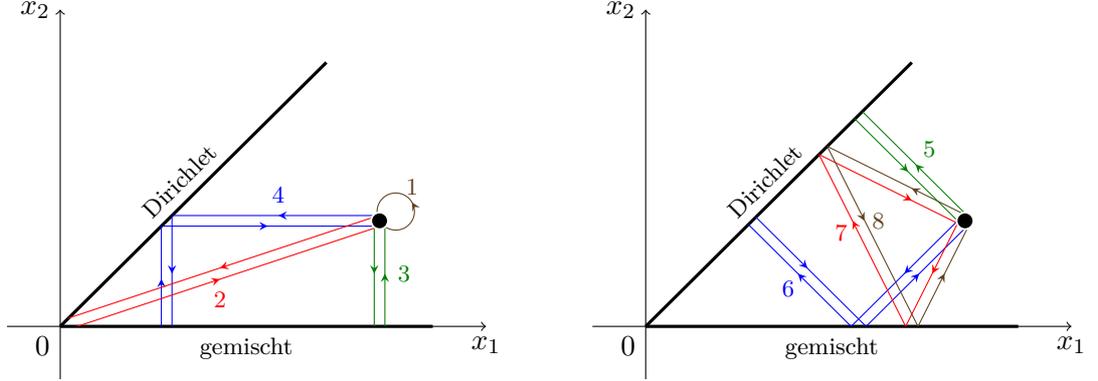


Abbildung 9: Interpretation der bei der Spurbildung auftretenden Propagationen als Reflexionen an den Rändern. Im rechten Bild tritt bei jeder Trajektorie genau eine Spiegelung an einem Dirichlet-Rand auf, was sich im Vorzeichen des entsprechenden Terms im Propagator widerspiegelt.

man als Fortsetzung der Rechnung

$$\begin{aligned}
 \dots &= \int_0^\infty dq_1 \int_{-q_1}^{q_1} dq_2 \frac{1}{4\pi\beta} \left\{ e^{-\frac{1}{\beta}q_1^2} + e^{-\frac{1}{\beta}q_2^2} \right\} \\
 &= 2 \int_0^\infty dq_1 \int_0^{q_1} dq_2 \frac{1}{4\pi\beta} \left\{ e^{-\frac{1}{\beta}q_1^2} + e^{-\frac{1}{\beta}q_2^2} \right\} \\
 &= 2 \int_0^\infty dq_2 \int_{q_2}^\infty dq_1 \frac{1}{4\pi\beta} \left\{ e^{-\frac{1}{\beta}q_1^2} + e^{-\frac{1}{\beta}q_2^2} \right\}.
 \end{aligned}$$

Die letzten beiden Zeilen ergeben addiert die Integration über den gesamten ersten Quadranten, weshalb die Rechnung sich wie folgt fortsetzt:

$$\dots = \int_0^\infty dq_1 \int_0^\infty dq_2 \frac{1}{4\pi\beta} \left\{ e^{-\frac{1}{\beta}q_1^2} + e^{-\frac{1}{\beta}q_2^2} \right\} = 2 \int_0^\infty dq_1 \int_0^\infty dq_2 \frac{1}{4\pi\beta} e^{-\frac{1}{\beta}q_2^2}$$

Unter Berücksichtigung der Beschränkung des Systems erhält man (mit dem weggelassenen Faktor $-\frac{1}{2}$) genau die Spur einer Dirichlet-Randkorrektur. Da damit alle Randkorrekturen identifiziert wurden, müssen alle restlichen Terme in (57) Korrekturen von der Ecke darstellen. Im Detail sind das die folgenden Propagatoren:

- a) $K_a(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) := \frac{1}{2} K_R(x'_1, x_1, t) K_R(x'_2, x_2, t)$
- b) $K_b(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) := -K_0(x'_2, x_1, t) K_R(x'_1, x_2, t)$
- c) $K_c(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) := -\frac{1}{2} [K_R(x'_2, x_1, t) K_R(x'_1, x_2, t) - K_0(-x'_2, x_1, t) K_0(-x'_1, x_2, t)].$

Dabei wurde für Beitrag b) berücksichtigt, dass die beiden Summanden in der letzten Zeile von (57) bei der Spurbildung das gleiche Ergebnis liefern.

Die Beiträge zur Zustandsdichte werden im Folgenden berechnet. Dabei wird die Zeitabhängigkeit des Propagators unterschlagen. Außerdem werden die speziellen Funktionen $\operatorname{erfc}(\cdot)$ und $\operatorname{erf}(\cdot)$ verwendet um die erhaltenen Integrale übersichtlicher schreiben zu können.

Beitrag von a) Bei der Behandlung dieses Terms kann auf bestehende Ergebnisse zurückgegriffen werden. Es gilt

$$\operatorname{Tr} K_a(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \frac{1}{2} [\operatorname{Tr} K_R(x', x)]^2 \quad (58)$$

und die inverse Laplace-Transformation von $\operatorname{Tr} K_R(x', x)$ ist in (44) gegeben. Da die Faltung zweier Funktionen nach der Laplace-Transformation das Produkt der Laplace-Transformierten der beiden Funktionen liefert, kann dieser Beitrag zur Ecke als Faltung berechnet werden:

$$\begin{aligned} (\rho_R * \rho_R)(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} dE' \rho_R(E - E') \rho_R(E') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dE' \left(-\frac{1}{4} \delta(E') \pm \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E'}} \frac{\Theta(E')}{E' + \mu} + \theta_1^0 \delta(E' + \mu) \right) \cdot \\ &\quad \left(-\frac{1}{4} \delta(E - E') \pm \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E - E'}} \frac{\Theta(E - E')}{E - E' + \mu} + \theta_1^0 \delta(E - E' + \mu) \right) \\ &= \frac{1}{16} \delta(E) \mp \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E}} \frac{\Theta(E)}{E + \mu} \\ &\quad + \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \sqrt{\frac{\mu}{E'}} \frac{\mu}{E - E'} \frac{\Theta(E') \Theta(E - E')}{(E' + \mu)(E - E' + \mu)} \\ &\quad + \theta_1^0 \left[\delta(E + 2\mu) - \frac{1}{2} \delta(E + \mu) - \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E + \mu}} \frac{\Theta(E + \mu)}{E + 2\mu} \right]. \end{aligned}$$

Das verbleibende Integral ergibt:

$$\begin{aligned} &\int_0^E dE' \frac{\mu}{\sqrt{E'(E - E')}} \frac{\Theta(E)}{(E' + \mu)(E - E' + \mu)} \\ &= \mu \Theta(E) \int_{-\frac{E}{2}}^{\frac{E}{2}} dE' \frac{1}{\sqrt{(\frac{E}{2})^2 - (E')^2}} \frac{1}{(\frac{E}{2} + \mu)^2 - (E')^2} \\ &= \frac{\mu \Theta(E)}{(\frac{E}{2} + \mu)^2} \int_{-1}^1 dz \frac{1}{\sqrt{1 - z^2}} \frac{1}{1 - \underbrace{\left(\frac{E}{E + 2\mu}\right)^2}_{=: c} z^2} \\ &= \frac{4\mu \Theta(E)}{(E + 2\mu)^2} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \frac{1}{1 - c \sin^2(x)} \\ &= \frac{4\mu \Theta(E)}{(E + 2\mu)^2} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \frac{1}{\cos^2(x)} \frac{1}{1 + (1 - c) \tan^2(x)} = \dots \end{aligned}$$

5. Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie mit Kontaktwechselwirkung

$$\begin{aligned}
\cdots &= \frac{4\mu\Theta(E)}{(E+2\mu)^2} \frac{1}{\sqrt{1-c}} \arctan(\sqrt{1-c}\tan(x)) \Big|_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \\
&= \frac{4\pi\mu}{(E+2\mu)^2} \frac{1}{\sqrt{1-c}} \Theta(E) \\
&= 2\pi \sqrt{\frac{\mu}{E+\mu}} \frac{\Theta(E)}{E+2\mu}.
\end{aligned}$$

Erläuterung: in der dritten Zeile wurde mit $E' = \frac{E}{2}z$ substituiert und im nächsten Schritt mit $z = \sin(x)$. Dann wurde im Nenner die Identität $1 = \cos^2(x) + \sin^2(x)$ ausgenutzt. Die Auswertung an den Intervallgrenzen erfolgt über die Grenzwerte. Damit folgt der erste Beitrag zur Zustandsdichte:

$$\begin{aligned}
\rho_a(E) &:= \mathcal{L}_\beta^{-1} \left[\text{Tr } K_a(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t = -i\hbar\beta) \right] (E) \\
&= \frac{1}{32} \delta(E) \mp \frac{1}{8\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E}} \frac{\Theta(E)}{E+\mu} + \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E+\mu}} \frac{\Theta(E)}{E+2\mu} \\
&\quad + \theta_1^0 \left[\frac{1}{2} \delta(E+2\mu) - \frac{1}{4} \delta(E+\mu) - \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E+\mu}} \frac{\Theta(E+\mu)}{E+2\mu} \right].
\end{aligned} \tag{59}$$

Beitrag von b) Nun muss die Spur von $K_b(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ gefunden werden. Die Spur des Propagators kann wieder einzeln berechnet werden:

$$\text{Tr } K_b(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = -\text{Tr } K_0(x'_2, x_1) K_0(-x'_1, x_2) - 2 \text{Tr } K_0(x'_2, x_1) K_\kappa(x'_1, x_2)$$

Der erste Summand ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
& -\text{Tr } K_0(x'_2, x_1) K_0(-x'_1, x_2) \\
&= -\frac{1}{4\pi\beta} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1-x_2)^2} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+x_2)^2} \\
&= -\frac{1}{4\pi\beta} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 e^{-\frac{1}{2\beta}(x_1^2+x_2^2)} = -\frac{1}{8}
\end{aligned}$$

Beim zweiten Summanden wird der Beitrag des Terms $\theta_1^0 \kappa e^{\mu\beta} e^{-\kappa(x'_1+x_2)}$ in $K_\kappa(x'_1, x_2)$ in eine vorerst nicht weiter spezifizierte Funktion $T_1(\beta)$ integriert:

$$\begin{aligned}
& -2 \text{Tr } K_0(x'_2, x_1) K_\kappa(x'_1, x_2) \\
&= \frac{\kappa}{2\pi\beta} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1-x_2)^2} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+x_2\pm\epsilon)^2} + T_1(\beta) \\
&= \frac{\kappa}{2\pi\beta} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} \int_{\pm\frac{\epsilon}{2}}^\infty dx_1 \int_{\pm\frac{\epsilon}{2}}^\infty dx_2 e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1-x_2)^2} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+x_2)^2} + T_1(\beta) \\
&= \frac{\kappa}{\pi\beta} \int_0^\infty d\epsilon e^{-2\kappa\epsilon} \int_{\pm\epsilon}^\infty dx_1 \int_{\pm\epsilon}^\infty dx_2 e^{-\frac{1}{2\beta}(x_1^2+x_2^2)} + T_1(\beta) \\
&= \frac{\kappa}{2} \int_0^\infty d\epsilon e^{-2\kappa\epsilon} \text{erfc}^2 \left(\pm \frac{\epsilon}{\sqrt{2\beta}} \right) + T_1(\beta) =: I(\beta) + T_1(\beta).
\end{aligned}$$

Das Integral $I(\beta)$ muss nicht weiter vereinfacht werden, da es später mit negativem Vorzeichen auftaucht und insgesamt wegfällt. Tatsächlich wird auch der noch fehlende Teil

$$\begin{aligned} T_1(\beta) &= -2 \operatorname{Tr} \theta_1^0 \kappa e^{\mu\beta} e^{-\kappa(x'_1+x_2)} K_0(x'_2, x_1) \\ &= -\theta_1^0 \frac{\kappa}{\sqrt{\pi\beta}} e^{\mu\beta} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 e^{-\kappa(x_1+x_2)} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1-x_2)^2} \end{aligned}$$

wegfallen. Effektiv trägt K_b also nur mit $-\frac{1}{8}\delta(E)$ zur Zustandsdichte bei.

Beitrag von c) Der in c) gegebene Propagator lautet ausgeschrieben

$$-K_0(-x'_2, x_1)K_\kappa(x'_1, x_2) - K_\kappa(x'_2, x_1)K_0(-x'_1, x_2) - 2K_\kappa(x'_2, x_1)K_\kappa(x'_1, x_2).$$

Die ersten beiden Summanden sind bei der Spurbildung identisch. Deshalb verbleibt effektiv der folgende Propagator:

$$-2K_0(-x'_2, x_1)K_\kappa(x'_1, x_2) - 2K_\kappa(x'_2, x_1)K_\kappa(x'_1, x_2).$$

In den folgenden Rechnungen wird der Term $\theta_1^0 \kappa e^{\mu\beta} e^{-\kappa(x'_1+x_2)}$ in $K_\kappa(x'_1, x_2)$ wieder in eine vorerst nicht weiter spezifizierte Funktion $F_2(\beta)$ integriert. An zwei Stellen werden mit dem einfachen Trick

$$\begin{aligned} (x+a)^2 + (x+b)^2 &= \left(x + \frac{a+b}{2} + \frac{a-b}{2}\right)^2 + \left(x + \frac{a+b}{2} - \frac{a-b}{2}\right)^2 \\ &= 2\left(x + \frac{a+b}{2}\right)^2 + 2\left(\frac{a-b}{2}\right)^2 \end{aligned} \quad (60)$$

die Exponenten umgeschrieben. Die Spur des ersten Summanden berechnet sich wie folgt:

$$\begin{aligned} &\operatorname{Tr}[-2K_0(-x'_2, x_1)K_\kappa(x'_1, x_2)] \\ &= \frac{\kappa}{2\pi\beta} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+x_2)^2} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+x_2\pm\epsilon)^2} + T_2(\beta) \\ &= \frac{\kappa}{2\pi\beta} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{\epsilon^2}{8\beta}} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 e^{-\frac{1}{2\beta}(x_1+x_2\pm\frac{\epsilon}{2})^2} + T_2(\beta) \\ &= \frac{\kappa}{\pi\beta} \int_0^\infty d\epsilon e^{-2\kappa\epsilon} e^{-\frac{\epsilon^2}{2\beta}} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 e^{-\frac{1}{2\beta}(x_1+x_2\pm\epsilon)^2} + T_2(\beta) \\ &= \frac{\kappa}{\sqrt{2\pi\beta}} \int_0^\infty d\epsilon e^{-2\kappa\epsilon} e^{-\frac{\epsilon^2}{2\beta}} \int_0^\infty dx \operatorname{erfc}\left(\frac{x\pm\epsilon}{\sqrt{2\beta}}\right) + T_2(\beta) =: J(\beta) + T_2(\beta). \end{aligned}$$

Eine weitere Vereinfachung dieses Integrals ist nicht notwendig, da es im zweiten Teil von K_c mit negativem Vorzeichen auftritt. Der dabei noch nicht behandelte Teil ist:

$$\begin{aligned} T_2(\beta) &= -2 \operatorname{Tr} \theta_1^0 e^{\mu\beta} e^{-\kappa(x'_1+x_2)} K_0(-x'_2, x_1) \\ &= -\theta_1^0 \frac{\kappa}{\sqrt{\pi\beta}} e^{\mu\beta} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 e^{-\kappa(x_1+x_2)} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+x_2)^2}. \end{aligned}$$

5. Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie mit Kontaktwechselwirkung

Auch dieser wird später wegfallen. Nun fehlt nur noch die Spur des zweiten Summanden von $K_c(\mathbf{x}', \mathbf{x})$. Dazu wird zuerst der Integrand vereinfacht, wobei alle θ_1^0 -Terme in K_κ eine Funktion $t_3(x_1, x_2, \beta)$ integriert werden:

$$\begin{aligned}
& K_\kappa(x_2, x_1)K_\kappa(x_1, x_2) \\
&= \frac{\kappa^2}{4\pi\beta} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+x_2\pm\epsilon)^2} \int_0^\infty d\epsilon' e^{-\kappa\epsilon'} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+x_2\pm\epsilon')^2} + t_3(x_1, x_2, \beta) \\
&= \frac{\kappa^2}{4\pi\beta} \int_0^\infty d\epsilon \int_0^\infty d\epsilon' e^{-\kappa(\epsilon+\epsilon')} e^{-\frac{1}{8\beta}(\epsilon-\epsilon')^2} e^{-\frac{1}{2\beta}(x_1+x_2\pm\frac{\epsilon+\epsilon'}{2})^2} + t_3(x_1, x_2, \beta) \\
&= \frac{\kappa^2}{2\pi\beta} \int_0^\infty dr \int_{-r}^r dr' e^{-2\kappa r} e^{-\frac{1}{2\beta}(r')^2} e^{-\frac{1}{2\beta}(x_1+x_2\pm r)^2} + t_3(x_1, x_2, \beta) \\
&= \frac{\kappa^2}{\sqrt{2\pi\beta}} \int_0^\infty dr e^{-2\kappa r} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) e^{-\frac{1}{2\beta}(x_1+x_2\pm r)^2} + t_3(x_1, x_2, \beta).
\end{aligned}$$

Im dritten Schritt wurde die Transformation $(r, r') = (\frac{\epsilon+\epsilon'}{2}, \frac{\epsilon-\epsilon'}{2})$ mit der Funktionaldeterminante $\frac{1}{2}$ benutzt und im letzten Schritt die Symmetrie des Integranden bezüglich r' ausgenutzt. Mit der Definition $T_3(\beta) := \operatorname{Tr} t_3(x_1, x_2, \beta)$ kann die Spur nun durch partielle Integration vereinfacht werden:

$$\begin{aligned}
& \operatorname{Tr}[-2K_\kappa(x_2', x_1)K_\kappa(x_1', x_2)] - T_3(\beta) \\
&= -\frac{2\kappa^2}{\sqrt{2\pi\beta}} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 \int_0^\infty dr e^{-2\kappa r} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) e^{-\frac{1}{2\beta}(x_1+x_2\pm r)^2} \\
&= -\kappa^2 \int_0^\infty dx \int_0^\infty dr e^{-2\kappa r} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x\pm r}{\sqrt{2\beta}}\right) \\
&= \frac{\kappa}{2} \int_0^\infty dx \underbrace{\left[e^{-2\kappa r} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x\pm r}{\sqrt{2\beta}}\right) \right]_0^\infty}_{=0} \\
&\quad - \frac{\kappa}{\sqrt{2\pi\beta}} \int_0^\infty dx \int_0^\infty dr e^{-2\kappa r} \left(e^{-\frac{1}{2\beta}r^2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x\pm r}{\sqrt{2\beta}}\right) \mp e^{-\frac{1}{2\beta}(x\pm r)^2} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) \right) \\
&= -J(\beta) \pm \frac{\kappa}{\sqrt{2\pi\beta}} \int_0^\infty dx \int_0^\infty dr e^{-2\kappa r} e^{-\frac{1}{2\beta}(x\pm r)^2} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) \\
&= -J(\beta) + \frac{\kappa}{2} \int_0^\infty dr e^{-2\kappa r} \operatorname{erfc}\left(\pm\frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) \operatorname{erf}\left(\pm\frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) \\
&= -J(\beta) + \frac{\kappa}{2} \int_0^\infty dr e^{-2\kappa r} \operatorname{erfc}\left(\pm\frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) \left[1 - \operatorname{erfc}\left(\pm\frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) \right] \\
&= -J(\beta) - I(\beta) + \frac{\kappa}{2} \int_0^\infty dr e^{-2\kappa r} \operatorname{erfc}\left(\pm\frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right).
\end{aligned}$$

Wie angekündigt treten die Integrale $I(\beta)$ und $J(\beta)$ also einmal mit negativem und einmal mit positivem Vorzeichen auf, so dass sie sich insgesamt aufheben. Das verbleibende

Integral kann durch eine partielle Integration berechnet werden:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\kappa}{2} \int_0^\infty dr e^{-2\kappa r} \operatorname{erfc}\left(\pm \frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) \\
 &= -\frac{1}{4} \left[e^{-2\kappa r} \operatorname{erfc}\left(\pm \frac{r}{\sqrt{2\beta}}\right) \right]_0^\infty \mp \frac{1}{2\sqrt{2\pi\beta}} \int_0^\infty dr e^{-2\kappa r} e^{-\frac{1}{2\beta}r^2} \\
 &= \frac{1}{4} \mp \frac{1}{4} e^{2\mu\beta} \operatorname{erfc}(\sqrt{2\mu\beta})
 \end{aligned}$$

Nun müssen noch die Beiträge des bisher weggelassenen Teils $T_3(\beta)$ bestimmt werden:

$$\begin{aligned}
 T_3(\beta) &= \theta_1^0 \frac{2\kappa^2}{\sqrt{\pi\beta}} e^{\mu\beta} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 e^{-\kappa(x_1+x_2)} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+x_2-\epsilon)^2} \\
 &\quad - 2(\theta_1^0)^2 \kappa^2 e^{2\mu\beta} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 e^{-2\kappa(x_1+x_2)} \\
 &= \theta_1^0 \frac{2\kappa^2}{\sqrt{\pi\beta}} e^{\mu\beta} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa(x_1+x_2+\epsilon)} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+x_2-\epsilon)^2} - \theta_1^0 \frac{1}{2} e^{2\mu\beta} \\
 &= \theta_1^0 \frac{\kappa^2}{\sqrt{\pi\beta}} e^{\mu\beta} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dr \int_{-r}^r dr' e^{-\kappa(x_1+r)} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+r')^2} - \theta_1^0 \frac{1}{2} e^{2\mu\beta} \\
 &= -\theta_1^0 \frac{\kappa}{\sqrt{\pi\beta}} e^{\mu\beta} \int_0^\infty dx_1 \underbrace{\left[e^{-\kappa(x_1+r)} \int_{-r}^r dr' e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+r')^2} \right]_0^\infty}_{=0} \\
 &\quad + \theta_1^0 \frac{\kappa}{\sqrt{\pi\beta}} e^{\mu\beta} \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dr e^{-\kappa(x_1+r)} \left(e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+r)^2} + e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1-r)^2} \right) - \theta_1^0 \frac{1}{2} e^{2\mu\beta} \\
 &= -T_1(\beta) - T_2(\beta) - \theta_1^0 \frac{1}{2} e^{2\mu\beta}.
 \end{aligned}$$

