

Instantonen

Christopher Künstler

06. Juli 2011

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Vorüberlegungen	3
2.1	Wick-Rotation	3
2.2	Sattelpunktmethode	4
2.3	Variablentransformation	6
2.4	Lösung der klassischen Bewegungsgleichung	8
2.5	Transformation der Nullmode	8
2.6	Lösung der Determinante	10
3	Instantonlösungen	13
3.1	Berechnung der Übergangsamplitude	13
3.2	Berechnung der Energieaufspaltung	14
4	Überblick	15

1 Einleitung

In vielen Problemstellungen der Physik trifft man immer wieder auf sogenannte Doppelmuldenpotentiale, zu sehen in Abbildung 1. Klassisch gibt es

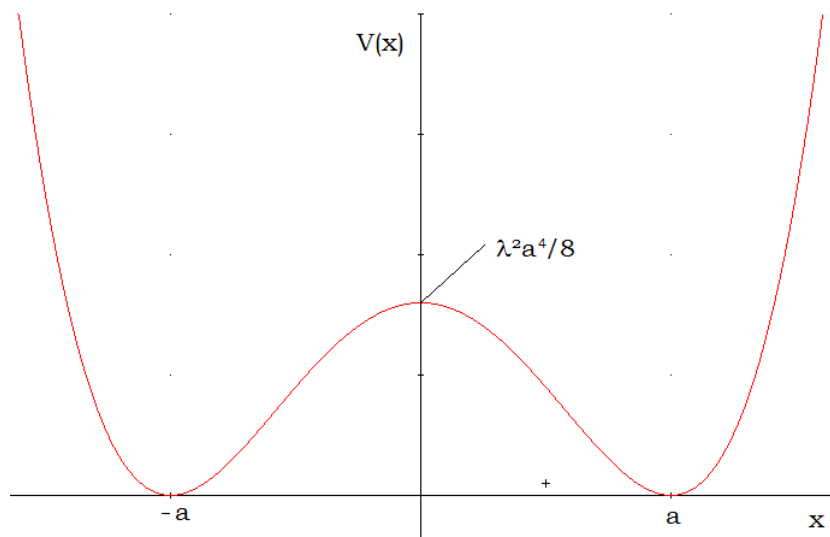


Abbildung 1: Doppelmuldenpotential der Form $V(x) = \frac{\lambda^2}{8} (x^2 - a^2)^2$

zwei mögliche Grundzustände zu $E = 0$, die entweder zum Aufenthalt des

Teilchens bei $x = a$ oder zu $x = -a$ korrespondieren. Ganz entscheidend hierbei ist die Feststellung: Hält sich das im Grundzustand befindliche Teilchen zu einem bestimmten Zeitpunkt bei z.B. $x = a$ auf, so wird man es dort auch noch in ferner Zukunft vorfinden, bliebe das System isoliert. Grundlegend anders ist die Beobachtung bei Teilchen in der Quantenmechanik. Statt bis in alle Ewigkeit in einer der Mulden bei $\pm a$ zu verbleiben, besteht für das Teilchen jetzt die Möglichkeit dem zu entkommen und den Potentialwall zu durchtunneln. Die Wahrscheinlichkeit mit der so ein Tunnelprozess stattfindet ist u.a. stark abhängig von der Kopplungskonstanten λ_P die die Höhe des Walls bestimmt. Für große λ_P kann man die beiden Potentialmulden als entkoppelt ansehen, bei der jede die gleichen diskreten Grundzustandsenergieeigenwerte E_0 mit zugehörigen Wellenfunktionen $\Psi_0(x)$ besitzt. Für den Grundzustand mit $E_0 \ll V(0)$ kann man so z.B. das Potential bis zum quadratischen Glied um $x = \pm a$ taylorentwickeln und die Grundzustandsgesamtwellenfunktion als Linearkombinationen der Wellenfunktionen beider harmonischen Oszillatorpotentiale als allgemeine Lösung angeben. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten: eine symmetrische und eine antisymmetrische Grundzustandsgesamtwellenfunktion.

$$(1) \quad \Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_0(x) + \Psi_0(-x))$$

$$(2) \quad \Psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_0(x) - \Psi_0(-x))$$

Man kann leicht nachrechnen, dass die Energieerwartungswerte zu $H = H_+ + H_-$ identisch sind.