Diese beiden Integrale $T_1(\beta)$ und $T_2(\beta)$ sind bereits mit umgekehrtem Vorzeichen aufgetreten und fallen deshalb weg. Da die meisten Beiträge von $\operatorname{Tr} K_b(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ und $\operatorname{Tr} K_c(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ sich in der Summe aufheben ist ihr gemeinsamer Beitrag zur Zustandsdichte lediglich

$$\begin{aligned}
 \rho_{b,c}(E) &:= \mathcal{L}_\beta^{-1} \left[-\frac{1}{8} + \frac{1}{4} \mp \frac{1}{4} e^{2\mu\beta} \operatorname{erfc}(\sqrt{2\mu\beta}) - \theta_1^0 \frac{1}{2} e^{2\mu\beta} \right] (E) \\
 &= \frac{1}{8} \delta(E) \mp \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{2\mu}{E}} \frac{\Theta(E)}{E+2\mu} - \theta_1^0 \frac{1}{2} \delta(E+2\mu).
 \end{aligned} \tag{61}$$

Der gesamte Beitrag einer 45° -Ecke mit einer Dirichlet-Randbedingung auf dem einen und einer gemischten Randbedingung auf dem anderen Schenkel ist durch die Summe von (59) und (61) gegeben:

$$\begin{aligned}
 \rho_{45^\circ} &= \frac{5}{32} \delta(E) \mp \frac{1}{8\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E}} \frac{\Theta(E)}{E+\mu} \mp \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{2\mu}{E}} \frac{\Theta(E)}{E+2\mu} + \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E+\mu}} \frac{\Theta(E)}{E+2\mu} \\
 &\quad - \theta_1^0 \left[\frac{1}{4} \delta(E+\mu) + \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E+\mu}} \frac{\Theta(E+\mu)}{E+2\mu} \right].
 \end{aligned} \tag{62}$$

5.3. Zusammenfassung und Analyse

Die gesamte Zustandsdichte setzt sich zusammen aus der Zustandsdichte mit Randkorrekturen (55) und den Korrekturen von zwei 45°-Ecken der Form (62), sowie der Korrektur einer 90° Dirichlet-Dirichlet-Ecke (56). Die gesamte Zustandsdichte mit Rand- und Eckkorrekturen ist also

$$\begin{aligned} \rho(E) = & \frac{L^2}{8\pi} \Theta(E) - \frac{(2 + \sqrt{2})L}{8\pi} \frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}} \pm \frac{\sqrt{2}L}{4\pi} \frac{\Theta(E)}{\sqrt{E + \mu}} + \theta_1^0 \frac{\sqrt{2}L}{2\pi} \frac{\Theta(E + \mu)}{\sqrt{E + \mu}} \\ & + \frac{3}{8} \delta(E) \mp \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E}} \frac{\Theta(E)}{E + \mu} \mp \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2\mu}{E}} \frac{\Theta(E)}{E + 2\mu} + \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E + \mu}} \frac{\Theta(E)}{E + 2\mu} \\ & - \theta_1^0 \left[\frac{1}{2} \delta(E + \mu) + \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E + \mu}} \frac{\Theta(E + \mu)}{E + 2\mu} \right]. \end{aligned} \quad (63)$$

Für $E > 0$ kann diese Formel stark vereinfacht werden, da in diesem Fall die δ -Distributionen weggelassen werden können und $\Theta(E) = \Theta(E + \mu) = 1$ gilt:

$$\begin{aligned} \rho_+(E) = & \frac{L^2}{8\pi} - \frac{(2 + \sqrt{2})L}{8\pi} \frac{1}{\sqrt{E}} + \frac{\sqrt{2}L}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{E + \mu}} \\ & \mp \left[\frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E}} \frac{1}{E + \mu} + \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2\mu}{E}} \frac{1}{E + 2\mu} - \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E + \mu}} \frac{1}{E + 2\mu} \right]. \end{aligned} \quad (64)$$

Für $E > 0$ stimmen die Zustandsdichten für das attraktive und das repulsive Potential also bis auf das Vorzeichen der Eckkorrekturen überein. Aus der hergeleiteten Zustandsdichte können nun auch die Zustandsdichten von nicht wechselwirkenden Bosonen und Fermionen mit Eckkorrekturen aus den Grenzfällen bestimmt werden. Für $\kappa \rightarrow \infty$ verschwinden alle μ -abhängigen Terme und man erhält übereinstimmend mit [6] die Zustandsdichte von zwei nicht-wechselwirkenden Fermionen auf einer Linie der Länge L (D für Dirichlet)

$$\rho_D = \frac{L^2}{8\pi} \Theta(E) - \frac{(2 + \sqrt{2})L}{8\pi} \frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}} + \frac{3}{8} \delta(E).$$

Für $\mu \rightarrow 0$ bilden alle Summanden in den Eckkorrekturen bis auf Vorfaktoren Dirac-Folgen. Diese Faktoren können durch Integration über \mathbb{R} gefunden werden. Der Grenzwert für $\mu \rightarrow 0$ existiert im Sinne von δ -Distributionen und ist gegeben durch

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \rho_{45^\circ}(E) = \frac{5}{32} \delta(E) \mp \frac{1}{8} \delta(E) \mp \frac{1}{4} \delta(E) + \frac{1}{8} \delta(E) - \theta_1^0 \left[\frac{1}{4} \delta(E) + \frac{1}{2} \delta(E) \right] = -\frac{3}{32} \delta(E).$$

Die Zustandsdichte für das System aus zwei Bosonen ohne Wechselwirkung ist deshalb gegeben durch (N für Neumann)

$$\rho_N(E) = \frac{L^2}{8\pi} \Theta(E) - \frac{(2 - \sqrt{2})L}{8\pi} \frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}} - \frac{1}{8} \delta(E).$$

Im Falle einer starken attraktiven Wechselwirkung ($\kappa < 0$) muss die Zustandsdichte relativ zur Energie $E = -\mu$ betrachtet werden. Im Grenzfall überleben nur zwei Summanden:

$$\lim_{\substack{\mu \rightarrow \infty \\ \kappa < 0}} \rho(E^* - \mu) = \frac{\sqrt{2}L}{2\pi} \frac{\Theta(E^*)}{\sqrt{E^*}} - \frac{1}{2}\delta(E^*) = \frac{L}{2\pi} \sqrt{\frac{4m}{\hbar^2}} \frac{\Theta(E^*)}{\sqrt{E^*}} - \frac{1}{2}\delta(E^*).$$

Dabei ist $E^* = E + \mu$ die Anregungsenergie relativ zu $E = -\mu$ (der Grundzustand liegt etwas oberhalb von $-\mu$). Im zweiten Schritt wurde der weggelassene Faktor $\frac{\hbar^2}{2m}$ wieder eingeführt um zu verdeutlichen, dass das Ergebnis lediglich die Zustandsdichte eines Teilchens der Masse $2m$ auf einer Linie der Länge L (mit Dirichlet-Randkorrekturen) ist. Die Teilchen verhalten sich also im Grenzfall $\kappa \rightarrow -\infty$ wie ein einziges Teilchen doppelter Masse. Im Falle endlicher negativer Werte von κ ist die Zustandsdichte im Bereich $-\mu \leq E < 0$ relativ zu $E = -\mu$ gegeben durch

$$\rho_-(E^* - \mu) = \frac{\sqrt{2}L}{2\pi} \frac{\Theta(E^*)}{\sqrt{E^*}} - \frac{1}{2}\delta(E^*) - \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E^*}} \frac{\Theta(E^*)}{E^* + \mu}.$$

Der letzte Summand ist der Einfluss der Wechselwirkung der zwei aneinander gebundenen Bosonen. Er ähnelt einer eindimensionalen Randkorrektur bei gemischten Randbedingungen, allerdings ist eine physikalische Interpretation unter diesem Gesichtspunkt nicht wirklich sinnvoll, da bei einer gemischten Randkorrektur zusätzliche gebundene Zustände der Form $\delta(E^* + \mu)$ auftreten würden. Fest steht, dass die beiden hinteren Summanden aus dem Zusammenspiel der Wechselwirkung und der Ränder entsteht, da sie aus den Eckkorrekturen resultieren. Die Dirichlet-Randkorrekturen müssen also für die gebundenen Zweiteilchen-Zustände gemäß

$$-\frac{1}{4}\delta(E^*) \rightarrow -\frac{1}{4}\delta(E^*) - \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E^*}} \frac{\Theta(E^*)}{E^* + \mu}$$

ersetzt werden. Es ist jedoch fraglich, ob sich für höhere Teilchenzahlen bzw. höhere Dimensionen ähnliche Ersetzungsregeln ergeben.

Für spätere Betrachtungen wird nun noch das analytische Verhalten der Eckkorrekturen betrachtet. Der Beitrag der 45°-Ecke ist für $E > 0$ gegeben durch

$$\rho_{45^\circ}(E) = \mp \left(\frac{1}{8\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E}} \frac{1}{E + \mu} + \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{2\mu}{E}} \frac{1}{E + 2\mu} - \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E + \mu}} \frac{1}{E + 2\mu} \right).$$

Der Ausdruck in der Klammer ist für alle Werte von $E > 0$ positiv und streng monoton fallend: der erste Summand erfüllt diese Eigenschaften schon, d.h. es müssen nur die zwei hinteren Summanden betrachtet werden. Für diese gilt

$$\frac{1}{4\pi} \frac{1}{E + 2\mu} \left(\sqrt{\frac{2\mu}{E}} - \sqrt{\frac{\mu}{E + \mu}} \right) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{E + 2\mu} \frac{\sqrt{2\mu E + 2\mu^2} - \sqrt{\mu E}}{\sqrt{E(E + \mu)}} > 0.$$

Beim differenzieren nach E kehren sich alle Vorzeichen um und man erhält für diesen Fall vollkommen analog $\rho'_{45^\circ}(E) > 0$ für $\kappa > 0$ und $\rho'_{45^\circ}(E) < 0$ für $\kappa < 0$. Berücksichtigt man nun noch, dass die Eckkorrekturen für $E \rightarrow \infty$ verschwinden, so wird ersichtlich, dass ihr Einfluss in der Nähe des Grundzustands ($\kappa \geq 0$) bzw. in der Nähe von $E = 0$ ($\kappa < 0$) maximal ist.

5. Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie mit Kontaktwechselwirkung

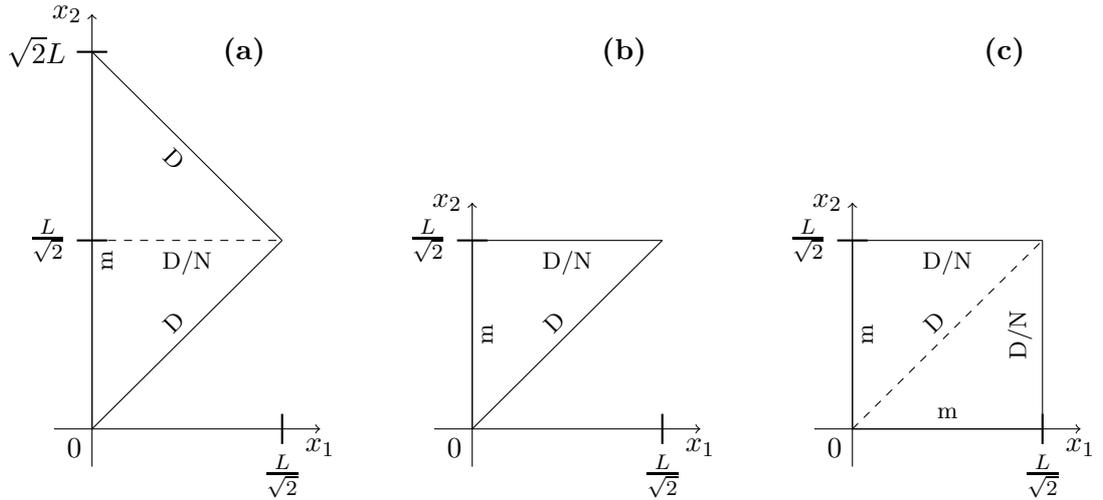


Abbildung 10: **(a)** Fundamentale Domäne in den Koordinaten $x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 - q_2)$, $x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 + q_2)$. Sie ist symmetrisch bzgl. der Geraden $x_2 = \frac{L}{\sqrt{2}}$ (gestrichelte Linie). **(b)** Halbe fundamentale Domäne für die Fälle einer Dirichlet- (\mathcal{D}) und einer Neumann-Randbedingung (\mathcal{N}) bei $x_2 = \frac{L}{\sqrt{2}}$. **(c)** Verdoppeltes System symmetrisch bzgl. der diagonalen $x_1 = x_2$.

5.4. Vergleich mit den quantenmechanischen Lösungen

Nun sollen die hergeleiteten Zustandsdichten mit der exakten quantenmechanischen Zustandsdichte verglichen werden. Dazu müssen zuerst die quantenmechanischen Lösungen für das System gefunden werden. Oben wurde gezeigt, dass das System aus zwei Bosonen auf einer Linie (bis auf Normierung) äquivalent zu einem einzelnen (Quasi)Teilchen in der fundamentalen Domäne \mathcal{F}_2 mit gemischten Randbedingungen auf der Hypotenuse und Dirichlet-Randbedingungen auf den Katheten ist (vgl. Abb. 10 a). Die Koordinaten x_1 und x_2 werden wie im ersten Teilabschnitt 5 definiert. Da die fundamentale Domäne symmetrisch bezüglich der Geraden $x_2 = \frac{L}{\sqrt{2}}$ ist, müssen die Lösungen entweder symmetrisch oder antisymmetrisch bezüglich dieser Geraden sein. Das bedeutet, dass bei $x_2 = \frac{L}{\sqrt{2}}$ entweder eine Neumann-Randbedingung oder eine Dirichlet-Randbedingung gelten muss. Es reicht also aus, die Lösungen der Systeme in Abb. 10(b) zu finden, wobei die Lösungen auf $\frac{1}{2}$ normiert werden müssen. Äquivalent zur Dirichlet-Randbedingung bei $x_1 = x_2$ können nun nur die bzgl. Koordinatenvertauschung antisymmetrischen Lösungen des an $x_1 = x_2$ gespiegelten Systems 10(c) betrachtet werden (Normierung auf 1). Die Lösungen von 10(c) können durch einen Separationsansatz als die Produkte der eindimensionalen Lösungen geschrieben werden. Für den Fall einer Dirichlet-Randbedingung sind diese aus (3.1) bekannt und für diesen Fall mit $d := \frac{L}{\sqrt{2}}$ gegeben

5.4. Vergleich mit den quantenmechanischen Lösungen

durch

$$\begin{aligned}\psi_n^D(x) &= \sqrt{\frac{2}{d}} \left(1 - \frac{\sin(2k_n d)}{2k_n d}\right)^{-\frac{1}{2}} \sin(k_n(|x| - d)), \\ k_n &= -\kappa \tan(k_n d), \quad k_n d \in \left(n\pi - \frac{\pi}{2}, n\pi + \frac{\pi}{2}\right).\end{aligned}\tag{65}$$

Außerdem gibt es für $\kappa d \in (-1, 0)$ eine weitere Lösung $\psi_0^D(x)$ dieser Form mit $k_0 d \in (0, \frac{\pi}{2})$ und für $\kappa d \in (-\infty, -1)$ eine Lösung der Form

$$\begin{aligned}\psi_0^D &= \sqrt{\frac{2}{d}} \left(\frac{\sinh(2k_0 d)}{2k_0 d} - 1\right)^{-\frac{1}{2}} \sinh(k_0(|x| - d)), \\ k_0 &= -\kappa \tanh(k_0 d).\end{aligned}\tag{66}$$

Vollkommen analog findet man für den Fall einer Neumann-Randbedingung die eindimensionalen Lösungen

$$\begin{aligned}\psi_n^N &= \sqrt{\frac{2}{d}} \left(1 + \frac{\sin(2k_n d)}{2k_n d}\right)^{-\frac{1}{2}} \cos(k_n(|x| - d)), \\ k_n &= \kappa \cot(k_n d) = -\kappa \tan(k_n d + \frac{\pi}{2}), \quad k_n d \in \left(n\pi - \frac{\pi}{2}, n\pi + \frac{\pi}{2}\right).\end{aligned}\tag{67}$$

Außerdem gibt es für $\kappa < 0$ eine weitere Lösung (unabhängig vom Betrag von κd)

$$\begin{aligned}\psi_0^N &= \sqrt{\frac{2}{d}} \left(\frac{\sinh(2k_0 d)}{2k_0 d} + 1\right)^{-\frac{1}{2}} \cosh(k_0(|x| - d)), \\ k_0 &= -\kappa \coth(k_0 d).\end{aligned}\tag{68}$$

Sei nun K^D die Menge der erlaubten Wellenzahlen k_n in den eindimensionalen Lösungen (65) und (66) mit Dirichlet-Randbedingung und K^N die Menge der erlaubten Wellenzahlen in (67) und (68) mit Neumann-Randbedingungen, wobei die Wellenzahlen der hyperbolischen Lösungen (66) und (68) jeweils als ik_0 vertreten sein sollen (ihr Quadrat also negativ ist). Dann sind die Lösungen des gesamten Systems gegeben durch

$$\begin{aligned}\psi_{mn}^D &= \frac{1}{2} \left[\psi_m^D(x_1)\psi_n^D(x_2) - \psi_m^D(x_2)\psi_n^D(x_1) \right], \quad k_m, k_n \in K^D, \quad m < n, \\ \psi_{mn}^N &= \frac{1}{2} \left[\psi_m^N(x_1)\psi_n^N(x_2) - \psi_m^N(x_2)\psi_n^N(x_1) \right], \quad k_m, k_n \in K^N, \quad m < n.\end{aligned}\tag{69}$$

Die Einschränkung $m < n$ ist notwendig, da das Vertauschen der Werte von m und n keine weiteren linear unabhängigen Wellenfunktionen liefert und diese für $m = n$ verschwindet. Außerdem wurden die Wellenfunktionen auf den gesamten Konfigurationsraum $[0, L] \times [0, L]$ normiert. Für die (globale) Zustandsdichte ist die Wellenfunktion selbst nicht relevant, sondern nur die erlaubten Energien. Diese setzen sich zusammen aus allen Kombinationen $k_m^2 + k_n^2$ mit $k_m, k_n \in K^D, m < n$ sowie allen Kombinationen $k_m^2 + k_n^2$ mit $k_m, k_n \in K^N, m < n$. Diese müssen numerisch berechnet werden. In Anhang

5. Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie mit Kontaktwechselwirkung

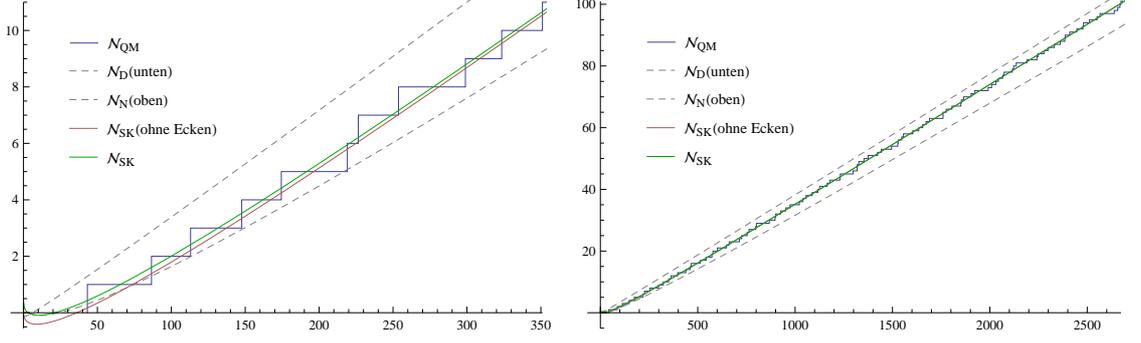


Abbildung 11: Plots für $\kappa = 20$. Im linken Bild sind die ersten 10 quantenmechanischen Zustände abgedeckt, im rechten die ersten 100. Die Korrekturen von den Ecken spielen bei hohen Energien eine untergeordnete Rolle.

A.2 ist dazu eine effiziente Möglichkeit vorgestellt, die für die Plots auch Anwendung gefunden hat.