$$(3) \quad \langle \Psi_1 | H | \Psi_1 \rangle = E_0 = \langle \Psi_2 | H | \Psi_2 \rangle$$

Damit repräsentieren $\Psi_1(x)$ und $\Psi_2(x)$ die zwei niedrigsten Gesamtwellenfunktionen bei gleichen Energieeigenwerten, wodurch der Grundzustandsenergieeigenwert entartet. Abbildung 2 und 3 zeigt dies noch einmal anschaulich. Man kann nun versuchen mit Hilfe der Störungstheorie diese Aufspaltung zu berechnen, wird hier allerdings recht schnell eines besseren belehrt. Da die Aufspaltung nur sehr klein ist entzieht sie sich der Störungstheorie und man muss andere Methoden um Rat fragen. Eine Möglichkeit bietet die WKB-Näherung der wir uns hier nicht weiter widmen. Stattdessen geht es in dieser Arbeit darum dem Problem mit Hilfe des Pfadintegralformalismus zu entgegenen.

Wie aus den vergangenen Seminaren bekannt sein sollte, lässt sich die Übergangsamplitude eines Teilchens, welches sich zu Beginn (t_i) am Ort x_i und

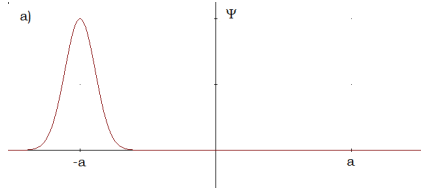


Abbildung 2: Grundzustandswellenfunktion der einzelnen Mulden

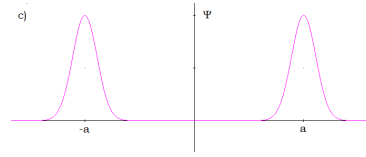
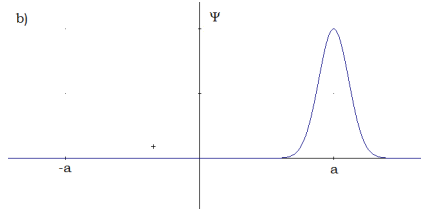
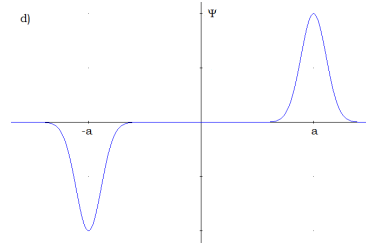


Abbildung 3: oben: Grundzustandswellenfunktion der Doppelmulde für hinreichend große λ – unten: Wellenfunktion des ersten angeregten Zustands



nach der Zeit $T = t_f - t_i$ am Ort x_f befindet, mit dem Pfadintegral als

$$(4) \quad K = \langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle = \left\langle x_f, \frac{T}{2} \middle| x_i, -\frac{T}{2} \right\rangle = \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar}HT} | x_i \rangle = \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}$$

darstellen. Dabei wurde o.B.d.A. $t_f = \frac{T}{2}$ und $t_i = -\frac{T}{2}$ symmetrisch um den Nullpunkt gewählt. $S[x(t)]$ ist die klassische Wirkung eines Pfades $x(t)$.

$$S[x] = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x) \right) = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{\lambda_P^2}{8} (x^2 - a^2)^2 \right)$$

2 Vorüberlegungen

2.1 Wick-Rotation

Betrachtet man die Energiebilanz des Teilchens in der Doppelmulde

$$(5) \quad E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x),$$

so fällt auf, dass nichttriviale klassische Lösungen für $E = 0$ nicht existieren, denn $\dot{x}^2 \geq 0$. Diese Erkenntnis ist nichts neues und wurde auch schon in der Einleitung erwähnt. Aus der Forderung der Existenz des Tunnelns, lassen sich nichttriviale Lösungen konstruieren, indem man interpretatorisch dem Teilchen die Bewegung in imaginärer Zeit τ gestattet, also $t \rightarrow -i\tau$. Es

wird sich später herausstellen, dass die Bewegung in imaginärer Zeit nur für einen kurzen Augenblick (engl. for an instant) der Fall ist, daher auch der Name Instanonen. Quantenmechanisch hat das Teilchen also die Möglichkeit spontan in imaginärer Zeit zu leben. Mathematisch wird dadurch

$$(6) \quad E = -\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x)$$

und für $E = 0$ existieren nichttriviale Lösungen. Die klassische Wirkung $S[x(t)]$ geht damit in

$$(7) \quad S[x] = i \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x) \right) = iS_E[x]$$

über, mit der jetzt euklidischen Wirkung $S_E[x]$ in imaginärer Zeit. Die Übergangsamplitude K ändert sich damit einhergehend zu

$$(8) \quad K_E = \int Dx e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x]}.$$

In imaginärer Zeit bewegt sich das Teilchen also so, als würde es sich in einem invertierten Potential befinden. Diese Drehung der Zeit in der komplexen Zahlenebene um $-\frac{\pi}{2}$ bezeichnet man auch als Wick-Rotation.

2.2 Sattelpunktmethode

Um

$$(9) \quad K_E = \int Dx e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x]} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta} \right)^{\frac{N}{2}} \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x]}$$

zu berechnen, muss man formal allerdings wieder auf die ursprüngliche Form

$$(10) \quad S_E[x] = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{\lambda_P^2}{8} (x^2 - a^2)^2 \right)$$

$$(11) \quad = \sum_{j=0}^{N-1} \delta \left(\frac{1}{2}m \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\delta} \right)^2 + \frac{\lambda_P^2}{8} \left(\left(\frac{x_{j+1} + x_j}{2} \right)^2 - a^2 \right)^2 \right)$$

von $S_E[x]$ zurückgreifen, mit $x_N = x_f$ und $x_0 = x_i$. Dieses Integral ist analytisch nicht lösbar. Um dennoch für dieses Funktional-Integral eine gute

Näherungslösung zu erhalten, betrachten wir zuerst einmal das Integral der Form

$$(12) \quad I = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{\epsilon} f(x)} \quad \text{mit} \quad f(x) \longrightarrow +\infty \text{ für } x \longrightarrow \pm\infty$$

mit ϵ hinreichend klein (vgl. \hbar). Hat $f(x)$ nun mindestens ein Minimum im Punkt x_0 , so lässt sich das Integral durch

$$(13) \quad I \approx \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{\epsilon} (f(x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x-x_0)^2)}$$

approximieren, also der Entwicklung von $f(x)$ bis zur quadratischen Ordnung. Als Gauß-Integral lässt sich dieses dann vollständig analytisch berechnen. Im Falle mehrerer Minima $x_1 \dots x_n$ wird I als Summe aller um alle Minima entwickelten Integrale genähert, also

$$(14) \quad I \approx I_1 + \dots + I_n.$$

Die Tatsache, dass es sich in unserem Fall um ein Funktional handelt ändert nichts an der Vorgehensweise. Die Minima von $S_E[x]$ berechnen sich wie üblich mittels nullsetzen der ersten Ableitung und Überprüfung durch die zweite Ableitung.

$$(15) \quad \frac{\delta S_E[x]}{\delta x(\tau)} = \frac{\delta}{\delta x(\tau)} \int d\tau' \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2(\tau') + V(x(\tau')) \right)$$

$$(16) \quad = \int d\tau' \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{\delta \dot{x}(\tau')}{\delta x(\tau)} \right) \frac{\delta \dot{x}^2(\tau')}{\delta \dot{x}(\tau')} + \frac{\delta V(x(\tau'))}{\delta x(\tau)} \right)$$

$$(17) \quad = \int d\tau' \delta(\tau - \tau') \left(m \left(-\frac{\partial}{\partial \tau'} \right) \dot{x}(\tau') + V'(x(\tau')) \right)$$

$$(18) \quad = -m\ddot{x}(\tau) + V'(x(\tau)) \stackrel{!}{=} 0$$

Wie nicht anders zu erwarten, ist dies gerade die klassische euklidische Bewegungsgleichung, denn der klassische (euklidische) Pfad ist nunmal jener der minimalen Wirkung. Bevor wir uns aber auf die Suche nach Lösungen der Bewegungsgleichung machen, entwickeln wir noch formal $S_E[x]$ um den klassischen Pfad $x_{kl}(\tau)$.

$$(19) \quad S_E[x] \approx S_E[x_{kl}(\tau)] + \frac{1}{2} \int \int d\tau_1 d\tau_2 y(\tau_1) \frac{\delta^2 S_E[x_{kl}(\tau)]}{\delta x_{kl}(\tau_1) \delta x_{kl}(\tau_2)} y(\tau_2)$$

$$(20) \quad = S_E[x_{kl}(\tau)] + \frac{1}{2} \int d\tau y(\tau) \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(x_{kl}(\tau)) \right) y(\tau)$$

Dabei ist $y = x - x_{kl}$ ein Variationspfad mit den Randbedingungen $y(-\frac{T}{2}) = y(\frac{T}{2}) = 0$.