Der Vergleich der exakten Zustandsdichte mit der semiklassisch genäherten erfolgt wieder über die Zählfunktion \mathcal{N} . Diese ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{\text{SK}}(E) &= \int_{-\infty}^E dE' \rho(E') \\ &= \left[\frac{L^2}{8\pi} E - \frac{(2 + \sqrt{2})L}{4\pi} \sqrt{E} \pm \frac{\sqrt{2}L}{2\pi} (\sqrt{E + \mu} - \sqrt{\mu}) \right] \Theta(E) \\ &\quad + \theta_1^0 \frac{\sqrt{2}L}{\pi} \sqrt{E + \mu} \cdot \Theta(E + \mu) + \mathcal{N}_{\text{Ecken}}(E). \end{aligned}$$

Die Korrekturen von den Ecken liefern die Zählfunktion

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{\text{Ecken}}(E) &= \left[\frac{3}{8} \mp \frac{1}{2\pi} \arctan \sqrt{\frac{E}{\mu}} \mp \frac{1}{\pi} \arctan \sqrt{\frac{E}{2\mu}} + \frac{1}{\pi} \left(\arctan \sqrt{\frac{E}{\mu} + 1} - \frac{\pi}{4} \right) \right] \Theta(E) \\ &\quad - \theta_1^0 \left[\frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \arctan \sqrt{\frac{E}{\mu} + 1} \right] \Theta(E + \mu). \end{aligned}$$

Analog wie in Abschnitt 4.3 wird nun wieder $L = 1$ und somit $d = \frac{1}{\sqrt{2}}$ angenommen.

Zuerst wird die repulsive Wechselwirkung betrachtet, d.h. es gilt $\kappa > 0$. In Abb. 11 sind die Plots für $\kappa = 20$ (also insbesondere $\kappa > 0$) zu sehen. Die semiklassische Zählfunktion mit Eckkorrekturen \mathcal{N}_{SK} verläuft optimal durch die exakte Zählfunktion. Für hohe Energien spielen die Eckkorrekturen eine untergeordnete Rolle. Das war zu erwarten, da die Funktion $\mathcal{N}_{\text{Ecken}}$ aufgrund ihrer Monotonie auf das Intervall $[-\frac{1}{8}, \frac{3}{8}]$ beschränkt ist. Für Energien in der Nähe des Grundzustands liefern sie aber eine relevante Korrektur. Im Plot sind auch die Grenzfälle verschwindender Wechselwirkung ($\kappa \rightarrow 0$, Neumann-Randbedingung bei $q_1 = q_2$) und starker Wechselwirkung ($\kappa \rightarrow \infty$, Dirichlet-Randbedingung bei $q_1 = q_2$) mit Eckkorrekturen eingezeichnet (gestrichelte Linien). Für

5.4. Vergleich mit den quantenmechanischen Lösungen

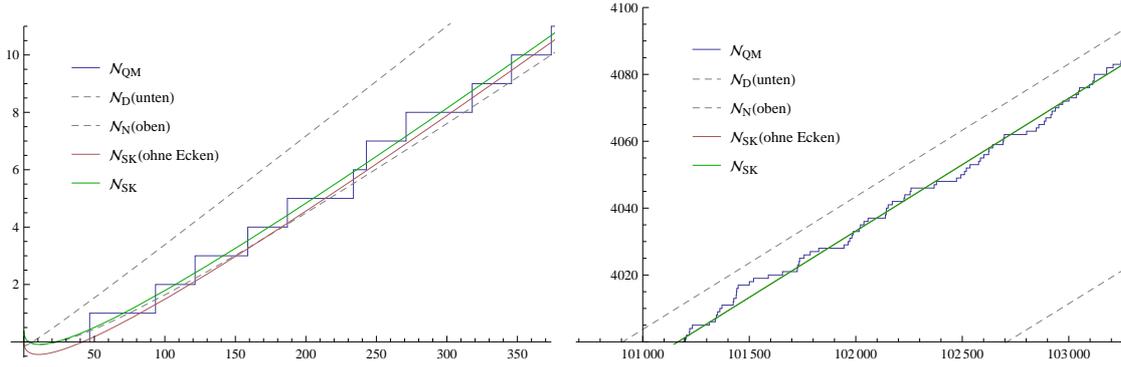


Abbildung 12: Plots für $\kappa = 50$. Links: für kleine Energien nähert sich die Zählfunktion dem fermionischen Fall an, d.h. die Wechselwirkung wirkt sich sehr stark aus. Rechts: bei hohen Energien (Anregungen 4000 bis 4100) ist der Graph bereits näher am nicht-wechselwirkenden Fall.

niedrige Energien nähert sich der Graph dem stark wechselwirkenden Fall an. Das bedeutet, dass hier die repulsive Wechselwirkung eine große Rolle spielt. Dagegen verhalten sich die Teilchen für ausreichend große Energien $E \gg \mu$ wie nicht-wechselwirkende Bosonen. Im Plot für $\kappa = 50$ in Abb. 12 ist diese Tendenz schon deutlich zu erkennen. Dort sind die ersten 10 Zustände sowie ein Ausschnitt von 100 Zuständen bei höherer Energie zu sehen. Im rechten Plot mit hohen Anregungen fallen die Zählfunktionen mit und ohne Eckkorrekturen zusammen, weshalb diese vernachlässigt werden können, bzw. durch die Eckkorrekturen für $\kappa \rightarrow 0$ ersetzt werden können, was eine konstante Verschiebung der Zählfunktion bewirkt. Obwohl in Abb. 12 im rechten Plot lediglich $E \approx 4\mu$ gilt, liegt die Zählfunktion schon nahe an dem wechselwirkungsfreien Grenzfall.

Nun soll noch untersucht werden, wie sich die Wechselwirkung auf die Grundzustandsenergie auswirkt. Diese ist gegeben durch $E_0 = k_1^2 + k_2^2$ mit $k_1, k_2 \in K^N$. Aus den Bestimmungsgleichungen in (67) lassen sich die Grenzfälle $E_0 = 2\pi^2 \approx 19,7$ für $\kappa \rightarrow 0$ und $E_0 = 2((\frac{\pi}{2})^2 + (\frac{3\pi}{2})^2) \approx 49,3$ für $\kappa \rightarrow \infty$ extrahieren. In Abb. 13 ist links der Verlauf der Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von κ zu sehen. Rechts davon ist die Funktion

$$\rho_r : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+, \quad \rho_r(\kappa) := \left| \frac{\rho_{\text{Ecken}}(E_0(\kappa), \kappa)}{\rho(E_0(\kappa), \kappa)} \right| \quad (70)$$

aufgetragen, d.h. der relative Beitrag der Eckkorrekturen zur gesamten Zustandsdichte bei der Grundzustandsenergie, welche wiederum von κ abhängig ist. Das zweite Argument in den Zustandsdichten innerhalb der Betragsstriche soll verdeutlichen, dass diese über $\mu = \kappa^2$ für beliebige Energien auch als Funktion von κ aufgefasst werden können. Die Funktion $\rho_r(\kappa)$ besitzt ein globales Maximum⁸ bei $\kappa_0 \approx 5,814$ mit dem Wert $\rho_r(\kappa_0) \approx 8,019\%$. Dieser Wert entspricht ziemlich genau der Lösung von $E_0(\kappa) = \kappa^2$, welche durch $\kappa'_0 \approx 5,871$ gegeben ist (linker Plot). Der Fehler in der Zustandsdichte

⁸Das gilt nur, weil die Funktion $\rho_r(\kappa)$ für $\kappa < 0$ nicht definiert wurde. In diesem Fall gäbe es bei $\kappa \approx -3.3$ einen Pol, da dann $E_0 = 0$ gilt (siehe weiter unten im Text).

5. Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie mit Kontaktwechselwirkung

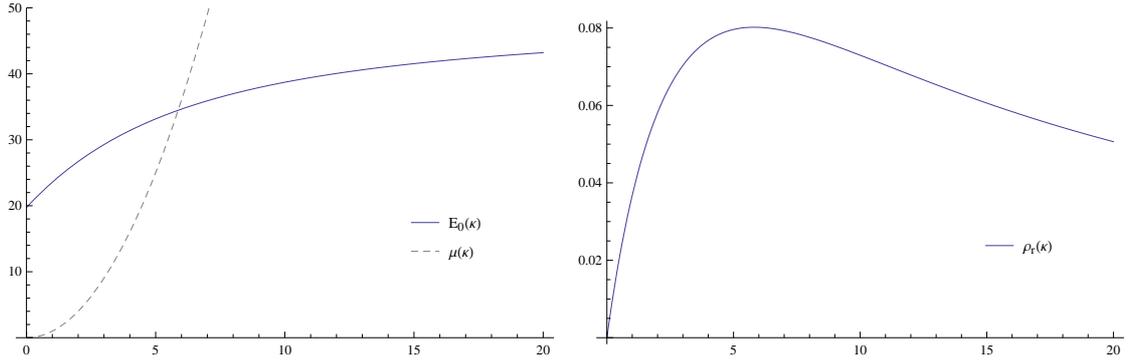


Abbildung 13: Links: Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von κ . Rechts: relativer Beitrag der Eckkorrekturen im Vergleich zur gesamten Zustandsdichte in Abhängigkeit von κ bei $E = E_0$.

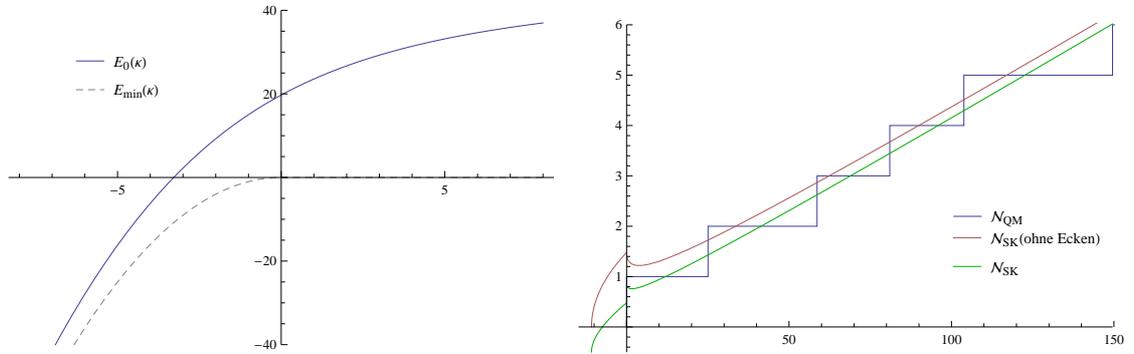


Abbildung 14: Links: Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von κ . Bei ca. $\kappa_1 = -3,286$ findet ein Vorzeichenwechsel statt. Rechts: Zustandsdichten für den kritischen Wert κ_1

te durch das Weglassen der Eckkorrekturen ist demnach beim Grundzustand dann am größten, wenn für diesen $E_0 \approx \mu$ gilt. Der Fehler beträgt dann ca. 8%. Da die Korrekturen von den Ecken für gegebenes $\kappa > 0$ negativ und streng monoton steigend sind, ist der Fehler bei allen Energien $E > E_0$ kleiner.

Im Falle einer attraktiven Wechselwirkung erhält man abhängig vom Betrag von κ zusätzlich gebundene Zustände. Für $E > 0$ unterscheiden sich die Eckkorrekturen nur durch das Vorzeichen, d.h. für ausreichend hohe Energien sind diese vernachlässigbar (bzw. können durch die Korrekturen ohne Wechselwirkung ersetzt werden). Falls der Grundzustand jedoch ein gebundener Zustand ist, so könnte die Divergenz bei $E = 0$ Probleme bereiten. In Abb. 14 ist die Grundzustandsenergie E_0 in Abhängigkeit von κ im Intervall $[-8, 8]$ zu sehen. Bei ca. $\kappa_1 = -3,286$ ist der kritische Punkt, an dem der Grundzustand das Vorzeichen wechselt. Im selben Plot ist die Funktion $E_{\min}(\kappa) := -\mu(\kappa)\Theta(-\kappa)$ eingezeichnet. Sie gibt die untere Grenze der für die semiklassische Zählfunktion relevanten

5.4. Vergleich mit den quantenmechanischen Lösungen

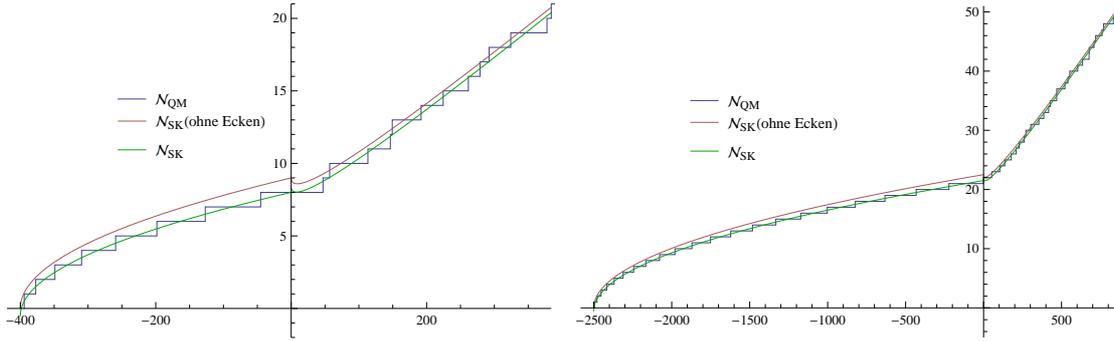


Abbildung 15: Zählfunktionen für $\kappa = -20$ (links) und $\kappa = -50$ (rechts). Für $E < 0$ ist die Ähnlichkeit zu der Zählfunktion für ein einzelnes Teilchen deutlich zu erkennen.

ten Energie an, d.h. für $\kappa \geq 0$ immer $E_{\min} = 0$, für $\kappa < 0$ $E_{\min} = -\kappa^2$. Für $\kappa \ll \kappa_1$ ist der Grundzustand näherungsweise durch $E_0 = E_{\min}(\kappa)$ gegeben. Im rechten Plot ist die Zählfunktion für den kritischen Fall $\kappa = \kappa_1$ zu sehen. Der Fehler bei negativen Energien resultiert genau aus der Abweichung von E_{\min} von der Grundzustandsenergie. Allerdings zeigt der Graph auch, dass genau dieser Bereich eine Abschätzung der Zustandsdichte bei $E = 0$ zulässt, da diese beim linksseitigen Grenzwert $E \rightarrow 0^-$ im Gegensatz zum rechtsseitigen endlich ist. Auch in der Zählfunktion, die bei $E = 0$ nicht stetig ist, bietet es sich an, den linksseitigen Grenzwert zu verwenden. Für kleinere Werte von κ treten die vorausgesagten gebundenen Zustände auf.

In Abb. 15 sind die Zählfunktionen für $\kappa = -20$ (links) und $\kappa = -50$ (rechts) zu sehen. Der Sprung bei $E = 0$ wird in der Zählfunktion vernachlässigbar, jedoch divergiert die Zustandsdichte an dieser Stelle nach wie vor. Als Näherung bietet sich deshalb wieder die Verwendung des linksseitigen Grenzwertes an. Für ausreichend kleine Werte von κ (genauer für $\kappa < \frac{-2}{(\sqrt{2}-1)}$) ist der so für die Zustandsdichte gewonnene Grenzwert kleiner als der Volumenterm in der Zustandsdichte. Beachtet man, dass diese monoton steigend ist (positive Krümmung im Plot), so kann der für die Zustandsdichte kritische Bereich überbrückt werden, indem diese als konstant angenommen wird, bis die Formel für $\rho(E)$ diese durch den linksseitigen Grenzwert gegebene Konstante überschreitet. In der Zählfunktion ist das nicht notwendig, da der Sprung bei $E = 0$ vernachlässigbar ist. In den beiden Plots ist zu sehen, dass die Korrekturen von den Ecken für negative Energien nicht zu vernachlässigen sind, solange die Anzahl der gebundenen Zustände klein ist, da sie die Zählfunktion bei $E = 0^-$ unabhängig von κ genau um den Wert Eins verringern. Das heißt, dass beim Weglassen der Eckkorrekturen ein gebundener Zustand zu viel gezählt wird. Wie bei den Grenzwerten gesehen wurde, unterscheidet sich die mittlere Zustandsdichte nur aufgrund dieser Eckkorrekturen von der eines einzelnen Teilchen mit doppelter Masse. Unter diesem Gesichtspunkt erscheint der absolute Fehler von genau einem Zustand in der Zählfunktion als eher gering. Als letztes bleibt noch zu bemerken, dass die Abschätzung $E_0 \approx -\mu$ in den beiden Plots (15) bereits relativ gut ist.

6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie

In diesem Abschnitt soll für das im vorhergehenden Kapitel betrachtete System die lokale Zustandsdichte für eine repulsive δ -Wechselwirkung hergeleitet werden. Diese beinhaltet zusätzlich zur Information über das Spektrum auch Informationen über die Wahrscheinlichkeit, in einem bestimmten Intervall ein Teilchen anzutreffen. Dazu wird zuerst die exakte quantenmechanische lokale Zustandsdichte berechnet und im Anschluss das semiklassische Pendant über den Propagator hergeleitet. Die Teilchendichte ist mit der lokalen Zustandsdichte eng verwandt und wird zum Vergleich der quantenmechanischen und der semiklassischen Ergebnisse herangezogen.

6.1. Quantenmechanische lokale Zustandsdichte

Die quantenmechanischen Wellenfunktionen wurden im Abschnitt 5.4 hergeleitet und sind für $\kappa \geq 0$ gegeben durch

$$\begin{aligned}\psi_{mn}^{D/N}(x_1, x_2) &= \frac{1}{2} \left[\psi_m^{D/N}(x_1) \psi_n^{D/N}(x_2) - \psi_n^{D/N}(x_1) \psi_m^{D/N}(x_2) \right], \\ \psi_n^D(x) &= \sqrt{\frac{2}{d}} \left(1 - \frac{\sin(2k_n d)}{2k_n d} \right)^{-\frac{1}{2}} \sin(k_n(|x| - d)), \quad \tan(k_n d) = -\frac{k_n}{\kappa}, \\ \psi_n^N(x) &= \sqrt{\frac{2}{d}} \left(1 + \frac{\sin(2k_n d)}{2k_n d} \right)^{-\frac{1}{2}} \cos(k_n(|x| - d)), \quad \cot(k_n d) = \frac{k_n}{\kappa}.\end{aligned}$$

Dabei gilt $x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 - q_2)$ und $x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2)$ mit den physikalischen Koordinaten (q_1, q_2) sowie $L = \sqrt{2}d$. Der Übersicht halber wird ab hier $(q_1, q_2) = (x, y)$ geschrieben. Die Integration erfolgt über y . Die Indizierungen D bzw. N werden nun weggelassen. Die Unterscheidung erfolgt an geeigneter Stelle durch verschiedene Vorzeichen. Die Wellenfunktionen müssen als Funktion der physikalischen Koordinaten geschrieben werden:

$$\begin{aligned}\psi_{mn}(x, y) &= A [\vartheta_{mn}(x, y) - \vartheta_{nm}(x, y)], \\ \vartheta_{mn}(x, y) &= \begin{cases} \sin\left(k_m\left(\frac{|x-y|}{\sqrt{2}} - d\right)\right) \sin\left(k_n\left(\frac{|x+y|}{\sqrt{2}} - d\right)\right) & \text{Dirichlet} \\ \cos\left(k_m\left(\frac{|x-y|}{\sqrt{2}} - d\right)\right) \cos\left(k_n\left(\frac{|x+y|}{\sqrt{2}} - d\right)\right) & \text{Neumann,} \end{cases} \\ A &= \frac{1}{d} \left[\left(1 \mp \frac{\sin(2k_m d)}{2k_m d} \right) \left(1 \mp \frac{\sin(2k_n d)}{2k_n d} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}.\end{aligned}$$

Bei der Normierungskonstante A gilt das obere Zeichen für die Dirichlet-Lösung und das untere Zeichen für die Neumann-Lösung. Diese Konvention ist für den Rest dieses Abschnitts gültig. Nun muss über das Betragsquadrat der Wellenfunktionen bzgl. y integriert werden. Um dies zu vereinfachen, können zwei Symmetrieeigenschaften von ψ_{mn} verwendet werden. Aus Abb. 10 wird sofort ersichtlich, dass $\psi_{mn}(x, y) = \psi_{mn}(y, x)$ gelten muss. Außerdem gilt aufgrund der Dirichlet- bzw. Neumann-Randbedingung bei $x_2 = d \Leftrightarrow x + y = L$ auch $\psi_{mn}(x, y) = \mp \psi_{mn}(L - y, L - x)$. Es gibt noch viele weitere Symmetrien, jedoch werden nur diese beiden benötigt. Für die Teilchendichte gilt nun

6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie

nach Abschnitt 2.6

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}n_{mn}(x) &= \int_0^L dy \psi_{mn}^2(x, y) = \int_0^x dy \psi_{mn}^2(x, y) + \int_x^L dy \psi_{mn}^2(L-x, L-y) \\ &= \int_0^x dy \psi_{mn}^2(x, y) + \int_0^{L-x} dz \psi_{mn}^2(L-x, z). \end{aligned}$$

In der zweiten Zeile wurde $L-y = z$ substituiert sowie die Integrationsgrenzen vertauscht. Dies zeigt, dass nur das erste Integral explizit berechnet werden muss und das zweite daraus direkt durch die Ersetzung $x \rightarrow L-x$ berechnet werden kann. Bei der Berechnung des ersten Integrals können die Beträge einfach weggelassen werden. Der häufig auftretende Faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ wird nun in k_n und κ integriert: mit $g_n := \frac{k_n}{\sqrt{2}}$ und $\gamma := \frac{\kappa}{\sqrt{2}}$ vereinfachen sich die Argumente der auftretenden trigonometrischen Funktionen und die Bestimmungsgleichungen für die Wellenzahlen zu

$$k_n \left(\frac{x \mp y}{\sqrt{2}} - d \right) = g_n (x \mp y - L), \quad \tan(g_n L) = -\frac{g_n}{\gamma}, \quad \cot(g_n L) = \frac{g_n}{\gamma}.$$