2.3 Variablentransformation

Zunächst ersetzt man nun die Dx -Integration durch eine über Dy . Da x_{kl} fest vorgegeben ist, ist die zugehörige Determinante der Jakobi-Matrix $\text{Det}J = 1$ und K_E wird damit zu

$$(21) \quad K_E = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{kl}]} \int Dy e^{-\frac{1}{2\hbar} \int d\tau y(\tau) \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(x_{kl}(\tau)) \right) y(\tau)}$$

mit

$$V''(x_{kl}) = \frac{\lambda_P^2}{2} (3x_{kl}^2 - a^2).$$

Da

$$(22) \quad \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(x_{kl}(\tau)) \right) y(\tau)$$

formal $\hat{H}\Psi$ der Schrödinger-Gleichung entspricht, existiert auf Grund der Hermitizität des Operators ein vollständiges System von (normierten) Eigenfunktionen y_n mit zugehörigen Eigenwerten λ_n , die zudem die Orthogonalitätsrelation

$$(23) \quad \int d\tau y_n(\tau) y_m(\tau) = \delta_{nm}$$

erfüllen. Die Vollständigkeit impliziert die Möglichkeit der Entwicklung des Variationspfades $y(\tau)$ nach den Eigenfunktionen y_n mit den zugehörigen Koeffizienten c_n ,

$$(24) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} y(\tau) = \sum_{n=0}^{N-2} c_n y_n(\tau).$$

Setzt man obige Entwicklung in Gleichung (21) ein, so geht die Übergangswahrscheinlichkeit K_E unter Ausnutzung der Orthogonalitätsrelation über in

$$(25) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} K_E = e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{kl}]} \int Dy e^{-\frac{1}{2\hbar} \sum_{n=0}^{N-2} \lambda_n c_n^2}.$$

Da die Abhängigkeit des Variationspfades nun in den c_n steckt, führt man eine Variablentransformation $Dy \rightarrow Dc$ durch. Das Integralmaß Dc ist dabei durch

$$(26) \quad Dc = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta} \right)^{\frac{N}{2}} \text{Det} J' \prod_{n=0}^{N-2} dc_n = A \cdot \prod_{n=0}^{N-2} dc_n$$

gegeben. Die Determinante der Jakobimatrix $\text{Det}J'$ ist zwar nicht bekannt, da es sich aber um eine lineare Transformation handelt ist diese konstant und kann in eine noch zu bestimmende Konstante A hineingezogen werden. Das verbleibende Integral ist Gaußscher Art und kann leicht gelöst werden. K_E nimmt damit die Form

$$(27) \quad K_E = A \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x_{\text{kl}}]} \prod_{n=1}^{N-2} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\lambda_n}} \int dc_0 e^{-\frac{\lambda_0}{2\hbar} c_0^2}$$

$$= A \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x_{\text{kl}}]} \frac{1}{\sqrt{\text{Det}' \frac{1}{2\pi\hbar} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(x_{\text{kl}})\right)}} \int dc_0 e^{-\frac{\lambda_0}{2\hbar} c_0^2}$$

an. Det' soll dabei andeuten, dass die sogenannte Nullmode nicht enthalten ist, denn für die klassische Bewegungsgleichung gilt

$$(28) \quad -m\ddot{x}_{\text{kl}}(\tau) + V'(x_{\text{kl}}(\tau)) = 0$$

und damit

$$(29) \quad \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(x_{\text{kl}}(\tau))\right) \dot{x}_{\text{kl}}(\tau) = 0.$$

$\dot{x}_{\text{kl}}(\tau)$ ist also eine (nicht normierte) Eigenfunktion zu obigem Operator mit Eigenwert $\lambda_0 = 0$. Als direkte Folge erfährt das c_0 Integral keine Dämpfung. Bei genauerer Untersuchung stellt man allerdings fest, dass die Ursache hierfür bei der zuvor angewandten Näherungsmethode (Sattelpunktmethode) liegt. Wir erinnern uns die Funktion $f(x)$ um das Minimum x_0 entwickelt zu haben. Ist die Funktion allerdings z.B. rotationssymmetrisch, so besitzt diese kein ausgezeichnetes Minimum. Vielmehr liegt das Minimum auf einem ganzen Kreisring. Eine solche Symmetrie führt bei der Anwendung der Sattelpunktmethode immer zu Null-Eigenwerten (Nullmoden) der Hesse-Matrix. Im Falle des Funktionals $S_E[x]$ liegt eine solche Symmetrie in Form der Zeittranslationsinvarianz der Bewegungsgleichung vor, denn nicht nur $x_{\text{kl}}(\tau)$ ist Minimum von $S_E[x]$ sondern auch $x_{\text{kl}}(\tau + \tau_c)$. Es liegt also nahe c_0 als Funktion von τ_c aufzufassen und die c_0 -Integration in eine über τ_c zu transformieren. Bevor wir uns dem Problem widmen kommen wir aber noch einmal auf die Lösung der klassischen Bewegungsgleichung zurück.

2.4 Lösung der klassischen Bewegungsgleichung

Um Lösungen für $E = 0$ zu finden betrachten wir die euklidische Energiebilanz

$$(30) \quad E_E = -\frac{1}{2}m\dot{x}_{\text{kl}}^2 + V(x_{\text{kl}}) = 0$$

$$(31) \quad \iff \dot{x}_{\text{kl}} = \pm \sqrt{\frac{2V(x_{\text{kl}})}{m}} = \pm \sqrt{\frac{\lambda_P^2}{4m}} (x_{\text{kl}}^2 - a^2)$$

Dies ist eine DGL erster Ordnung und sie lässt sich durch Separation der Variablen sowie unter Berücksichtigung der Randbedingungen

$$\lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} x_{\text{kl}}(\tau) = \pm a$$

recht einfach lösen. Tatsächlich gibt es sogar eine ganze Fülle von Lösungsfunktionen. Die hierfür interessanten Lösungen sind zum einen natürlich die triviale Lösung

$$(32) \quad x_{\text{kl}} = \pm a,$$

nicht-triviale Lösungen sind allerdings von besonderem Interesse

$$(33) \quad x_{\text{kl}} = \pm a \tanh\left(\frac{\omega}{2}(\tau - \tau_c)\right) \quad \text{mit} \quad \omega = \sqrt{\frac{\lambda_P^2 a^2}{m}}.$$

Anschaulich rollt das Teilchen hiernach in imaginärer Zeit durch das Tal des invertierten Potentials bei $x = 0$ um dann bei $x = \pm a$ zum liegen zu kommen. Dementsprechend befindet sich das Teilchen zum größten Teil bei $\pm a$, also im Grundzustand, bis auf einen kurzen Augenblick (zeitlich lokalisiert) während es zwischen $\pm a$ interpoliert. Daher werden diese Lösungen auch Instanton/Anti-Instanton bezeichnet. Abbildung 4 zeigt eine Anti-Instanton-Instanton Konfiguration graphisch.

2.5 Transformation der Nullmode

Wie wir im vorletzten Kapitel bereits festgestellt haben, liegt der Divergenz des Integrals in (27) eine Symmetrie zugrunde, die auf die Invarianz der Bewegungsgleichung gegenüber Zeittranslation zurückzuführen ist. Da diese Divergenz allerdings keine Echte darstellt, sondern infolge der Sattelpunktnäherung auftritt, bietet sich eine Variablentransformation der c_0 -Integration auf die Zeitkoordinate τ_c (Zentrum des Instantons) an, die für die Divergenz

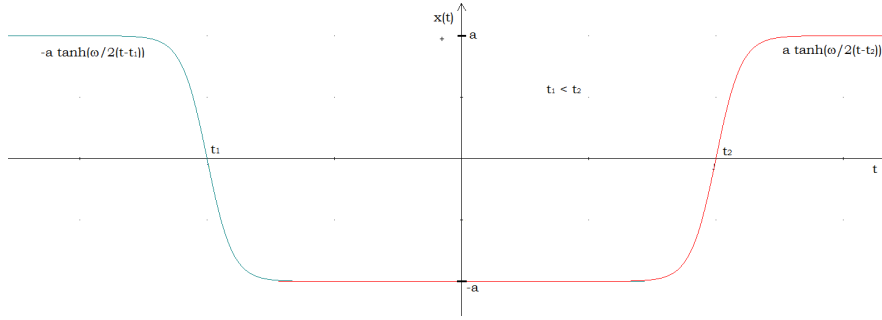


Abbildung 4: Lösung der Bewegungsgleichung ($\propto \tanh(\tau - \tau_c)$) für ein Teilchen minimaler Energie, das die Randbedingungen $x(-T/2) = x(T/2) = a$ erfüllt (Anti-Instanton-Instanton)