Mit Hilfe von

$$\sin(a) \sin(b) = \frac{1}{2}(\cos(a-b) - \cos(a+b)), \quad \cos(a) \cos(b) = \frac{1}{2}(\cos(a-b) + \cos(a+b))$$

kann der Integrand $(\vartheta_{mn}(x, y) - \vartheta_{nm}(x, y))^2$ auf elementare Trigonometrische Funktionen reduziert werden. Dabei unterscheiden sich die Integrale über die quadratischen Terme ϑ_{mn}^2 und ϑ_{nm}^2 lediglich in der Reihenfolge von m und n , müssen also nicht beide berechnet werden. Die skizzierten Rechnungen erfordern lediglich sorgfältige Arbeit und werden hier nicht angeführt. Insgesamt erhält man

$$\begin{aligned} n_{mn}(x) &= \\ &= \frac{A^2}{4} \left\{ 4L \mp 2 \left(\frac{\sin(2g_m L)}{g_m} + \frac{\sin(2g_n L)}{g_n} \right) \right. \\ &\quad + \frac{g_n}{g_m^2 - g_n^2} \left[\sin(4g_m x - 2(g_m + g_n)L) - \sin(4g_m x - 2(g_m - g_n)L) \right] \\ &\quad + \frac{g_m}{g_n^2 - g_m^2} \left[\sin(4g_n x - 2(g_n + g_m)L) - \sin(4g_n x - 2(g_n - g_m)L) \right] \\ &\quad - 4x \cos(2g_m(L-x)) \cos(2g_n(L-x)) - 4(L-x) \cos(2g_m x) \cos(2g_n x) \\ &\quad \pm \frac{2}{g_m} \left[\cos(2g_n(L-x)) \sin(2g_m x) + \cos(2g_n x) \sin(2g_m(L-x)) \right] \\ &\quad \pm \frac{2}{g_n} \left[\cos(2g_m(L-x)) \sin(2g_n x) + \cos(2g_m x) \sin(2g_n(L-x)) \right] \\ &\quad - \frac{1}{g_m + g_n} \left[\sin(2(g_m + g_n)x) + \sin(2(g_m + g_n)(L-x)) \right] \\ &\quad \left. - \frac{1}{g_m - g_n} \left[\sin(2(g_m - g_n)x) + \sin(2(g_m - g_n)(L-x)) \right] \right\}. \end{aligned}$$

6.2. Semiklassische lokale Zustandsdichte

Dieses Ergebnis ist etwas unhandlich. Es empfiehlt sich die Teilchendichte $n_{mn}(x)$ aufgrund ihrer Symmetrie bezüglich $x = \frac{L}{2}$ relativ zu diesem Punkt zu betrachten, d.h. man betrachtet $n_{mn}(x + \frac{L}{2})$. Nach dieser Substitution können die Additionstheoreme für die trigonometrischen Funktionen verwendet werden, um die verbleibenden Terme auf einfache Sinus- und Kosinus-Funktionen zu reduzieren. Als Ergebnis erhält man für die Teilchendichte mit $y = x - \frac{L}{2}$

$$n_{mn} \left(y + \frac{L}{2} \right) = C \cdot \left\{ \begin{aligned} &a_0 + a_1 \cos(2g_m y) + a_2 \cos(2g_n y) \\ &+ a_3 \cos \left(2(g_n - g_m)y \right) + a_4 \cos \left(2(g_n + g_m)y \right) \\ &+ y \left[a_5 \sin \left(2(g_n - g_m)y \right) + a_6 \sin \left(2(g_n + g_m)y \right) \right] \end{aligned} \right\}$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} a_0 &= 2 \left[L \mp \left(\frac{s_m c_m}{g_m} + \frac{s_n c_n}{g_n} \right) \right], & a_1 &= -2 \frac{g_m s_m t_m}{g_n^2 - g_m^2}, & a_2 &= 2 \frac{g_n s_n t_n}{g_n^2 - g_m^2}, \\ a_3 &= -L(c_m c_n + s_m s_n) - \frac{1}{g_n - g_m}(c_m s_n - s_m c_n) \pm \frac{g_n + g_m}{g_m g_n}(s_m c_n + c_m s_n), \\ a_4 &= -L(c_m c_n - s_m s_n) - \frac{1}{g_n + g_m}(c_m s_n + s_m c_n) \pm \frac{g_n - g_m}{g_m g_n}(s_m c_n - c_m s_n), \\ a_5 &= -2(c_m s_n - s_m c_n), & a_6 &= -2(c_m s_n + s_m c_n), \\ C &= \frac{A^2}{2} = \frac{1}{L^2} \left[\left(1 \mp \frac{s_m c_m}{g_m L} \right) \left(1 \mp \frac{s_n c_n}{g_n L} \right) \right]^{-1}. \end{aligned}$$

Die Konstanten s_n und c_n sind gegeben durch

$$\begin{aligned} s_n = \sin(g_n L) &= \begin{cases} (-1)^n \frac{\gamma}{\sqrt{g_n^2 + \gamma^2}} & \text{Dirichlet} \\ (-1)^{n+1} \frac{g_n}{\sqrt{g_n^2 + \gamma^2}} & \text{Neumann,} \end{cases} \\ c_n = \cos(g_n L) &= \begin{cases} (-1)^{n+1} \frac{g_n}{\sqrt{g_n^2 + \gamma^2}} & \text{Dirichlet} \\ (-1)^{n+1} \frac{\gamma}{\sqrt{g_n^2 + \gamma^2}} & \text{Neumann.} \end{cases} \end{aligned}$$

Nun kann auch die Zustandsdichte direkt angegeben werden:

$$\rho_{\text{exakt}}(x, E) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m < n \\ \text{Dir. \& Neu.}}} \delta(E - E_{mn}) n_{mn}(x), \quad (71)$$

6.2. Semiklassische lokale Zustandsdichte

Um die semiklassisch genäherte lokale Zustandsdichte zu erhalten muss der Propagator für das gesamte System aufgestellt werden und eine Koordinate über die Länge

6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie

L integriert werden. Das Ergebnis muss symmetrisch bezüglich $x = \frac{L}{2}$ sein, jedoch kann angenommen werden, dass das Verhalten in der Nähe eines Randes nicht vom gegenüberliegenden Rand beeinflusst wird. Deshalb wird im Propagator nur einer der physikalischen Ränder berücksichtigt. Das Ergebnis ist dann nicht mehr symmetrisch, sollte aber in der Nähe des Rands gute Vorhersagen machen. Der Propagator für zwei Bosonen auf einer Halbgeraden mit einer Dirichlet-Randbedingung bei $x = 0$ muss die folgenden Eigenschaften haben: er muss bezüglich Koordinatenvertauschung die gemischte Randbedingung bei $q_1 = q_2$ repräsentieren, sowie die Dirichlet-Randbedingungen bei $q_1 = 0$ und $q_2 = 0$ erfüllen. Der Propagator kann nun ähnlich konstruiert werden wie der Propagator für die Ecke in Abschnitt 5.2. Man betrachtet die Koordinaten $x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 - q_2)$, $x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 + q_2)$ und stellt den Propagator ohne die Dirichlet-Randbedingungen auf als das Produkt der auf den symmetrischen Unterraum projizierten Propagatoren für ein Delta-Potential (ohne Zeitabhängigkeit)

$$K'(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = K_\delta^+(x'_1, x_1)K_\delta^+(x'_2, x_2).$$

Um zusätzlich die Randbedingungen bei $q_1 = 0$, also $x_1 = x_2$, und $q_2 = 0$, also $x_1 = -x_2$, zu erfüllen, wird dieser Propagator noch bezüglich dieser Geraden antisymmetrisiert. Der volle Propagator ist dann

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}', \mathbf{x}) &= K_\delta^+(x'_1, x_1)K_\delta^+(x'_2, x_2) - K_\delta^+(x'_2, x_1)K_\delta^+(x'_1, x_2) \\ &\quad - (K_\delta^+(-x'_2, x_1)K_\delta^+(-x'_1, x_2) - K_\delta^+(-x'_1, x_1)K_\delta^+(-x'_2, x_2)) \\ &= 2K_\delta^+(x'_1, x_1)K_\delta^+(x'_2, x_2) - 2K_\delta^+(x'_2, x_1)K_\delta^+(x'_1, x_2). \end{aligned}$$

Tatsächlich entspricht dieser Propagator genau dem Propagator für die Ecke, jedoch sind in diesem Fall die Koordinaten für die Spurbildung vorgegeben. Ausgeschrieben lautet der Propagator für $x'_1 = x_1$ und $x'_2 = x_2$

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}', \mathbf{x}) &= \frac{1}{2}[K_0(x_1, x_1)K_0(x_2, x_2) + K_0(x_1, x_1)K_0(-x_2, x_2) \\ &\quad + K_0(-x_1, x_1)K_0(x_2, x_2) + K_0(-x_1, x_1)K_0(-x_2, x_2)] \\ &\quad - [K_0(x_1, x_1)K_\kappa(x_2, x_2) + K_\kappa(x_1, x_1)K_0(x_2, x_2) \\ &\quad + K_0(-x_1, x_1)K_\kappa(x_2, x_2) + K_\kappa(x_1, x_1)K_0(-x_2, x_2)] \\ &\quad + 2K_\kappa(x_1, x_1)K_\kappa(x_2, x_2) \\ &\quad - \frac{1}{2}[K_0(x_2, x_1)K_0(x_1, x_2) + K_0(x_2, x_1)K_0(-x_1, x_2) \\ &\quad + K_0(-x_2, x_1)K_0(x_1, x_2) + K_0(-x_2, x_1)K_0(-x_1, x_2)] \\ &\quad + [K_0(x_2, x_1)K_\kappa(x_1, x_2) + K_\kappa(x_2, x_1)K_0(x_1, x_2) \\ &\quad + K_0(-x_2, x_1)K_\kappa(x_1, x_2) + K_\kappa(x_2, x_1)K_0(-x_1, x_2)] \\ &\quad + 2K_\kappa(x_2, x_1)K_\kappa(x_1, x_2). \end{aligned}$$

Die Koordinaten x_1, x_2 werden nun noch durch die tatsächlichen Teilchenpositionen q_1 und q_2 ausgedrückt. Dann muss über eine dieser Koordinaten integriert werden. Als

Integrationsvariable wird q_2 gewählt und für die bessere Übersichtlichkeit wie in Teilabschnitt 6.1 $x = q_1, y = q_2$ geschrieben, d.h. x ist die Variable, die später in der lokalen Zustandsdichte die Ortsabhängigkeit angibt. Wann immer es möglich ist, wird die Integration über y bis Unendlich ausgedehnt. Vorab kann dabei noch eine Vereinfachung vorgenommen werden: die Integration über y erfolgt von 0 bis unendlich (bzw. bis L). Substituiert man im Integral $y \rightarrow -y$ so wird der Integrand an der x -Achse gespiegelt und die Integration erfolgt von $-\infty$ (bzw. $-L$) bis 0. Diese Spiegelung entspricht in den Koordinaten (x_1, x_2) genau der Vertauschung von x_1 und x_2 . Das bedeutet, dass sich zwei Summanden im Propagator, die sich nur durch vertauschte Rollen von x_1 und x_2 unterscheiden, bei der Integration zu einem einzigen Integral über die gesamte reelle Achse (bzw. über $[-L, L]$) zusammenfassen lassen. Auf diese Art können die insgesamt 18 Summanden in obigem Propagator auf 12 reduziert werden. Im Folgenden ist deshalb das Integrationsintervall wahlweise $[-L, L]$ oder $[-\infty, \infty]$. Der wechselwirkungsfreie Anteil des Propagators verkürzt sich zu

$$\begin{aligned}
 K_o(\mathbf{x}, \mathbf{x}) &= \frac{1}{4} [K_0(x_1, x_1)K_0(x_2, x_2) + K_0(-x_1, x_1)K_0(-x_2, x_2) \\
 &\quad + 2K_0(x_1, x_1)K_0(-x_2, x_2) - 2K_0(x_2, x_1)K_0(-x_1, x_2) \\
 &\quad - K_0(x_2, x_1)K_0(x_1, x_2) - K_0(-x_2, x_1)K_0(-x_1, x_2)] \\
 &= \frac{1}{16\pi\beta} [1 + e^{-\frac{1}{2\beta}[(x-y)^2+(x+y)^2]} + 2e^{-\frac{1}{2\beta}(x+y)^2} - 2e^{-\frac{1}{2\beta}(x^2+y^2)} - e^{-\frac{1}{\beta}y^2} - e^{-\frac{1}{\beta}x^2}] \\
 &= \frac{1}{16\pi\beta} [1 + e^{-\frac{1}{\beta}(x^2+y^2)} + 2e^{-\frac{1}{2\beta}(x+y)^2} - 2e^{-\frac{1}{2\beta}(x^2+y^2)} - e^{-\frac{1}{\beta}y^2} - e^{-\frac{1}{\beta}x^2}].
 \end{aligned}$$

Bis auf den ersten und den letzten Summanden kann die Integration bis unendlich ausgedehnt werden. Insgesamt ergibt sich

$$\begin{aligned}
 F(x, \beta) &:= \int_{-\infty}^{\infty} dy K_o(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \\
 &= \frac{L}{8\pi\beta} \left(1 - e^{-\frac{1}{\beta}x^2}\right) + \frac{1}{16} \frac{1}{\sqrt{\pi\beta}} \left(e^{-\frac{1}{\beta}x^2} - 1\right) + \frac{\sqrt{2}}{8} \frac{1}{\sqrt{\pi\beta}} \left(1 - e^{-\frac{1}{2\beta}x^2}\right). \tag{72}
 \end{aligned}$$

Das Integral über die meisten κ -abhängigen Anteile des Propagators lässt sich nicht direkt berechnen, kann jedoch so weit vereinfacht werden, dass nur einfache Integrale verbleiben. Die Beiträge sind im Einzelnen (mit $x'_i = x_i$):

- a) $K_a(\mathbf{x}, \mathbf{x}) := -K_0(x_1, x_1)K_\kappa(x_2, x_2),$
- b) $K_b(\mathbf{x}, \mathbf{x}) := -K_0(-x_1, x_1)K_\kappa(x_2, x_2),$
- c) $K_c(\mathbf{x}, \mathbf{x}) := K_\kappa(x_1, x_1)K_\kappa(x_2, x_2),$
- d) $K_d(\mathbf{x}, \mathbf{x}) := K_0(x_2, x_1)K_\kappa(x_1, x_2),$
- e) $K_e(\mathbf{x}, \mathbf{x}) := K_0(-x_2, x_1)K_\kappa(x_1, x_2),$
- f) $K_f(\mathbf{x}, \mathbf{x}) := -K_\kappa(x_2, x_1)K_\kappa(x_1, x_2).$

6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie

Diese müssen nun nach und nach vereinfacht werden. Dabei fallen genau wie bei den Korrekturen von den Ecken einige der auftretenden Integrale in der Summe weg. Da im Folgenden beim Substituieren in den Integralen des Öfteren bestimmte Vielfache von κ auftreten, werden die Bezeichnungen

$$\lambda := \sqrt{2}\kappa, \quad \gamma := 2\lambda \quad (73)$$

eingeführt (nicht zu verwechseln mit γ aus dem Abschnitt 6.1). Der erste Teil K_a ist Teil einer Randkorrektur von einer gemischten Randbedingung. Dieser lässt sich als einziger direkt integrieren:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dy K_a &= - \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{\kappa}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(\sqrt{2}|x+y|+\epsilon)^2} \\ &= - \frac{\kappa}{4\pi\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(\sqrt{2}|y|+\epsilon)^2} \\ &= - \frac{2\sqrt{2}\kappa}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} dy \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(2y+\epsilon)^2} \\ &= - \sqrt{\frac{2}{\pi\beta}} \text{Tr} K_{\kappa}(y', y) \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi\beta}} \left(\frac{1}{4} e^{\mu\beta} \text{erfc}(\sqrt{\mu\beta}) - \frac{1}{4} \right) =: L(x, \beta) \end{aligned} \quad (74)$$

Tatsächlich ist $L(x, \beta)$ unabhängig von x . Da die gesamte lokale Zustandsdichte für $x = 0$ verschwinden muss, muss dieser Term später für $x = 0$ kompensiert werden. Der zweite Propagator kann mit Hilfe von (60) wie folgt umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dy K_b &= - \frac{\kappa}{4\pi\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{2\beta}(x-y)^2} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(\sqrt{2}|x+y|+\epsilon)^2} \\ &= - \frac{\lambda}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\lambda\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{2\beta}[(2x-y)^2+(|y|+\epsilon)^2]} \\ &= - \frac{\lambda}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\lambda\epsilon} \int_0^{\infty} dy \left\{ e^{-\frac{1}{2\beta}[(y-2x)^2+(y+\epsilon)^2]} + e^{-\frac{1}{2\beta}[(y+2x)^2+(y+\epsilon)^2]} \right\} \\ &= - \frac{\lambda}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\lambda\epsilon} \int_0^{\infty} dy \left\{ e^{-\frac{1}{\beta}[(y+\frac{\epsilon}{2}-x)^2+(\frac{\epsilon}{2}+x)^2]} + e^{-\frac{1}{\beta}[(y+\frac{\epsilon}{2}+x)^2+(\frac{\epsilon}{2}-x)^2]} \right\} \\ &= - \frac{\gamma}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\gamma\epsilon} \left\{ e^{-\frac{1}{\beta}(\epsilon+x)^2} \int_{\epsilon-x}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} + e^{-\frac{1}{\beta}(\epsilon-x)^2} \int_{\epsilon+x}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} \right\} \\ &=: -I_-(x, \beta) - I_+(x, \beta). \end{aligned}$$

Die beiden Integrale

$$I_{\pm}(x, \beta) = \frac{\gamma}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\frac{1}{\beta}(\epsilon\pm x)^2} \int_{\epsilon\mp x}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} \quad (75)$$

treten ähnlich wie bei den Eckkorrekturen später noch einmal mit umgekehrtem Vorzeichen auf und müssen deshalb nicht weiter berechnet werden. Als nächstes soll das

Integral über K_c berechnet werden. Dabei tritt die folgende Fallunterscheidung auf (vgl. Gleichung (60)):

$$(|x-y|+\epsilon)^2+(|x+y|+\epsilon')^2=\begin{cases} 2(y+\frac{\epsilon'+\epsilon}{2})^2+2(x+\frac{\epsilon'-\epsilon}{2}) & y\geq x \\ 2(y+\frac{\epsilon'-\epsilon}{2})^2+2(x+\frac{\epsilon'+\epsilon}{2}) & -x\leq y<x \\ 2(y-\frac{\epsilon'+\epsilon}{2})^2+2(x-\frac{\epsilon'-\epsilon}{2}) & y<-x. \end{cases}$$

Das Integral über K_c ist damit gegeben durch

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dy K_c &= \frac{\kappa^2}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon \int_0^{\infty} d\epsilon' e^{-\kappa(\epsilon+\epsilon')} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{4\beta}[(\sqrt{2}|x-y|+\epsilon)^2+(\sqrt{2}|x+y|+\epsilon')^2]} \\ &= \frac{\lambda^2}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon \int_0^{\infty} d\epsilon' e^{-\lambda(\epsilon+\epsilon')} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{2\beta}[(|x-y|+\epsilon)^2+(|x+y|+\epsilon')^2]} \\ &= \frac{\gamma^2}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon \int_0^{\infty} d\epsilon' e^{-\gamma(\epsilon+\epsilon')} \left\{ \int_x^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}[(y+\epsilon'+\epsilon)^2+(x+\epsilon'-\epsilon)^2]} \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^{-x} dy e^{-\frac{1}{\beta}[(y-(\epsilon'+\epsilon))^2+(x-(\epsilon'-\epsilon))^2]} \right. \\ &\quad \left. + \int_{-x}^x dy e^{-\frac{1}{\beta}[(y+\epsilon'-\epsilon)^2+(x+\epsilon'+\epsilon)^2]} \right\} \\ &= \frac{\gamma^2}{2\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon \int_0^{\infty} d\epsilon' e^{-\gamma(\epsilon+\epsilon')} \left\{ e^{-\frac{1}{\beta}(x+\epsilon'-\epsilon)^2} \int_x^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}(y+\epsilon'+\epsilon)^2} \right. \\ &\quad \left. + e^{-\frac{1}{\beta}(x+\epsilon'+\epsilon)^2} \int_x^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}(y+\epsilon'-\epsilon)^2} \right\}. \quad (76) \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde benutzt, dass ϵ und ϵ' vollkommen gleichberechtigt sind und bei der Substitution $y \rightarrow -y$ vertauscht werden können. Um das Integral weiter zu vereinfachen, kann nun die Transformation $(r, r') = (\epsilon' + \epsilon, \epsilon' - \epsilon)$ mit Funktionaldeterminante $\frac{1}{2}$ benutzt werden. Damit kann der erste Summand in (76) wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} (1. \text{ Summand}) &= \frac{\gamma^2}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} dr \int_{-r}^r dr' e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta}(x+r')} \int_x^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}(y+r)^2} \\ &= \frac{\gamma^2}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} dr e^{-\gamma r} \int_{x+r}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} \int_{-r}^r dr' e^{-\frac{1}{\beta}(x+r')^2} \\ &= \frac{\gamma}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} dr e^{-\gamma r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\int_{x+r}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} \int_{-r}^r dr' e^{-\frac{1}{\beta}(x+r')^2} \right]. \end{aligned}$$

Die Ableitung auf der rechten Seite liefert

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} [\dots] &= \left[e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} + e^{-\frac{1}{\beta}(x-r)^2} \right] \int_{r+x}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} - e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \int_{-r}^r dr' e^{-\frac{1}{\beta}(x+r')^2} \\ &= e^{-\frac{1}{\beta}(r-x)^2} \int_{r+x}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} + e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \underbrace{\left[\int_{x+r}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} - \int_{x-r}^{x+r} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} \right]}_{= \int_{r-x}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} - \int_{-(r+x)}^{r+x} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2}} \\ &= e^{-\frac{1}{\beta}(r-x)^2} \int_{r+x}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} + e^{-\frac{1}{\beta}(r+x)^2} \int_{r-x}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} - 2e^{-\frac{1}{\beta}(r+x)^2} \int_0^{r+x} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2}. \end{aligned}$$

6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie

Die ersten beiden Summanden entsprechen zusammen mit dem noch fehlenden Integral über r genau den beiden Integralen $I_+(x, \beta)$ und $I_-(x, \beta)$ aus (75) und fallen deshalb in der Summe weg. Der erste Summand von (76) ist gegeben durch

$$(1. \text{ Summand}) = I_-(x, \beta) + I_+(x, \beta) \\ = \underbrace{-\frac{\gamma}{2\pi\beta} \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \int_0^{x+r} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2}}_{=: I_1(x, \beta)}. \quad (77)$$

Das verbleibende Integral $I_1(x)$ bleibt vorerst unverändert stehen. Damit muss nur noch der zweite Summand in (76) berechnet werden. Dieser hat die Form

$$(2. \text{ Summand}) = \frac{\gamma^2}{4\pi\beta} \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \int_{-r}^r dr' \int_0^x dy e^{-\frac{1}{\beta}(r'+y)^2} =: H(x, \beta). \quad (78)$$

Das dreifache Integral kann durch partielle Integration im r' -Integral auf eine Summe aus einfachen und doppelten Integralen reduziert werden, jedoch erhalten dabei die meisten dieser Integrale einen zusätzlichen Faktor β , so dass der gesamte Faktor vor dem Integral unabhängig von β ist. Wir werden später sehen, dass man dieses Integral mit einer anderen Herangehensweise so auf einfache Integrale reduzieren kann, dass das Resultat den Ergebnissen der anderen Integrale ähnelt. Deshalb bleibt auch $H(x, \beta)$ vorerst so stehen. Es verbleiben nun noch drei Integrale, die jedoch vergleichsweise einfach zu berechnen sind:

$$\int_{-\infty}^\infty dy K_d = \frac{\kappa}{4\pi\beta} \int_{-\infty}^\infty dy e^{-\frac{1}{2\beta}y^2} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\kappa\epsilon} e^{-\frac{1}{4\beta}(\frac{1}{\sqrt{2}}|x-y| + \frac{1}{\sqrt{2}}|x+y| + \epsilon)^2} \\ = \frac{\lambda}{2\pi\beta} \int_x^\infty dy \int_0^\infty d\epsilon e^{\lambda\epsilon} e^{-\frac{1}{2\beta}[(y+\epsilon)^2 + y^2]} \\ + \frac{\lambda}{2\pi\beta} \int_0^x dy \int_0^\infty d\epsilon e^{-\lambda\epsilon} e^{-\frac{1}{2\beta}[(x+\epsilon)^2 + y^2]} \\ = \frac{\gamma}{2\pi\beta} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\gamma\epsilon} e^{-\frac{1}{\beta}\epsilon^2} \underbrace{\int_{x+\epsilon}^\infty dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2}}_{=: T(x, \beta)} \quad (79)$$

$$+ \underbrace{\frac{\lambda}{2\pi\beta} \int_0^x dy e^{-\frac{1}{2\beta}y^2} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\lambda\epsilon} e^{-\frac{1}{2\beta}(x+\epsilon)^2}}_{=: I_2(x, \beta)} \quad (80)$$

Genauso findet man (nach einmaliger partieller Integration)

$$\int_{-\infty}^\infty dy K_e = G_1(x, \beta) + G_2(x, \beta)$$

mit den einfachen Integralen

$$G_1(x, \beta) := \frac{1}{2\pi\beta} e^{-\frac{1}{2\beta}x^2} \int_x^\infty dy e^{-\frac{1}{2\beta}y^2} \quad (81)$$

$$G_2(x, \beta) := (\lambda x - 1) \frac{1}{2\pi\beta} e^{-\frac{1}{2\beta}x^2} \int_0^\infty d\epsilon e^{-\lambda\epsilon} e^{-\frac{1}{2\beta}(x+\epsilon)^2}. \quad (82)$$

Für $x = 0$ sind das genau die Anteile, die den von x unabhängigen Beitrag (74) von K_a zu Null ergänzen. Beim Integral über K_f geht man genauso vor wie bei dem Integral über K_c , das heißt man benutzt wieder die Transformation $(r, r') = (\epsilon' + \epsilon, \epsilon' - \epsilon)$, jedoch gestaltet sich die Rechnung hier etwas einfacher und führt zu

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy K_f = -T(x, \beta) + I_3(x, \beta)$$

wobei $T(x, \beta)$ das in (79) definierte Integral ist und dieses zu Null ergänzt. Das zweite Integral ist gegeben durch

$$I_3(x, \beta) = (1 - \gamma x) \frac{\gamma}{2\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\gamma\epsilon} e^{-\frac{1}{\beta}(x+\epsilon)^2} \int_0^{\epsilon} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2}. \quad (83)$$

Zusammenfassend sind für die lokale Zustandsdichte nun die Anteile des wechselwirkungsfreien Teils $F(x, \beta)$ in (72), der x -unabhängige Anteil $L(x, \beta)$ in (74) sowie die folgenden Integrale zu berücksichtigen:

- zwei einfache Integrale (81) und (82) (G_1 und G_2)
- drei zweifache Integrale (77),(80) und (83) (I_1 , I_2 und I_3)
- ein dreifaches Integral (78) (H).

Die Beiträge sind im einzelnen gegeben durch

$$\begin{aligned} F(x, \beta) &= \frac{L}{8\pi\beta} \left(1 - e^{-\frac{1}{\beta}x^2}\right) + \frac{1}{16} \frac{1}{\sqrt{\pi\beta}} \left(e^{-\frac{1}{\beta}x^2} - 1\right) + \frac{\sqrt{2}}{8} \frac{1}{\sqrt{\pi\beta}} \left(1 - e^{-\frac{1}{2\beta}x^2}\right), \\ L(x, \beta) &= \frac{\sqrt{2}}{4} \frac{1}{\sqrt{\pi\beta}} \left(e^{\mu\beta} \operatorname{erfc}(\sqrt{\mu\beta}) - 1\right), \\ G_1(x, \beta) &= \frac{1}{2\pi\beta} e^{-\frac{1}{2\beta}x^2} \int_x^{\infty} dy e^{-\frac{1}{2\beta}y^2}, \\ G_2(x, \beta) &= (\lambda x - 1) \frac{1}{2\pi\beta} e^{-\frac{1}{2\beta}x^2} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\lambda\epsilon} e^{-\frac{1}{2\beta}(x+\epsilon)^2}, \\ I_1(x, \beta) &= -\frac{\gamma}{2\pi\beta} \int_0^{\infty} dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \int_0^{x+r} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2}, \\ I_2(x, \beta) &= \frac{\lambda}{2\pi\beta} \int_0^x dy e^{-\frac{1}{2\beta}y^2} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\lambda\epsilon} e^{-\frac{1}{2\beta}(x+\epsilon)^2}, \\ I_3(x, \beta) &= (1 - \gamma x) \frac{\gamma}{2\pi\beta} \int_0^{\infty} d\epsilon e^{-\gamma\epsilon} e^{-\frac{1}{\beta}(x+\epsilon)^2} \int_0^{\epsilon} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2}, \\ H(x, \beta) &= \frac{\gamma^2}{4\pi\beta} \int_0^{\infty} dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \int_{-r}^r dr' \int_0^x dy e^{-\frac{1}{\beta}(r'+y)^2}. \end{aligned} \quad (84)$$

Um die lokale Zustandsdichte zu erhalten müssen alle diese Beiträge invers Laplace-transformiert werden. Im Zuge dieser Transformation können die Mehrfachintegrale

6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie

auf einfache Integrale reduziert werden. Dazu benötigt man folgende Eigenschaft der Laplace-Transformation: ist $F(\beta)$ die Laplace-Transformierte von $f(E)$, so gilt

$$\mathcal{L}_E[-Ef(E)](\beta) = \frac{\partial}{\partial\beta}F(\beta).$$

Falls also eine Funktion $g(\beta)$ eine Differentialgleichung der Form $(a - \frac{\partial}{\partial\beta})g(\beta) = r(\beta)$ erfüllt, so gilt $\mathcal{L}_\beta^{-1}[r(\beta)](E) = (a + E)\mathcal{L}_\beta^{-1}[g(\beta)](E)$ und $\mathcal{L}_E[\frac{1}{a+E}\mathcal{L}_\beta^{-1}[r(\beta)](E)](\beta)$ ist eine spezielle Lösung dieser Differentialgleichung. Zu dieser muss noch die homogene Lösung $Ae^{a\beta}$ mit einem Parameter A addiert werden. Falls für $|\beta| \rightarrow \infty$ die Funktion g (also insbesondere g') verschwindet, folgt für $a \geq 0$ schon $A = 0$. Alle oben aufgelisteten Mehrfachintegrale erfüllen eine solche Differentialgleichung, wobei $r(\beta)$ jeweils nur Integrale von kleinerer Multiplizität beinhaltet. Die Rechnungen sind dabei für alle Integrale sehr ähnlich. Deshalb wird hier als Beispiel nur die Rechnung für I_1 gezeigt. Die Rechnungen für die anderen Integrale finden sich im Anhang. Damit das folgende Verfahren für alle Integrale auf die gleiche Art funktioniert, sollten die Exponenten, die β enthalten, alle auf die gleiche Form gebracht werden. Deshalb wird in den Integralen so substituiert, dass die Exponentialfunktionen die gleiche Form wie im freien Propagator haben:

$$\begin{aligned} I_1(x, \beta) &= -\frac{\gamma}{2\pi\beta} \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \int_0^{x+r} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} \\ &= -\frac{\lambda}{4\pi\beta} \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(2x+r)^2} \int_0^{2x+r} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \end{aligned}$$

Im Folgenden wird abkürzend $z = 2x$ geschrieben. Um nun eine geeignete Differentialgleichung für I_1 zu finden betrachten wir zuerst die Funktion $f(\beta)$ definiert durch $I_1(\cdot, \beta) = -\frac{\lambda}{4\pi\beta}f(\beta)$ (die x -Abhängigkeit in f wird der Einfachheit halber unterschlagen) und verifizieren die Gleichungen

$$\frac{\partial}{\partial\beta}e^{-\frac{1}{4\beta}(y+z)^2} = \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2\beta}\right)e^{-\frac{1}{4\beta}(y+z)^2} \stackrel{z \neq 0}{=} \left(\frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{2\beta}\right)e^{-\frac{1}{4\beta}(y+z)^2}.$$

Damit lässt sich die Ableitung von f wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial\beta}f(\beta) &= \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2\beta}\right)e^{-\frac{1}{4\beta}(z+r)^2} \right] \int_0^{z+r} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\ &\quad + \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x+r)^2} \int_0^{z+r} dy \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2\beta}\right)e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\ &= \frac{1}{\beta}f(\beta) + T_1(\beta) + T_2(\beta). \end{aligned}$$

Die Ableitungen in den Integralen T_1 und T_2 können durch partielle Integration rückgängig gemacht werden:

$$\begin{aligned}
 T_1(\beta) &= \left[e^{-\lambda r} \left(-\frac{1}{2\beta}(z+r) \right) e^{-\frac{1}{4\beta}(z+r)^2} \int_0^{z+r} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \right]_0^\infty \\
 &\quad + \lambda \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{4\beta}(z+r)^2} \right] \int_0^{z+r} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\
 &\quad - \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{4\beta}(z+r)^2} \right] e^{-\frac{1}{4\beta}(z+r)^2} \\
 &= \frac{z}{2\beta} e^{-\frac{1}{4\beta}z^2} \int_0^z dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} - \lambda e^{-\frac{1}{4\beta}z^2} \int_0^z dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} + \lambda^2 f(\beta) \\
 &\quad - \lambda \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{2\beta}(z+r)^2} - \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{4\beta}(z+r)^2} \right] e^{-\frac{1}{4\beta}(z+r)^2}
 \end{aligned}$$

Außerdem findet man

$$T_2(\beta) = \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{4\beta}(z+r)^2} \right] e^{-\frac{1}{4\beta}(z+r)^2},$$

was den letzten Summanden von T_1 aufhebt. Schreibt man nun noch $w = \sqrt{2}z$, so können alle Exponenten wieder einheitlich geschrieben werden und es gilt insgesamt

$$\left(\frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\beta} \right) f(\beta) = \lambda^2 f(\beta) - r(\beta)$$

mit

$$r(\beta) = \left(\lambda - \frac{z}{2\beta} \right) e^{-\frac{1}{4\beta}z^2} \int_0^z dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} + \kappa \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}(w+r)^2}.$$

Betrachtet man nun $g(\beta) = \frac{1}{\beta} f(\beta)$, so erhält man die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial \beta} g(\beta) = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\beta} \right) f(\beta) = \lambda^2 g(\beta) - \frac{r(\beta)}{\beta}$$

Für $R(x = \frac{z}{2} = \frac{w}{2\sqrt{2}}, \beta) = -\frac{\lambda}{4\pi\beta} r_1(\beta)$ erhält man die gesuchte Differentialgleichung für I_1 :

$$\left(\lambda^2 - \frac{\partial}{\partial \beta} \right) I_1(x, \beta) = R(x, \beta) \quad (85)$$

und für $|\beta| \rightarrow \infty$ verschwindet I_1 . Deshalb kann man die inverse Laplace-Transformation wie folgt durchführen:

$$\mathcal{L}_\beta^{-1}[I_1(x, \beta)](E) = \frac{1}{2\mu + E} \mathcal{L}_\beta^{-1}[R(x, \beta)](E),$$

wobei $\lambda^2 = 2\kappa^2 = 2\mu$ gilt (siehe (73)). Wie man sieht sind die Rechnungen im Prinzip nicht schwierig, jedoch ist der Schreibaufwand sehr hoch. Deshalb werden für die restlichen Integrale hier nur die Differentialgleichungen angegeben. Die Rechnungen können im Anhang A.3 nachvollzogen werden. Um zu verdeutlichen, dass die verbleibenden Integrale nicht sehr vielfältig sind, werden diese durch spezielle Integralfunktionen ausgedrückt: für $n \in \mathbb{N}$ und $\kappa \in \mathbb{R}^+$ werden die Funktionen $A_n, B_n, C_n, D_n : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{C}$ durch

6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie

- $A_n(x) := \frac{1}{4\pi\beta^n} e^{-\frac{1}{4\beta}x^2} \int_0^x dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2},$
- $B_n(x) := \frac{1}{4\pi\beta^n} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x+r)^2},$
- $C_n(x) := \frac{1}{4\pi\beta^n} e^{-\frac{1}{4\beta}x^2} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x+r)^2},$
- $D_n(x) := \frac{1}{4\pi\beta^n} e^{-\frac{1}{4\beta}x^2} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}r^2}.$

definiert. Damit lässt sich z.B. R schreiben als

$$R(x, \beta) = -\lambda^2 A_1(2x) + \lambda x A_2(2x) - \lambda \kappa B_1(2\sqrt{2}x).$$

Geht man nun analog für alle Integrale vor, so findet man für jedes Integral eine solche Differentialgleichung. Bei der Behandlung von $H(x, \beta)$ tritt außerdem noch das Integral

$$I_4(x, \beta) := \frac{\lambda^3}{4\pi\beta} \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(2x+r)^2} \int_{-2x}^{2x} dy e^{-\frac{1}{4\beta}(y+r)^2}$$

auf. Dieses erfüllt genauso wie die anderen Integrale eine passende Differentialgleichung. Die Ergebnisse werden einheitlich in Potenzen von $\mu = \kappa^2$ geschrieben. Die einfachen Integrale G_1 und G_2 können nicht weiter vereinfacht werden. Insgesamt erhält man

$$\begin{aligned} G_1(x) &= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} e^{-\frac{1}{4\beta}(\sqrt{2}x)^2} - \sqrt{2} A_1(\sqrt{2}x), \\ G_2(x) &= \sqrt{2}(\sqrt{2\mu}x - 1) C_1(\sqrt{2}x), \\ \left(2\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right) I_1(\beta) &= -2\mu A_1(2x) + \sqrt{2\mu}x A_2(2x) - \sqrt{2}\mu B_1(2\sqrt{2}x), \\ \left(\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right) I_2(x) &= \sqrt{2}\mu A_1(\sqrt{2}x) - \sqrt{\mu}x A_2(\sqrt{2}x) + \sqrt{\mu}x C_2(\sqrt{2}x), \\ \left(2\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right) I_3(x) &= (\sqrt{2}\mu - 4\mu^{\frac{3}{2}}x) C_1(\sqrt{2}x) - (\sqrt{\mu}x - 2\sqrt{2}\mu x^2) C_2(\sqrt{2}x), \\ \left(2\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right) I_4(\beta) &= 8\mu^2 A_1(2x) - 4\sqrt{2}x\mu^{\frac{3}{2}} A_2(2x) \\ &\quad + 2\sqrt{2}\mu^2 B_1(2\sqrt{2}x) - 2\sqrt{2}\mu^2 D_1(2\sqrt{2}x) + 4\mu^{\frac{3}{2}}x D_2(2\sqrt{2}x), \\ \left(2\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right) H(\beta) &= I_4(\beta) - 2\mu A_1(2x) - \sqrt{2}\mu B_1(2\sqrt{2}x) + \sqrt{2}\mu D_1(2\sqrt{2}x). \end{aligned} \tag{86}$$

Nun muss auf alle diese Differentialgleichungen die inverse Laplace-Transformation angewendet werden. Dabei wird jeweils der Integrand der einzelnen Integrale transformiert. Aus der Identität

$$\mathcal{L}_E \left[\sqrt{E}^\nu J_\nu(\sqrt{E}) \Theta(E) \right] (\beta) = \frac{1}{2^\nu} \frac{e^{-\frac{1}{4\beta}}}{\beta^{\nu+1}} \tag{87}$$

für die Besselfunktionen erster Art J_ν folgt für die Integranden

$$\mathcal{L}_\beta^{-1}\left[\frac{e^{-\frac{z}{4\beta}}}{\beta^{n+1}}\right](E) = \left(\frac{4E}{z}\right)^{\frac{n}{2}} J_n(\sqrt{Ez})\Theta(E).$$

Die inverse Laplace-Transformation für die Funktionen A_n, B_n, C_n und D_n liefert deshalb

$$a_n(x, E) := \mathcal{L}_\beta^{-1}[A_n(x)](E) = \frac{(2\sqrt{E})^{n-1}}{4\pi} \int_0^x dy \frac{J_{n-1}(\sqrt{x^2+y^2}\sqrt{E})}{\sqrt{x^2+y^2}^{n-1}}, \quad (88)$$

$$b_n(x, E) := \mathcal{L}_\beta^{-1}[B_n(x)](E) = \frac{(2\sqrt{E})^{n-1}}{4\pi} \int_0^\infty dr \frac{e^{-\kappa r} J_{n-1}((x+r)\sqrt{E})}{(x+r)^{n-1}}, \quad (89)$$

$$c_n(x, E) := \mathcal{L}_\beta^{-1}[C_n(x)](E) = \frac{(2\sqrt{E})^{n-1}}{4\pi} \int_0^\infty dr \frac{e^{-\kappa r} J_{n-1}(\sqrt{x^2+(x+r)^2}\sqrt{E})}{\sqrt{x^2+(x+r)^2}^{n-1}}, \quad (90)$$

$$d_n(x, E) := \mathcal{L}_\beta^{-1}[D_n(x)](E) = \frac{(2\sqrt{E})^{n-1}}{4\pi} \int_0^\infty dr \frac{e^{-\kappa r} J_{n-1}(\sqrt{x^2+r^2}\sqrt{E})}{\sqrt{x^2+r^2}^{n-1}}. \quad (91)$$

Dabei wurde der immer auftretende Faktor $\Theta(E)$ weggelassen. Diese Funktionen können numerisch berechnet werden. Insgesamt treten nur die Fälle $n = 1$ und $n = 2$ auf, wobei b_2 nicht vorkommt. Insgesamt müssen also sieben Funktionen numerisch implementiert werden. Es ist außerdem möglich, die Funktionen für ein beliebiges $n \geq 2$ aus der jeweiligen Funktion für $n = 1$ zu gewinnen. Dafür kann eine weitere Eigenschaft der Laplace-Transformation verwendet werden. Ist f eine beliebige Laplace-transformierbare Funktion und F ihre Laplace-Transformierte, so gilt für die Ableitung von f allgemein

$$\mathcal{L}_E[f'(E)](\beta) = \beta F(\beta) - f(0). \quad (92)$$

Da die verbleibenden Integrale in den Funktionen a_n, \dots, d_n beschränkt sind, verschwinden diese Funktionen für $n \geq 2$ bei $E = 0$. Sei nun f_n eine dieser vier Funktionen und F_n die Laplace-Transformierte. Aus der Definition von F_n folgt sofort $\beta F_n(\beta) = F_{n-1}(\beta)$. Deshalb gilt für $n \geq 2$

$$\frac{\partial}{\partial E} f_n(x, E) = f_{n-1}(x, E) \quad \text{bzw.} \quad \int_0^E dE' f_{n-1}(x, E') = f_n(x, E). \quad (93)$$

Falls es also gelingt, für z.B. $n = 1$ einen geschlossenen Ausdruck für f_1 zu finden, so kann f_2 direkt als die Stammfunktion bzgl. E ermittelt werden.