verantwortlich ist. Um die Determinante der Jakobi-Matrix zu ermitteln, rufen wir uns noch einmal die Proportionalität von \dot{x}_{kl} zur Eigenfunktion mit Eigenwert 0 in Erinnerung.

$$(34) \quad \dot{x}_{\text{kl}}(\tau) \propto y_0(\tau) \quad \implies \quad 1 = \int y_0^2(\tau) d\tau = N_N^2 \int \dot{x}_{\text{kl}}^2(\tau) d\tau$$

$$\implies \quad N_N = \left(\frac{2}{3} a^3 \sqrt{\frac{\lambda_P^2}{m}} \right)^{-\frac{1}{2}} = \left(\frac{2}{3} \omega a^2 \right)^{-\frac{1}{2}}$$

Da nun die Entwicklung der Trajektorie $x(\tau)$ um den klassischen Pfad $x_{\text{kl}}(\tau - \tau_c)$ für beliebige Zeittranslationen τ_c möglich ist, gilt für den Variationspfad:

$$y(\tau - \tau_c) = x(\tau) - x_{\text{kl}}(\tau - \tau_c) \quad \Leftrightarrow \quad x(\tau) = x_{\text{kl}}(\tau - \tau_c) + y(\tau - \tau_c)$$

$$(35) \quad x(\tau) = x_{\text{kl}}(\tau - \tau_c) + \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{N-2} c_n y_n(\tau - \tau_c)$$

$x(\tau)$ bleibt hierbei unabhängig von τ_c .

Aus (35) folgt daher direkt:

$$(36) \quad \frac{dx(\tau)}{d\tau_c} = 0 = -\dot{x}_{\text{kl}}(\tau - \tau_c) + \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{N-2} \left(\frac{dc_n}{d\tau_c} y_n(\tau - \tau_c) - c_n \dot{y}_n(\tau - \tau_c) \right)$$

$$(37) \quad \implies \quad \frac{1}{N_N} y_0(\tau - \tau_c) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{N-2} \left(\frac{dc_n}{d\tau_c} y_n(\tau - \tau_c) - c_n \dot{y}_n(\tau - \tau_c) \right)$$

Multiplikation mit $y_0(\tau - \tau_c)$ und Integration über τ liefert:

$$(38) \quad \frac{1}{N_N} = \frac{dc_0}{d\tau_c} - \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{N-2} c_n \int \dot{y}_n(\tau - \tau_c) y_0(\tau - \tau_c) d\tau$$

Vernachlässigt man die hinteren Terme, so ergibt sich in führender Ordnung für die Transformation der c_0 -Integration in eine über τ_c

$$(39) \quad \int_{-\infty}^{\infty} dc_0 = \frac{1}{N_N} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau_c.$$

Als Zwischenstand für die Übergangsamplitude K_E halten wir damit fest:

$$(40) \quad K_E = \left\langle -a \left| e^{-\frac{1}{\hbar} H T} \right| a \right\rangle \\ = A \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x_{kl}]} \frac{1}{\sqrt{\text{Det}' \frac{1}{2\pi\hbar} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(x_{kl}) \right)}} \cdot \frac{1}{N_N} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau_c$$

Für die Wirkung der klassischen euklidischen Bewegungsgleichung erhält man:

$$(41) \quad S_E[x_{kl}] = \int d\tau \left(\frac{1}{2} m \dot{x}_{kl}^2 + V(x_{kl}) \right) = \int m \dot{x}_{kl}^2 d\tau = \frac{m}{N^2} = \frac{2}{3} m \omega a^2$$