Nun folgt eine Zusammenfassung der Beiträge zur lokalen Zustandsdichte. Dabei tritt der Faktor $\Theta(E)$ bei jedem Summanden auf und wird deshalb weggelassen. Mit Hilfe der Identität (87) ergeben sich die folgenden Fälle:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\beta^{-1}\left[\frac{e^{-\frac{1}{4\beta}x^2}}{\beta}\right](E) &= J_0(x\sqrt{E}) \\ \mathcal{L}_\beta^{-1}\left[\frac{e^{-\frac{1}{4\beta}x^2}}{\sqrt{\beta}}\right](E) &= \left(\frac{4E}{x^2}\right)^{-\frac{1}{4}} J_{-\frac{1}{2}}(x\sqrt{E}) = \left(\frac{x^2}{4E}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{4}{\pi^2 x^2 E}\right)^{\frac{1}{4}} \cos(x\sqrt{E}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi E}} \cos(x\sqrt{E}). \end{aligned}$$

6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie

(Siehe hierzu auch [2]) Der wechselwirkungsfreie Anteil ergibt sich deshalb aus (72) zu:

$$\begin{aligned}\rho_0(x, E) &= \frac{L}{8\pi} \left(1 - J_0(2x\sqrt{E})\right) \\ &+ \frac{1}{16\pi} \frac{1}{\sqrt{E}} \left(\cos(2x\sqrt{E}) - 1\right) + \frac{\sqrt{2}}{8\pi} \frac{1}{\sqrt{E}} \left(1 - \cos(x\sqrt{2E})\right).\end{aligned}\quad (94)$$

Von den fehlenden Beiträgen können die Beiträge von K_a und ein Teil des Integrals G_1 in geschlossener Form angegeben werden:

$$\rho_1(x, E) = \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{E}} \left(\cos(x\sqrt{2E}) - 1\right) + \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{E+\mu}}.\quad (95)$$

Die restlichen Beiträge können von den Differentialgleichungen in (86) direkt abgelesen werden und sind gegeben durch

$$\begin{aligned}\rho_2(x, E) &= -\sqrt{2} a_1(\sqrt{2}x, E) + \sqrt{2}(\sqrt{2\mu}x - 1) c_1(\sqrt{2}x, E) \\ &+ \frac{1}{E+\mu} \left[\sqrt{2\mu} a_1(\sqrt{2}x, E) - \sqrt{\mu}x a_2(\sqrt{2}x, E) + \sqrt{\mu}x c_2(\sqrt{2}x, E)\right] \\ &+ \frac{1}{E+2\mu} \left[-4\mu a_1(2x, E) + \sqrt{2\mu}x a_2(2x, E) - 2\sqrt{2\mu} b_1(2\sqrt{2}x, E) \right. \\ &\quad \left. + (\sqrt{2\mu} - 4\mu^{\frac{3}{2}}x) c_1(\sqrt{2}x, E) - (\sqrt{\mu}x - 2\sqrt{2\mu}x^2) c_2(\sqrt{2}x, E) \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{2\mu} d_1(2\sqrt{2}x, E)\right] \\ &+ \frac{1}{(E+2\mu)^2} \left[8\mu^2 a_1(2x, E) - 4\sqrt{2\mu}^{\frac{3}{2}}x a_2(2x, E) \right. \\ &\quad \left. + 2\sqrt{2\mu}^2 b_1(2\sqrt{2}x, E) - 2\sqrt{2\mu}^2 d_1(2\sqrt{2}x, E) \right. \\ &\quad \left. + 4\mu^{\frac{3}{2}}x d_2(2\sqrt{2}x, E)\right].\end{aligned}\quad (96)$$

Die gesamte lokale Zustandsdichte in semiklassischer Näherung ist gegeben durch die Summe dieser drei Dichten

$$\rho(x, E) = \rho_0(x, E) + \rho_1(x, E) + \rho_2(x, E).\quad (97)$$

Die Teilchendichte erhält man nun indem man die lokale Zustandsdichte durch die globale Zustandsdichte $\rho(E)$ teilt und anschließend mit der Teilchenzahl $N = 2$ multipliziert. Die Globale Zustandsdichte könnte man nun durch die Ausführung der fehlenden Integration über x berechnen. Stattdessen benutzen wir die Ergebnisse aus Abschnitt 5. Dabei muss darauf geachtet werden, dass es nur einen Dirichlet-Rand und eine 45° -Ecke gibt. Die zugehörige Zustandsdichte ist

$$\rho(E) = \frac{L^2}{8\pi} \Theta(E) - \frac{(1 + \sqrt{2})L}{8\pi} \frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}} + \frac{\sqrt{2}L}{4\pi} \frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}} + \rho_{45^\circ}(E).$$

Die in der Eckkorrektur auftretenden δ -Distributionen könne i.A. ignoriert werden, da nur Energien oberhalb der Grundzustandsenergie betrachtet werden. Formal müssen sie als Grenzwert von Dirac-Folgen interpretiert werden und korrigieren eventuell nicht reguläres Verhalten bei $E \rightarrow 0$. Die Korrekturen von den Ecken sind für hohe Energien im ganzen vernachlässigbar.

6.3. Verhalten in der Nähe des Randes

Die lokale Zustandsdichte kann an dieser Stelle analytisch weiter charakterisiert werden. Entwickelt man $\rho(x, E)$ um $x = 0$ in eine Potenzreihe, so kann das Verhalten in der Nähe des Randes eingesehen werden. Aufgrund der Dirichlet-Randbedingung bei $x = 0$ muss $\rho(0, E) = 0$ erfüllt sein. Da man die lokale Zustandsdichte bei einer bestimmten Energie durch die Integration über das Betragsquadrat der Wellenfunktion erhält sollte außerdem die erste Ableitung $\frac{\partial}{\partial x}\rho(x, E)$ bei $x = 0$ verschwinden. Wir werden sehen, dass diese Eigenschaften tatsächlich erfüllt sind. Das Verhalten der lokalen Zustandsdichte in der unmittelbaren Nähe des Randes ist deshalb durch den Koeffizienten des quadratischen Terms in der Potenzreihenentwicklung gegeben. Am einfachsten lassen sich die Koeffizienten mit Hilfe der in (84) gegebenen Darstellungen berechnen. Die β -Abhängigkeit der Terme ist im Folgenden nicht relevant und wird ignoriert. Offenbar gilt für den wechselwirkungsfreien Teil $F(0) = 0$, sowie $F'(0) = 0$. Dieser kann also separat betrachtet werden. Für $x = 0$ ergänzen sich die Beiträge L, G_1 und G_2 zu Null. Das gleiche gilt für I_1 und I_3 , während I_2 und H in diesem Fall verschwinden. Insgesamt verschwindet also die Summe aller Beiträge. Das bedeutet, dass nach der inversen Laplace-Transformation auch $\rho(0, E) = 0$ gilt. Genauso findet man $G'_1(0) + G'_2(0) = 0$, $I'_1(0) + H'(0) = 0$ sowie $I'_2(0) + I'_3(0) = 0$, weshalb auch die erste Ableitung verschwindet. Um die zweiten Ableitungen der Integrale zu berechnen, werden die folgenden Eigenschaften der partiellen Ableitung verwendet:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(f(x)g(x)) &= f''(x)g(x) + 2f'(x)g'(x) + f(x)g''(x), \\ \frac{\partial^n}{\partial x^n}f(x+r) &= \frac{\partial^n}{\partial r^n}f(x+r), \\ \left.\frac{\partial}{\partial x}e^{-ax^2}\right|_{x=0} &= 0.\end{aligned}$$

Als Beispiel wird hier wieder nur I_1 betrachtet. Alle anderen Rechnungen gehen vollkommen analog. Dazu wird der Einfachheit halber wieder $I_1(x) = -\frac{\gamma}{2\pi\beta}f(x)$ mit

$$f(x) = \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \int_0^{x+r} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2}$$

geschrieben. Nun kann die zweite Ableitung von f in Null direkt berechnet werden:

$$\begin{aligned}f''(0) &= \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \right) \int_0^{x+r} dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} \Big|_{x=0} \\ &\quad + 2 \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} \left(\frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \right) e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \Big|_{x=0} \\ &\quad + \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{\beta}(x+r)^2} \Big|_{x=0} \\ &= \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} e^{-\frac{1}{\beta}r^2} \right) \int_0^r dy e^{-\frac{1}{\beta}y^2} + 3 \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta}r^2} \frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{\beta}r^2} = \dots\end{aligned}$$

6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie

$$\begin{aligned}
\cdots &= \gamma \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} \left(\frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{\beta} r^2} \right) \int_0^r dy e^{-\frac{1}{\beta} y^2} + 2 \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta} r^2} \frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{\beta} r^2} \\
&= \gamma^2 \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta} r^2} \int_0^r dy e^{-\frac{1}{\beta} y^2} - \gamma \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{2}{\beta} r^2} + \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} \frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{2}{\beta} r^2} \\
&= \gamma^2 \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} e^{-\frac{1}{\beta} r^2} \int_0^r dy e^{-\frac{1}{\beta} y^2} - 1.
\end{aligned}$$

Mit dem Faktor $-\frac{\gamma}{2\pi\beta}$ erhält man $I''(0)$. Geht man analog für die Funktionen G_1, G_2, I_2, I_3 und H vor, so fallen in der Summe die meisten Beiträge weg. Am Ende ergibt sich

$$(G_1 + G_2 + I_1 + I_2 + I_3 + H)''(0) = \frac{\sqrt{2}}{4} \frac{1}{\sqrt{\pi\beta^3}} \left(e^{\mu\beta} \operatorname{erfc}(\sqrt{\mu\beta}) - 1 \right).$$

Zusammen mit dem entsprechenden Koeffizienten des wechselwirkungsfreien Teils

$$F''(0) = \frac{L}{4\pi\beta^2} - \frac{1 - \sqrt{2}}{8} \frac{1}{\sqrt{\pi\beta^3}}$$

ergibt sich der Koeffizient des quadratischen Terms in der Reihenentwicklung vor der inversen Laplace-Transformation zu

$$\Lambda_2(\beta) = \frac{L}{8\pi\beta^2} - \frac{1 + \sqrt{2}}{16} \frac{1}{\sqrt{\pi\beta^3}} + \frac{\sqrt{2}}{8} \frac{1}{\sqrt{\pi\beta^3}} e^{\mu\beta} \operatorname{erfc}(\sqrt{\mu\beta}). \quad (98)$$

Die invers Laplace-Transformierte kann für die ersten beiden Summanden mit Hilfe der Identität (10) gefunden werden. Für den letzten Summanden wird in Anhang A.4 u.A. die Identität

$$\mathcal{L}_\beta^{-1} \left[\beta^{-\frac{3}{2}} e^{\mu\beta} \operatorname{erfc}(\sqrt{\mu\beta}) \right] (E) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\sqrt{E + \mu} - \sqrt{\mu}) \Theta(E)$$

hergeleitet. Damit ergibt sich für den führenden Koeffizienten der lokalen Zustandsdichte in der Nähe des Randes

$$\lambda_2(E) = \left[\frac{L}{8\pi} E - \frac{1 + \sqrt{2}}{8\pi} \sqrt{E} + \frac{\sqrt{2}}{4\pi} (\sqrt{E + \mu} - \sqrt{\mu}) \right] \Theta(E). \quad (99)$$

Der führende Koeffizient der Teilchendichte ist dann gegeben durch

$$n_2(E) := \frac{2}{\rho(E)} \lambda_2(E) = 2 \cdot \frac{\frac{L}{8\pi} E - \frac{1 + \sqrt{2}}{8\pi} \sqrt{E} + \frac{\sqrt{2}}{4\pi} (\sqrt{E + \mu} - \sqrt{\mu})}{\frac{L^2}{8\pi} - \frac{1 + \sqrt{2}}{8\pi} \frac{L}{\sqrt{E}} + \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \frac{L}{\sqrt{E + \mu}} + \rho_{45^\circ}(E)} \Theta(E) = \frac{2E}{L} (1 - R(E))$$

mit

$$R(E) = \frac{1}{\rho(E)} \left[\frac{\sqrt{2}L}{4\pi E} \sqrt{\frac{\mu}{E + \mu}} (\sqrt{E + \mu} - \sqrt{\mu}) + \rho_{45^\circ}(E) \right] \Theta(E).$$

Für die Grenzfälle $\mu \rightarrow \infty$ und $\mu \rightarrow 0$ verschwindet der erste Summand in $R(E)$ und die Eckkorrektur liefert nur δ -Distributionen. In diesem Fall ist der führende Koeffizient der Teilchendichte gegeben durch $\frac{E}{L}$. Für Energien $E \gg \mu$ gilt $\rho_{45^\circ}(E) = \mathcal{O}(E^{-\frac{3}{2}})$ und $\rho(E) = \frac{L^2}{8\pi} + \mathcal{O}(E^{-\frac{1}{2}})$. Deshalb hat R für hohe Energien das asymptotische Verhalten

$$R(E) = \frac{\sqrt{8\mu}}{EL} + \mathcal{O}(E^{-\frac{3}{2}}) \rightarrow 0.$$

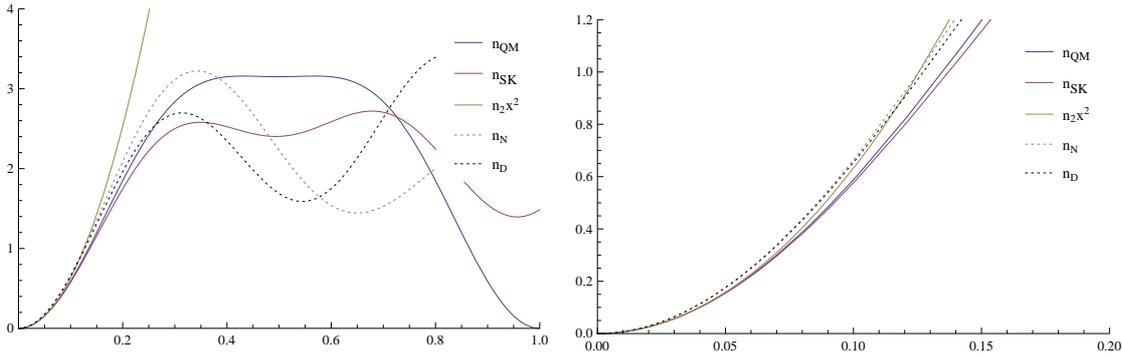


Abbildung 16: Teilchendichte für $\kappa = 7$ für die Grundzustandsenergie $E_0 \approx 36$. Das semiklassische Ergebnis n_{SK} stimmt in der Nähe des Randes sehr gut mit der exakten Teilchendichte überein.

6.4. Vergleich der Ergebnisse

Nun sollen die in den letzten Abschnitten gefundenen Ausdrücke für die lokale Zustandsdichte miteinander verglichen werden. Dies geschieht anhand der jeweiligen Teilchendichten, wobei wie in den anderen Fällen $L = 1$ gewählt werden kann, was wieder bedeutet, dass \sqrt{E} und κ in inversen Einheiten von L ausgedrückt werden, während zusätzlich x in Einheiten von L ausgedrückt wird. In Abb. 16 sind beide Teilchendichten für den Grundzustand mit $E_0 \approx 36$ und $\kappa = 7$ zu sehen. In der Nähe des Randes stimmt das semiklassische Ergebnis sehr gut mit der exakten Teilchendichte überein. Je weiter man sich vom Rand entfernt, desto größer werden die Abweichungen. Trotzdem ist die Übereinstimmung viel höher als beim Vergleich mit den Ergebnissen für die Grenzfälle nicht wechselwirkender (n_{N} , obere gestrichelte Linie) bzw. stark wechselwirkender Teilchen (n_{D} , untere gestrichelte Linie). Der Koeffizient n_2 des quadratischen Terms in der Potenzreihenentwicklung von n_{SK} weicht um ca. 0.8% von dem entsprechenden Koeffizienten der exakten Teilchendichte ab, während diejenigen der Grenzfälle wegen $L = 1$ beide genau der doppelten Grundzustandsenergie $2E_0$ entsprechen (der Faktor 2 resultiert aus der Normierung auf die Teilchenzahl). Dass die Übereinstimmung der Ergebnisse für einen einzelnen Zustand ca. ab dem ersten Wendepunkt nicht mehr hoch ist, ist nicht überraschend. Die semiklassische lokale Zustandsdichte enthält keine Information über die exakte Lage der Energieniveaus, sondern nur über ihre mittlere Dichte bei einer bestimmten Energie. Um sie mit der exakten lokalen Zustandsdichte vergleichen zu können muss diese deshalb um diese Energie gemittelt werden, so dass mehrere Zustände zum Ergebnis beitragen. Für ausreichend hohe Energien E wird die exakte Teilchendichte deshalb mit der Gewichtungsfunktion

$$w_{E,\sigma}(z) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z-E}{\sigma}\right)^2} \Theta(z - E + a\sigma) \Theta(E + a\sigma - z)$$

gemittelt, wobei die beiden Theta-Funktionen die Funktion auf das Intervall $[E - a\sigma, E + a\sigma]$ beschränken und der Faktor a festgelegt werden muss. In den Plots gilt immer

6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie

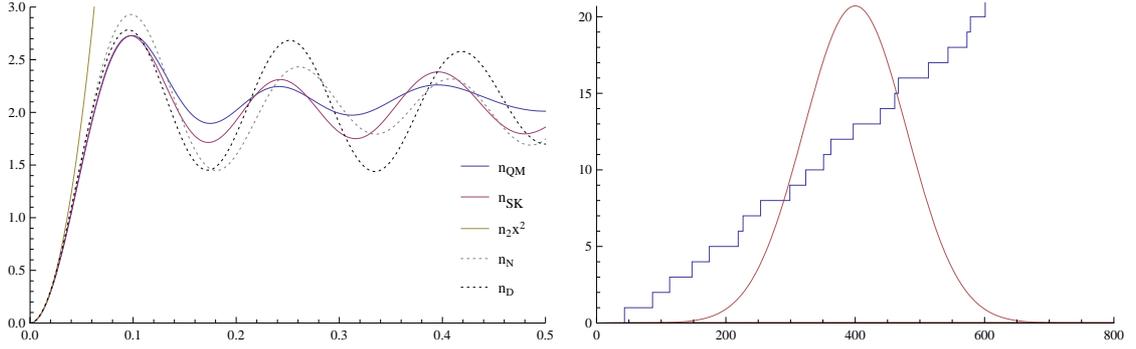


Abbildung 17: Teilchendichte für $\kappa = 20$ bei $E = 400$ (ca. 13. angeregter Zustand) mit $\sigma = 80$.

$a = 5$. σ muss für jede Energie so gewählt werden, dass genug Niveaus einfließen, darf jedoch nicht zu hoch gewählt werden, da sonst ein ganzes Energieintervall um E ähnlich gewichtet ist. Die passenden Werte findet man durch Ausprobieren. Die um E gemittelte Teilchendichte ist gegeben durch

$$n_{E,\sigma}(x) = \frac{\sum_n w_{E,\sigma}(E_n) n_n(x)}{\sum_n w_{E,\sigma}(E_n)}.$$

Die Energien E_n stehen für die (der Größe nach geordneten) Energien E_{mn} der quantenmechanischen Lösungen. Für ein kontinuierliches Spektrum wäre der Erwartungswert in der Gewichtungsfunktion $w_{E,\sigma}$ genau E . Für ein diskretes Spektrum ist dies aber nicht mehr erfüllt. Zwar wurde in Abschnitt 5 gezeigt, dass die Zustandsdichte für das System annähernd konstant ist, die Energieniveaus also im Mittel äquidistant sind, jedoch sind auch in diesem Fall je nach der Lage von E zwischen zwei Energieniveaus i.A. alle Niveaus auf einer der Seiten stärker gewichtet. Deshalb muss für den Vergleich die Energie \bar{E} verwendet werden, die dem tatsächlichen Erwartungswert entspricht:

$$\bar{E} = \frac{\sum_n w_{E,\sigma}(E_n) E_n}{\sum_n w_{E,\sigma}(E_n)}.$$

Eine Mittelung um den Grundzustand ist also nicht möglich, da in diesem Fall alle weiteren Energieniveaus bei höheren Energien liegen, so dass immer $\bar{E} > E$ gelten würde. In den Vergleichsplots in den Abb. 17-19 sind die Werte von κ so gewählt, dass möglichst keiner der Grenzfälle angenommen werden kann. Das ist der Fall, wenn E und $\mu = \kappa^2$ die gleiche Größenordnung haben. Im rechten Bild ist jeweils die Zählfunktion für die Zustände sowie die Normalverteilung (passend skaliert) zu sehen. Eine Betrachtung für $x \geq 0,5$ ist nicht sinnvoll, da in diesem Fall der Rand bei $x = 1$ der nähere Rand ist. Der erste Plot in Abb. 17 zeigt die Teilchendichten für $\kappa = 20$ bei der Energie $E = 400$, genauer $\bar{E} = 400.75$, mit der Breite der Normalverteilung $\sigma = 80$ im Bereich $[0; 0,5]$. Die Übereinstimmung ist bis zum ersten Maximum bei $x \approx 0.1$ sehr hoch. Rechts davon stimmen die Graphen nicht mehr überein, allerdings werden die Positionen der Maxima

6.4. Vergleich der Ergebnisse

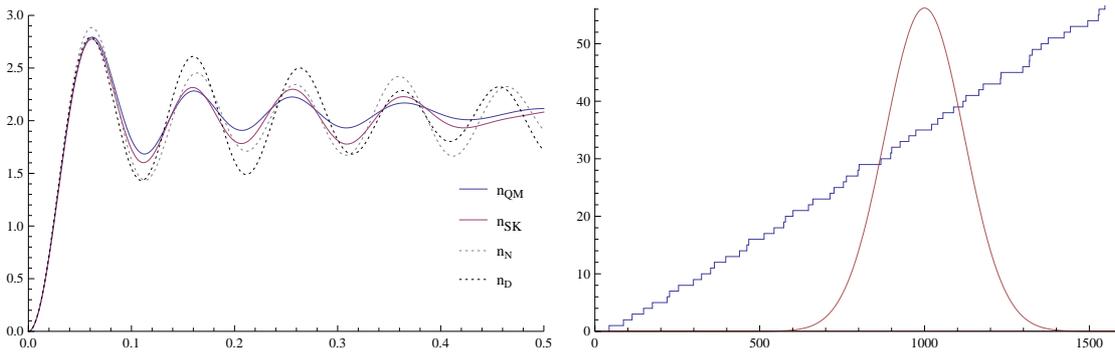


Abbildung 18: Teilchendichte für $\kappa = 20$ bei $E = 1000$ (ca. 35. angeregter Zustand) mit $\sigma = 120$.

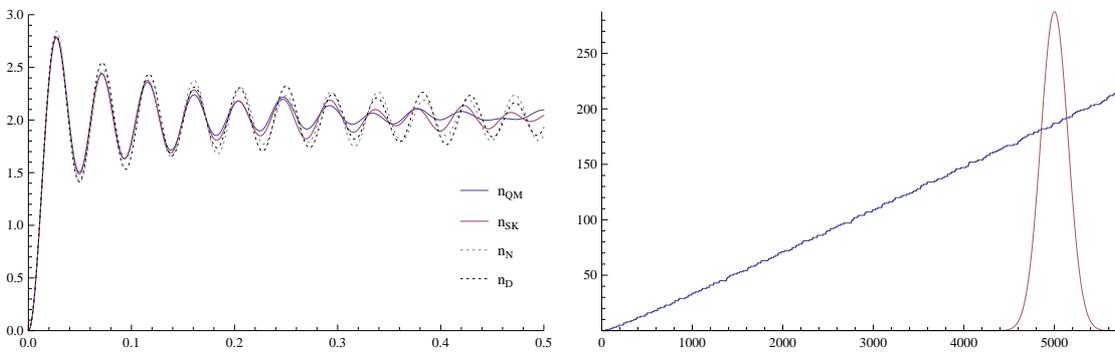


Abbildung 19: Teilchendichte für $\kappa = 70$ bei $E = 5000$ (ca. 180. angeregter Zustand) mit $\sigma = 150$.

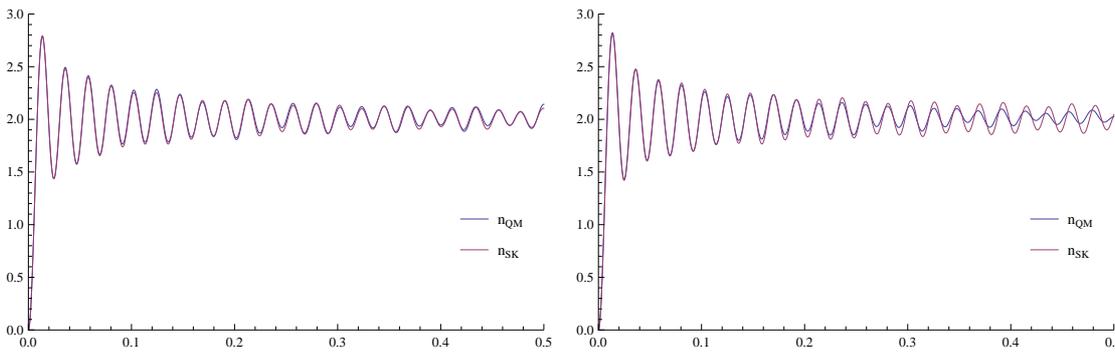


Abbildung 20: Teilchendichte bei $E = 20000$ (ca. 770. angeregter Zustand) mit $\sigma = 300$. Links: $\kappa = 200$ (sehr hohe Übereinstimmung von n_{QM} und n_{SK}). Rechts: $\kappa = 20$ (niedrigere Übereinstimmung)

6. Lokale Zustandsdichte für zwei Bosonen auf einer Linie

und Minima, die im Vergleich zu den Grenzfällen verschoben sind, korrekt beschrieben. Aufgrund der Symmetrie hat die gemittelte quantenmechanische Teilchendichte immer ein Extremum bei $x = 0,5$. Dieses kann von der semiklassischen Teilchendichte nicht vorhergesagt werden, da in dieser der zweite Rand nicht berücksichtigt wird. Der zweite Plot in Abb. 18 scheint dem genau zu widersprechen, jedoch ist die gute Übereinstimmung der beiden Dichten bei $x = 0,5$ hier zufällig. Die Werte für diesen Plot sind $\kappa = 20$, $E = 1000$ und $\sigma = 120$. Mit der Erhöhung der Energie sind weitere Extrema hinzugekommen, ansonsten verhalten sich die verschiedenen Teilchendichten ähnlich zueinander wie im vorhergehenden Plot mit etwas kleinerer absoluter Abweichung. Wird die Energie noch weiter erhöht, so kommen weitere Oszillationen hinzu. In Abb. 19 ist dies für $E = 5000$ ($\kappa = 70$, $\sigma = 150$) gut zu sehen. Die Teilchendichten zeigen hier bis ungefähr $x = 0,2$ sehr gute Übereinstimmung. Bis ungefähr $x = 0,4$ stimmt genauso wie in den vorhergehenden Plots die Lage der Extrema relativ gut. Insgesamt nimmt mit steigender Energie der Bereich mit guter Übereinstimmung zu, jedoch muss die quantenmechanische Teilchendichte dafür über einen breiteren Bereich gemittelt werden, relativ zur Energie wird dieser Bereich allerdings schmaler. In Abb. 20 für $E = 20000$ sind diese Trends sehr gut zu sehen. Allerdings ist die Übereinstimmung bei gleichbleibender Energie für manche Werte von κ nicht ganz so hoch. Für z.B. $E = 20000$ und $\kappa = 20$ (siehe Abb. 20) werden die Oszillationen in der quantenmechanischen Teilchendichte beim Mitteln stark gedämpft⁹, so dass die Übereinstimmung wieder nur im Bereich bis $x = 0.2$ sehr hoch ist. Für alle anderen getesteten Werte von κ (inklusive der Grenzfälle) ist die Übereinstimmung ähnlich hoch wie im linken Plot in Abb. 20. Generell ist davon auszugehen, dass die beobachtete Dämpfung der Oszillationen im exakten Fall (in n_{QM}) gegenüber n_{SK} von der Energiemittelung herrührt und eine höhere Übereinstimmung erzielt würde, wenn auch die semiklassische Vorhersage gemittelt würde. Die semiklassische lokale Zustandsdichte liefert in der Nähe des Randes für beliebige Energien sehr ähnliche Vorhersagen wie die (gemittelte) quantenmechanische lokale Zustandsdichte und stimmt im Monotonieverhalten qualitativ sehr gut mit dieser überein, solange $x < 0,5$ gilt. Für hohe Energien ist die Übereinstimmung höher und ist i.A. für einen größeren Bereich gegeben. Im Vergleich zu den Grenzfällen sind die Amplituden der Oszillationen für endliche Werte von κ tendenziell kleiner. Qualitativ weist das Ergebnis Ähnlichkeit zu Friedel-Oszillationen in der Nähe der Oberfläche von Metallen auf [9], mit dem Unterschied, dass die Oszillationen für große Werte von x nicht verschwinden, was jedoch in höheren Dimensionen wieder der Fall sein sollte [10].

⁹Wählt man σ kleiner, so zeigt die quantenmechanische Dichte hohe Unregelmäßigkeiten, während sie für größere Werte von σ um $x = 0.5$ in ein Plateau übergeht.

7. Ausblick

Das in dieser Arbeit behandelte System aus zwei Bosonen auf einer Linie mit Delta-Wechselwirkung stellt den Spezialfall eines eindimensionalen wechselwirkenden Bose-Gases mit nur zwei Teilchen dar. Ziel dieser Arbeit ist es, die Grundlage für die Behandlung eines solchen Bose-Gases mit beliebiger Teilchenzahl zu schaffen. Für den allgemeinen Fall gibt es nun verschiedene Möglichkeiten. In dem bereits in der Einleitung erwähnten Formalismus von Q. Hummel wird der in Abschnitt 2.5 gefundene Vielteilchenpropagator

$$K_{\pm}(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} (\pm)^P K(P\mathbf{x}', \mathbf{x}, t)$$

benutzt. Jede Permutation $P \in S_N$ kann eindeutig in paarweise disjunkte Zyklen zerlegt werden. In einem einzelnen Summanden des Propagators können die Teilchen also in kleinere Gruppen eingeteilt werden, innerhalb derer die Teilchen zyklisch vertauscht werden. Für diese Gruppen spielen die (berandeten) Mannigfaltigkeiten, auf denen alle Teilchenkoordinaten übereinstimmen, eine besondere Rolle (Im Falle von zwei Teilchen auf einer Linie ist diese Mannigfaltigkeit durch die Strecke zwischen $(0, 0)$ und (L, L) gegeben, auf der überall $q_1 = q_2$ gilt). Nun geht man davon aus, dass der Beitrag der Teilchenvertauschung zur Zustandsdichte hauptsächlich von der Kurzzeit-Propagation in der Umgebung dieser Mannigfaltigkeit stammt. Q. Hummel bezeichnet diese Gebiete als sog. Cluster-Zonen. Der Beitrag der Wechselwirkung sollte ebenfalls hauptsächlich von der Kurzzeit-Propagation innerhalb dieser Cluster-Zonen abhängen. Überall, wo die verschiedenen Mannigfaltigkeiten sich nicht zu nahe kommen bzw. schneiden, können die zugehörigen Cluster-Zonen als unabhängig betrachtet werden. Jeder Cluster-Zone ist nun eine bestimmte Anzahl an Teilchen zugeordnet, die genau der Länge des zugehörigen Zyklus entspricht. Falls sich mindestens zwei Teilchen in einer Cluster-Zone befinden, so spüren diese die gegenseitige Wechselwirkung. Nun könnte man wie folgt vorgehen: man nimmt an, dass der Beitrag der Wechselwirkung zur Zustandsdichte hauptsächlich von der Wechselwirkung bei Paaren von Teilchen herrührt und die Fälle, in denen mehr als zwei Teilchen gleichzeitig wechselwirken, vernachlässigbar sind. Im Sinne der Cluster-Zonen bedeutet das, dass die Wechselwirkung nur in den Cluster-Zonen mit genau zwei zugeordneten Teilchen berücksichtigt wird und alle anderen wie im wechselwirkungsfreien Fall behandelt werden. Folgt man dieser Herangehensweise, so sollten nach der Spurbildung Summanden der Form

$$\frac{1}{\beta^{\frac{N-n}{2}}} e^{\mu\beta} \operatorname{erfc}(\sqrt{\mu\beta})^n$$

auftreten. Für $n = 1$ kann die invers Laplace-Transformierte dieser Terme mit Hilfe der in Anhang A.4 angegebenen Formel gefunden werden.

Der Nachteil der obigen Herangehensweise ist, dass die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen nur innerhalb der Cluster-Zonen mit genau zwei zugeordneten Teilchen erfolgt und auch die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen aus verschiedenen Cluster-Zonen

7. Ausblick

vernachlässigt wird. Ein möglicher allgemeinerer Ansatz wäre eine Entwicklung des Propagators (für unterscheidbare Teilchen) im Sinne einer Virialentwicklung der Form

$$K(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) = K_0(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) + K_1(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) + K_2(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) + \dots, \quad (100)$$

wobei K_0 der freie Propagator ist und in K_1 nur die Wechselwirkung zwischen jeweils genau zwei Teilchen, in K_2 die Wechselwirkung zwischen jeweils genau 3 Teilchen usw. einfließt. Dabei ist hervorzuheben, dass jeder weitere Summand lediglich eine Korrektur zu den vorhergehenden darstellt, d.h. es handelt sich nicht um die vollständigen Propagatoren. Beispielsweise enthält K_1 alle Prozesse, bei denen zwei Teilchen miteinander Wechselwirken, d.h. die Fälle im Dreiteilchenproblem, in denen zwei der drei Teilchen wechselwirken, während das dritte Teilchen als isoliert angesehen werden kann, sind bereits berücksichtigt und treten in K_2 und allen nachfolgenden Korrekturen nicht mehr auf. Im zweidimensionalen Fall nimmt der Propagator automatisch die Form (100) an. Der Propagator für das Problem mit unterscheidbaren Teilchen ist gegeben durch das Produkt aus dem freien Propagator mit dem Propagator für ein Delta-Potential (ohne Dirichlet-Randkorrekturen, in gedrehten Koordinaten).

$$\begin{aligned} K_{\text{dist}}(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t) &= K_0(x'_1, x_1, t) K_\delta(x'_2, x_2, t) \\ &= \underbrace{K_0(x'_1, x_1, t) K_0(x'_2, x_2, t)}_{=K_0(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t)} + \underbrace{K_0(x'_1, x_1, t) K_\kappa(x'_2, x_2, t)}_{=K_1(\mathbf{x}', \mathbf{x}, t)} \end{aligned} \quad (101)$$

Berücksichtigt man nun noch die Ununterscheidbarkeit der Teilchen, so erhält man den bereits bekannten Propagator mit einer Korrektur von einer gemischten Randbedingung

$$K_{\text{indist}} = \frac{1}{2} [K_0(x'_1, x_1, t) K_0(x'_2, x_2, t) + K_0(x'_1, x_1, t) K_R(x'_2, x_2, t)], \quad (102)$$

wobei der Faktor $\frac{1}{2}$ weggelassen wird, wenn man sich auf die Fundamentale Domäne beschränkt. Der Propagator K_1 sollte für beliebige Teilchenzahlen ebenfalls durch Produkte aus freien Propagatoren und Propagatoren für Delta-Potentiale ausgedrückt werden können, die dann auf den symmetrischen Unterraum projiziert werden müssen. Die höheren Terme ab K_2 werden auch in diesem Ansatz weggelassen.

Um die Rechnungen zu vereinfachen, sollten in beiden Ansätzen die in Abschnitt 5.2 berechneten Eckkorrekturen vernachlässigt bzw. durch ihren nicht-wechselwirkenden Grenzfall ersetzt werden, da ihr Einfluss relativ zur gesamten Zustandsdichte sehr klein ist. Eine andere Möglichkeit wäre, die Eckkorrekturen durch die Verwendung von periodischen Randbedingungen zu umgehen.

Ein weiterer Schritt wird die Ausweitung des Problems auf zwei- bzw. dreidimensionale Systeme sein. Bei diesen wird im Vergleich zum eindimensionalen System die Verwendung von sphärischen Koordinaten wohl unumgänglich sein. Viel wichtiger ist aber, dass die Wechselwirkung in diesem Fall nicht mehr als Randbedingung formuliert werden kann.

A. Anhang

A.1. Umformung des Produkts aus Wellenfunktionen

Der Einfachheit halber wird im Folgenden auf die Indizierung der ψ_n und k_n verzichtet. Es soll jedoch weiter die Randbedingung 27 erfüllt sein. Außerdem werden an mehreren Stellen die Additionstheoreme für die Trigonometrischen Funktionen

$$\begin{aligned}\cos(a + b) &= \cos a \cos b - \sin a \sin b \\ \sin(a + b) &= \cos a \sin b + \sin a \cos b\end{aligned}$$

verwendet. Es gilt

$$\begin{aligned}\psi^*(x')\psi(x) &= \frac{1}{L} \sin(k(|x'| - L)) \sin(k(|x| - L)) \\ &= \frac{1}{2L} [\cos(k(|x'| - |x|)) - \cos(k(|x'| + |x|) - 2kL)]\end{aligned}$$

Der zweite Summand in der Klammer kann mit Hilfe der Identitäten

$$\cos(2t) = \frac{1 - \tan^2 t}{1 + \tan^2 t} \quad \sin(2t) = \frac{2 \tan(t)}{1 + \tan^2(t)} \quad (103)$$

und der Abkürzung $z := |x'| + |x|$ weiter umgeformt werden:

$$\begin{aligned}\cos(kz - 2kL) &= \cos(kz) \cos(2kL) + \sin(kz) \sin(2kL) \\ &\stackrel{103}{=} \frac{1 - \tan^2(kL)}{1 + \tan^2(kL)} \cos(kz) + \frac{2 \tan(kL)}{1 + \tan^2(kL)} \sin(kz) \\ &\stackrel{27}{=} \frac{1 - (\frac{k}{\kappa})^2}{1 + (\frac{k}{\kappa})^2} \cos(kz) + \frac{2\frac{k}{\kappa}}{1 + (\frac{k}{\kappa})^2} \sin(kz) \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{1 - 2i\frac{k}{\kappa} - (\frac{k}{\kappa})^2}{1 + (\frac{k}{\kappa})^2} e^{ikz} + \frac{1 + 2i\frac{k}{\kappa} - (\frac{k}{\kappa})^2}{1 + (\frac{k}{\kappa})^2} e^{-ikz} \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{1 - i\frac{k}{\kappa}}{1 + i\frac{k}{\kappa}} e^{ikz} + \frac{1 + i\frac{k}{\kappa}}{1 - i\frac{k}{\kappa}} e^{-ikz} \right] \\ &= \frac{1}{1 + i\frac{k}{\kappa}} e^{ikz} + \frac{1}{1 - i\frac{k}{\kappa}} e^{-ikz} - \cos(kz) \\ &= 2 \operatorname{Re} \frac{e^{ikz}}{1 + i\frac{k}{\kappa}} - \cos(kz)\end{aligned}$$

Damit folgt insgesamt

$$\psi^*(x')\psi(x) = \frac{1}{2L} \left[\cos(k(|x'| - |x|)) + \cos(k(|x'| + |x|)) - \operatorname{Re} \frac{e^{ik(|x'|+|x|)}}{1 + i\frac{k}{\kappa}} \right] \quad (104)$$

$$= \frac{1}{2L} \left[\cos(k(x' + x)) + \cos(k(x' - x)) - \operatorname{Re} \frac{e^{ik(|x'|+|x|)}}{1 + i\frac{k}{\kappa}} \right] \quad (105)$$

Die letzte Umformung kann man leicht durch eine Fallunterscheidung verifizieren.

A.2. Numerische Berechnung der Wellenzahlen

Für die numerische Berechnung der Lösungen der Fixpunktgleichungen bietet sich eine Fixpunktiteration an. Die Fixpunkte der Gleichungen in (65) und (67) sind in dieser Form jedoch abhängig vom Betrag von κ entweder anziehend oder abstoßend. Substituiert man in den Gleichungen $k_n = \frac{g_n}{d}$ und verwendet statt dem Tangens seine Umkehrfunktion, so erhält man die Fixpunktgleichungen

$$\begin{aligned} r_n(g_n) &:= n\pi - \arctan\left(\frac{g_n}{\kappa d}\right) = g_n \\ s_n(g_n) &:= n\pi - \frac{\pi}{2} - \arctan\left(\frac{g_n}{\kappa d}\right) = g_n. \end{aligned} \tag{106}$$

In r_n gilt für den Fixpunkt offenbar $g_n \geq n\pi - \frac{\pi}{2} \geq \frac{\pi}{2} > 1$ und deshalb

$$|r'_n(g_n)| = \frac{|\kappa d|}{(\kappa d)^2 + g_n^2} < \frac{|\kappa d|}{(\kappa d)^2 + 1} \leq \frac{1}{2}.$$

Die letzte Ungleichung ist äquivalent zu $(|\kappa d| - 1)^2 \geq 0$. Das gleiche erhält man für s_n , wobei man $n \geq 2$ annehmen muss. Für diese Fälle ist g_n deshalb ein anziehender Fixpunkt und der Startwert $g_n^{(0)} = (n \mp \frac{1}{2})\pi$ bzw. $g_n^{(0)} = (n \mp 1)\pi$ sollte für r_n bzw. s_n innerhalb weniger Iterationen genaue Ergebnisse liefern (dabei steht das obere Zeichen für $\kappa > 0$ und das untere für $\kappa < 0$). Für $|\kappa d| > 1$ gilt dies auch für s_1 , außerdem gilt für $\kappa < 0$ in s_1 auch $g_1 > 1$ und damit ebenfalls Konvergenz. Für die Gleichung $k_0 = -\kappa \tanh(k_0 d)$ liefert die Substitution $h_0 = \frac{k_0}{\kappa}$ und der Startwert $h_0^{(0)} = 1$ eine konvergente Fixpunktiteration. Alle verbleibenden Fälle konvergieren mit dem Newtonverfahren für beliebige positive Startwerte (die zweite Ableitung der betrachteten Funktionen wechselt nur bei 0 das Vorzeichen und die Asymptote verläuft durch den Ursprung oder schneidet die positive k- bzw. g-Achse¹⁰).

A.3. Bestimmung der Differentialgleichungen bei der lokalen Zustandsdichte

Im folgenden gilt immer $x_n = (\sqrt{2})^n x$. Das Vorgehen kann für ein Integral I wie folgt systematisiert werden:

1. durch Substitution alle β -abhängigen Exponenten auf die Form $\frac{1}{4\beta}(\cdot)^2$ bringen,
2. den Faktor $c(\beta)$ vor dem Integral I (inklusive $\frac{1}{\beta}$) weglassen, wodurch eine Funktion $f(\beta)$ definiert wird,
3. a und $r(\beta)$ aus der Differentialgleichung $\left(\frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\beta}\right) f(\beta) = a f(\beta) - r(\beta)$ bestimmen,
4. dann erfüllt $I(\beta)$ die Differentialgleichung $\left(a - \frac{\partial}{\partial \beta}\right) I(\beta) = c(\beta)r(\beta)$.

¹⁰ das gilt auch für die anderen Fälle, jedoch führt die Fixpunktiteration hier deutlich schneller zum Ziel.

A.3. Bestimmung der Differentialgleichungen bei der lokalen Zustandsdichte

$I_2(\beta)$

$$I_2(\beta) = \frac{\lambda}{4\pi\beta} \int_0^{x_1} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+r)^2} =: \frac{\lambda}{4\pi\beta} f_2(\beta)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{1}{\beta}\right) f_2(\beta) &= \int_0^{x_1} dy \frac{\partial^2}{\partial y^2} e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+r)^2} \\ &\quad + \int_0^{x_1} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+r)^2} \\ &= -\frac{x_1}{2\beta} e^{-\frac{1}{4\beta}x_1^2} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+r)^2} + \frac{x_1}{2\beta} e^{-\frac{1}{4\beta}x_1^2} \int_0^{x_1} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\ &\quad + \kappa \int_0^{x_1} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} \frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+r)^2} \\ &= \kappa^2 f_2(\beta) - \left(\kappa - \frac{x_1}{2\beta}\right) e^{-\frac{1}{4\beta}x_1^2} \int_0^{x_1} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\ &\quad - \frac{x_1}{2\beta} e^{-\frac{1}{4\beta}x_1^2} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+r)^2} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \left(\kappa^2 - \frac{\partial}{\partial\beta}\right) I_2(\beta) = \lambda\kappa A_1(x_1) - \frac{\lambda x_1}{2} A_2(x_1) + \frac{\lambda x_1}{2} C_2(x_1)$$

$$\Leftrightarrow \left(\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right) I_2(\beta) = \sqrt{2}\mu A_1(\sqrt{2}x) - \sqrt{\mu}x A_2(\sqrt{2}x) + \sqrt{\mu}x C_2(\sqrt{2}x)$$

$I_3(\beta)$

$$I_3(\beta) = (1 - \lambda x_2) \frac{\lambda}{4\pi\beta} \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \int_0^r dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} =: (1 - \lambda x_2) \frac{\lambda}{4\pi\beta} f_3(\beta)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{1}{\beta}\right) f_3(\beta) &= \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \right] \int_0^r dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\ &\quad + \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \int_0^r dy \frac{\partial^2}{\partial y^2} e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\ &= \lambda \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \right] \int_0^r dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\ &\quad + \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \frac{x_2+r}{2\beta} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} e^{-\frac{1}{4\beta}r^2} \\ &\quad - \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \frac{r}{2\beta} e^{-\frac{1}{4\beta}r^2} \\ &= \lambda^2 f_2(\beta) - \left(\lambda - \frac{x_2}{2\beta}\right) \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} e^{-\frac{1}{4\beta}r^2} \\ &= \lambda^2 f_2(\beta) - \left(\lambda - \frac{x_2}{2\beta}\right) \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(\sqrt{2}r+x_1)^2} e^{-\frac{1}{4\beta}x_1^2} \\ &= \lambda^2 f_2(\beta) - \left(\kappa - \frac{x_1}{2\beta}\right) \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_1+r)^2} \end{aligned}$$

A. Anhang

$$\begin{aligned} &\Rightarrow \left(\lambda^2 - \frac{\partial}{\partial \beta} \right) I_3(\beta) = (1 - 2\kappa x_1) \lambda \left[\kappa C_1(x_1) - \frac{x_1}{2} C_2(x_1) \right] \\ &\Leftrightarrow \left(2\mu - \frac{\partial}{\partial \beta} \right) I_3(\beta) = (\sqrt{2\mu} - 4\mu x) \left[\sqrt{\mu} C_1(\sqrt{2}x) - \frac{x}{\sqrt{2}} C_2(\sqrt{2}x) \right] \end{aligned}$$

$H(\beta)$

$$H(\beta) = \frac{\kappa^2}{8\pi\beta} \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \int_{-r}^r dz \int_{-x_2}^{x_2} dy e^{-\frac{1}{4\beta}(z+y)^2} =: \frac{\kappa^2}{8\pi\beta} h(\beta)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\beta} \right) h(\beta) &= \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \right] \int_{-r}^r dz \int_{-x_2}^{x_2} dy e^{-\frac{1}{4\beta}(z+y)^2} \\ &\quad + \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \int_{-r}^r dz \frac{\partial}{\partial z} \int_{-x_2}^{x_2} dy \frac{\partial}{\partial y} e^{-\frac{1}{4\beta}(z+y)^2} \\ &= \lambda \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \right] \int_{-r}^r dz \int_{-x_2}^{x_2} dy e^{-\frac{1}{4\beta}(z+y)^2} \\ &\quad - \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \right] \int_{-x_2}^{x_2} dy \left[e^{-\frac{1}{4\beta}(y+r)^2} + e^{-\frac{1}{4\beta}(y-r)^2} \right] \\ &\quad + \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \int_{-r}^r dz \frac{\partial}{\partial z} \left[e^{-\frac{1}{4\beta}(z+x_2)^2} - e^{-\frac{1}{4\beta}(z-x_2)^2} \right] \\ &= \lambda^2 h(\beta) - 2\lambda \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \int_{-x_2}^{x_2} dy \left[e^{-\frac{1}{4\beta}(y+r)^2} + e^{-\frac{1}{4\beta}(y-r)^2} \right] \\ &\quad + e^{-\frac{1}{4\beta}x_2^2} \int_{-x_2}^{x_2} dy 2e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\ &\quad + 2 \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \left[e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} - e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2-r)^2} \right] \\ &\quad + 2 \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \left[e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} - e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2-r)^2} \right] \\ &= \lambda^2 h(\beta) - 4\lambda \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \int_{-x_2}^{x_2} dy e^{-\frac{1}{4\beta}(y+r)^2} \\ &\quad + 4e^{-\frac{1}{4\beta}x_2^2} \int_0^{x_2} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\ &\quad + 2\sqrt{2} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_3+r)^2} - 2\sqrt{2}e^{-\frac{1}{4\beta}x_3^2} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}r^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\Rightarrow \left(\lambda^2 - \frac{\partial}{\partial \beta} \right) H(\beta) = I_4(\beta) - 2\kappa^2 A_1(x_2) - \sqrt{2}\kappa^2 B_1(x_3) + \sqrt{2}\kappa^2 D_1(x_3) \\ &\Leftrightarrow \left(2\mu - \frac{\partial}{\partial \beta} \right) H(\beta) = I_4(\beta) - 2\mu A_1(2x) - \sqrt{2}\mu B_1(2\sqrt{2}x) + \sqrt{2}\mu D_1(2\sqrt{2}x) \end{aligned}$$

$I_4(\beta)$

$$I_4(\beta) = \frac{\lambda^3}{4\pi\beta} \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \int_{-x_2}^{x_2} dy e^{-\frac{1}{4\beta}(y+r)^2} =: \frac{\lambda^3}{4\pi\beta} f_4(\beta)$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{1}{\beta}\right) f_4(\beta) &= \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \right] \int_{-x_2}^{x_2} dy e^{-\frac{1}{4\beta}(y+r)^2} \\
&\quad + \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \frac{\partial}{\partial r} \int_{-x_2}^{x_2} dy \frac{\partial}{\partial y} e^{-\frac{1}{4\beta}(y+r)^2} \\
&= \frac{x_2}{2\beta} e^{-\frac{1}{4\beta}x_2^2} \int_{-x_2}^{x_2} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\
&\quad + \lambda \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \right] \int_{-x_2}^{x_2} dy e^{-\frac{1}{4\beta}(y+r)^2} \\
&\quad - \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \left[\frac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \right] \left[e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} - e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2-r)^2} \right] \\
&\quad + \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} - e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2-r)^2} \right] \\
&= \lambda^2 f_4(\beta) - \left(2\lambda - \frac{x_2}{\beta}\right) e^{-\frac{1}{4\beta}x_2^2} \int_0^{x_2} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\
&\quad - \lambda \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} \left[e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} - e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2-r)^2} \right] \\
&\quad - \frac{x_2}{\beta} \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2+r)^2} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_2-r)^2} \\
&= \lambda^2 f_4(\beta) - \left(2\lambda - \frac{x_2}{\beta}\right) e^{-\frac{1}{4\beta}x_2^2} \int_0^{x_2} dy e^{-\frac{1}{4\beta}y^2} \\
&\quad - \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}(x_3+r)^2} - \left(\frac{x_2}{\sqrt{2}\beta} - \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\right) e^{-\frac{1}{4\beta}x_3^2} \int_0^\infty dr e^{-\kappa r} e^{-\frac{1}{4\beta}r^2} \\
\Rightarrow \left(\lambda^2 - \frac{\partial}{\partial\beta}\right) I_4(\beta) &= 2\lambda^4 A_1(x_2) - x_2 \lambda^3 A_2(x_2) \\
&\quad + \frac{\lambda^4}{\sqrt{2}} B_1(x_3) - \frac{\lambda^4}{\sqrt{2}} D_1(x_3) + \lambda^3 x_1 D_2(x_3) \\
\Leftrightarrow \left(2\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right) I_4(\beta) &= 8\mu^2 A_1(2x) - 4\sqrt{2}\mu^{\frac{3}{2}} x A_2(2x) \\
&\quad + 2\sqrt{2}\mu^2 B_1(2\sqrt{2}x) - 2\sqrt{2}\mu^2 D_1(2\sqrt{2}x) + 4\mu^{\frac{3}{2}} x D_2(2\sqrt{2}x)
\end{aligned}$$

A.4. Laplace-Transformation

Die Randkorrekturen in der Spur des Propagators von Rändern mit gemischter Randbedingung haben die Form

$$F_n(\beta) := \beta^{-n} e^{\mu\beta} \operatorname{erfc} \sqrt{\mu\beta}, \quad (107)$$

wobei n ganz- oder halbzahlig ist. Um den entsprechenden Beitrag zur Zustandsdichte zu erhalten müssen diese invers Laplace-transformiert werden. Dies kann mit Hilfe einer

A. Anhang

Rekursion erfolgen. Es gilt

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\beta}F_n(\beta) &= -n\beta^{-(n+1)}e^{\mu\beta}\operatorname{erfc}(\sqrt{\mu\beta}) + \beta^{-n}\mu e^{\mu\beta}\operatorname{erfc}(\sqrt{\mu\beta}) - \beta^{-n}e^{\mu\beta}\frac{2}{\sqrt{\pi}}e^{-\mu\beta}\frac{\sqrt{\mu}}{2\sqrt{\beta}} \\ &= -nF_{n+1}(\beta) + \mu F_n(\beta) - \beta^{-n}\sqrt{\frac{\mu}{\pi\beta}}\end{aligned}$$

und deshalb

$$nF_{n+1}(\beta) = \left(\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right)F_n(\beta) - \sqrt{\frac{\mu}{\pi}}\beta^{-n+\frac{1}{2}}.$$

Mit vollständiger Induktion kann man damit zeigen, dass für $n \in \mathbb{N}$ die folgende Formel gilt:

$$(n-1)!F_n(\beta) = \left(\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right)^{n-1}F_1(\beta) - \sqrt{\frac{\mu}{\pi}}\sum_{k=1}^{n-1}(n-k-1)!\left(\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right)^{k-1}\beta^{-(n-k+\frac{1}{2})}.$$

Analog erhält man für $n + \frac{1}{2} \in \mathbb{N}$

$$\frac{\Gamma(n)}{\Gamma(\frac{1}{2})}F_n(\beta) = \left(\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right)^{n-\frac{1}{2}}F_{\frac{1}{2}}(\beta) - \sqrt{\frac{\mu}{\pi}}\sum_{k=1}^{n-\frac{1}{2}}\frac{\Gamma(n-k)}{\Gamma(\frac{1}{2})}\left(\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right)^{k-1}\beta^{-(n-k+\frac{1}{2})}.$$

Führt man den Parameter γ mit

$$\gamma := \begin{cases} 1 & n \in \mathbb{N} \\ \frac{1}{2} & n + \frac{1}{2} \in \mathbb{N} \end{cases} \quad (108)$$

ein, so können die beiden Formeln in einer vereint werden:

$$F_n(\beta) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(n)}\left(\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right)^{n-\gamma}F_\gamma(\beta) - \sqrt{\frac{\mu}{\beta}}\sum_{k=0}^{n-\gamma}\frac{\Gamma(n-k)}{\Gamma(n)}\left(\mu - \frac{\partial}{\partial\beta}\right)^{k-1}\beta^{-(n-k+\frac{1}{2})} \quad (109)$$

beiden Formeln können nun bei der inversen Laplace-Transformation verwendet werden. Dazu werden noch die invers Laplace-Transformierten $f_{\frac{1}{2}}$ und f_1 von $F_{\frac{1}{2}}$ und F_1 benötigt. In [1] findet man

$$f_0(E) = \mathcal{L}_\beta^{-1}[F_0(\beta)](E) = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{\mu}{E}}\frac{\Theta(E)}{E+\mu} \quad (110)$$

$$f_{\frac{1}{2}}(E) = \mathcal{L}_\beta^{-1}[F_{\frac{1}{2}}(\beta)](E) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{\Theta(E)}{\sqrt{E+\mu}}, \quad (111)$$

wobei bei f_0 auch $\mu = 0$ zugelassen wird. In 4.2 wird gezeigt, dass für diesen Grenzfall $f_0(E) \rightarrow \delta(E)$ gilt, was genau die invers Laplace-Transformierte von 1 ist. Um f_1 zu erhalten kann nun die Eigenschaft der beidseitigen Laplace-Transformation

$$\int_0^E dE' f(E') = \mathcal{L}_\beta^{-1}\left[\frac{1}{\beta}F(\beta)\right](E) \quad (112)$$

für $F(\beta) = \mathcal{L}_E[f(E)](\beta)$ benutzen. Es gilt also

$$\begin{aligned} f_1(E) &= \int_0^E dE' \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\mu}{E'}} \frac{\Theta(E')}{E' + \mu} \\ &= \frac{1}{\pi\mu} \Theta(E) \int_0^E dE' \sqrt{\frac{\mu}{E'}} \frac{1}{1 + \frac{E'}{\mu}} \\ &= \frac{2}{\pi} \Theta(E) \int_0^{\sqrt{\frac{E}{\mu}}} dx \frac{1}{1 + x^2} \\ &= \frac{2}{\pi} \arctan\left(\sqrt{\frac{E}{\mu}}\right) \Theta(E) \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Identität (10) für die Potenzen von β erhält man so für beliebiges $n \in \mathbb{N}$ bzw. $n + \frac{1}{2} \in \mathbb{N}$ die invers Laplace-Transformierte zu F_n :

$$f_n(E) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(n)} (E + \mu)^{n-\gamma} f_\gamma(E) - \sqrt{\frac{\mu}{\pi}} \sum_{k=1}^{n-\gamma} \frac{\Gamma(n-k)}{\Gamma(n)\Gamma(n-k+\frac{1}{2})} (E + \mu)^{k-1} E^{n-k-\frac{1}{2}} \quad (113)$$

$$\text{mit } \gamma = \begin{cases} 1 & n \in \mathbb{N} \\ \frac{1}{2} & n + \frac{1}{2} \in \mathbb{N} \end{cases} \quad (114)$$

$$\text{und } f_\gamma(E) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \arctan\left(\sqrt{\frac{E}{\mu}}\right) \Theta(E) & \gamma = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\Theta(E)}{\sqrt{E+\mu}} & \gamma = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (115)$$

Für $n = \frac{3}{2}$ erhält man also z.B.

$$f_{\frac{3}{2}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\sqrt{E + \mu} - \sqrt{\mu}) \Theta(E), \quad (116)$$

was genau die Stammfunktion von $f_{\frac{1}{2}}$ mit der Nullstelle bei $E = 0$ ist.

Literatur

- [1] M. Abramowitz and I. A. Stegun: *Handbook of Mathematical Functions*, 10. Auflage, 1972
- [2] B. G. Korenev: *Bessel Functions and their Applications*, 2002
- [3] H.-J. Stöckmann: *Quantum Chaos: An Introduction*, 1999
- [4] M. Sieber, H. Primack, U. Smilansky, I. Ussishkin and H. Schanz: *Semiclassical Quantization of Billiards with Mixed Boundary Conditions*. J. Phys. A: Math. Gen. 28 5041, 1995
- [5] R. Balian and C. Bloch: *Distribution of Eigenfrequencies for the Wave Equation in a Finite Domain*. ANNALS OF PHYSICS: 60, 401-447, 1970
- [6] Q. Hummel, J. D. Urbina and K. Richter: *The Weyl expansion for systems of independent identical particles*. J. Phys. A: Math. Theor. 47 015101, 2014
- [7] E. H. Lieb and W. Liniger: *Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State*. Phys. Rev. 130, 1605, 1963
- [8] E. B. Manoukian: *Explicit derivation of the propagator for a Dirac delta potential*. J. Phys. A: Math. Gen. 22 67, 1989
- [9] B. Dóra: *Boundary effect on CDW: Friedel oscillations*, STM image, Europhys. Lett., 70 (3), pp. 362–368, 2005
- [10] Q. Hummel, M. Biberger: *unveröffentlicht*
- [11] G.W.F. Drake: *Springer Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 2006
- [12] Ph. A. Martin, F. Rothen: *Many-Body Problems and Quantum Field Theory: An Introduction*, Second Edition, 2004
- [13] J. G. Ratcliffe: *Foundations of Hyperbolic Manifolds*, Second Edition, 2006
- [14] F. Schwabl: *Quantenmechanik (QM I)*, 7. Auflage, 2007
- [15] M. Brack, R. K. Bhaduri: *Semiclassical Physics*, 1997

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die in irgendeiner Weise an der Entstehung dieser Arbeit beteiligt waren.

Zuallererst bedanke ich mich bei Herrn Prof. Dr. Richter für die Bereitstellung des interessanten Themas, für seine stets hilfsbereite Beantwortung von Fragen und für seine exzellenten Vorlesungen über Quantenmechanik, die ich besuchen durfte. Außerdem danke ich ihm für seine unendliche Geduld angesichts des Verzugs der Abgabe dieser Arbeit.

Als nächstes möchte ich Quirin Hummel danken, der mich bei dieser Arbeit von Anfang an kompetent beraten hat und auf jede meiner Fragen eine zufriedenstellende Antwort parat hatte. Des Weiteren danke ich ihm für die anregenden Diskussionen, die immer sehr spannend und hilfreich waren, sowie für seine Anregungen für den Aufbau der Arbeit. Außerdem danke ich ihm, dass er sich die Zeit nahm, diese Arbeit Korrektur zu lesen.

Weiter bedanke ich mich bei Dr. Juan-Diego Urbina für seine ständige Hilfsbereitschaft bei meinen Fragen. Vor allem in der Einarbeitungsphase war er mir eine große Hilfe, indem er mir wichtige Zusammenhänge in möglichst einfacher Form verdeutlichte. Wenn ich an einem Punkt der Arbeit nicht weiterkam, schaffte er es immer, mich mit seiner mitreißenden Begeisterung für die Physik zum Weitermachen zu motivieren.

Nicht zuletzt danke ich allen, die mir während meiner Arbeit am Lehrstuhl helfend zur Seite gestanden sind, wie Markus Biberger, der mir bei Fragen weiterhelfen konnte, bei denen sich unsere Arbeitsbereiche überschneiden, sowie Josef Michl für seine hervorragende EDV-Hilfe und für das Aufrechterhalten des Kaffeenachschubs.

Als letztes möchte ich meiner Familie und meinen Freunden danken, die sich in den letzten Monaten verständnisvoll gezeigt haben, obwohl sie oft auf meine Gesellschaft verzichten mussten oder gegen ihren Willen mit physikalischen Problemen konfrontiert wurden.

Plagiatserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die Zulassungsarbeit selbst angefertigt habe und keinerlei Hilfsmittel außer den in der Arbeit angegebenen verwendet habe.

Regensburg den 22. Juli 2014

Benjamin Geiger