2.6 Lösung der Determinante

Als allgemeine Lösung hilft uns Gleichung (40) noch nicht wirklich weiter. Offensichtlich steckt die eigentliche Arbeit in der Lösung der Determinante. Genauer gesagt ist sämtliche Vorarbeit bis hier für eine Vielzahl von Problemen so gültig. Um nun konkret zu werden widmen wir uns zuerst folgendem Ausdruck:

$$(42) \quad \Delta(\lambda) = \frac{\text{Det} \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(x_{kl}) \right) - \lambda \right)}{\text{Det} \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + m\omega^2 \right) - \lambda \right)} = \frac{\prod_{n=0}^{\infty} (\lambda_n - \lambda)}{\prod_{n=0}^{\infty} (\lambda_n^0 - \lambda)}$$

Mit der Erkenntnis $\lambda_0 = 0$ sieht man sofort ein, dass $\Delta(\lambda = 0) = 0$ gelten muss. Leitet man diesen Ausdruck aber nach λ ab, so lässt sich leicht zeigen, dass an der Stelle Null

$$(43) \quad -\frac{\partial \Delta(\lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0} = \frac{\prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n}{\prod_{n=0}^{\infty} \lambda_n^0} = \frac{\text{Det}' \frac{1}{2\pi\hbar} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(x_{kl}) \right)}{\text{Det} \frac{1}{2\pi\hbar} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + m\omega^2 \right)}$$

gilt. Dieser Zusammenhang wird sich später noch als recht nützlich erweisen. Zunächst aber betrachten wir nochmal den schrödingerartigen Operator (22) diesmal aber im Limes großer Zeiten, d.h. wir suchen Lösungen der Eigenwertgleichung

$$(44) \quad \lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(x_{kl}(\tau)) \right) f_{1,2}(\tau, \lambda) = \lambda f_{1,2}(\tau, \lambda)$$

$$(45) \quad \implies \frac{1}{2\pi\hbar} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \lambda_P^2 a^2 \right) f_{1,2}(\tau, \lambda) = \lambda f_{1,2}(\tau, \lambda).$$

Die Indizes (1,2) sollen andeuten, dass wir uns für zwei linear unabhängige Lösungen interessieren. Mit Hilfe der e-Funktion als übliche Lösung dieser einfachen DGL, lassen sich durch geschickte Linearkombinationen asymptotische Lösungen bilden, die zueinander linear unabhängig sind

$$(46) \quad f_1(\tau, \lambda) = \begin{cases} e^{ik\tau} & \text{für } \lim_{\tau \rightarrow \infty} \\ A_1(\lambda)e^{-ik\tau} + B_1(\lambda)e^{ik\tau} & \text{für } \lim_{\tau \rightarrow -\infty} \end{cases}$$

$$(47) \quad f_2(\tau, \lambda) = \begin{cases} A_2(\lambda)e^{ik\tau} + B_2(\lambda)e^{-ik\tau} & \text{für } \lim_{\tau \rightarrow \infty} \\ e^{-ik\tau} & \text{für } \lim_{\tau \rightarrow -\infty} \end{cases}$$

mit $k^2 = \frac{2\pi\hbar\lambda}{m} - \omega^2$ und $\omega^2 = \frac{V''(\pm a)}{m} = \frac{\lambda_P^2 a^2}{m}$.

Zur Überprüfung der linearen Unabhängigkeit bietet sich die Wronski Determinante an:

$$(48) \quad W(f_1(\tau, \lambda), f_2(\tau, \lambda)) = f_1 \frac{\partial f_2}{\partial \tau} - \frac{\partial f_1}{\partial \tau} f_2$$

Mit ihr lässt sich unter anderem auch durch Auswertung in beiden Limes $\tau \rightarrow \pm\infty$

$$(49) \quad B_1(\lambda) = B_2(\lambda) = \Delta(\lambda)$$

zeigen. Zudem müssen beide Funktionen die Randbedingungen bei $\lambda = 0 \implies k = i\omega$ erfüllen. Da die Eigenfunktion zum Eigenwert $\lambda = 0$ bereits bekannt ist, muss offensichtlich gelten:

$$(50) \quad \lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} f_{1,2}(\tau, \lambda = 0) \propto y_0(\tau)$$

$$(51) \quad \lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} y_0(\tau) = N \frac{a\omega}{2} \left(1 - \tanh\left(\frac{\omega}{2}(\tau - \tau_c)\right) \right) = 2a\omega N e^{\mp\omega\tau}$$

Wählt man nun

$$(52) \quad A_1(\lambda = 0) = A_2(\lambda = 0) = 1$$

$$(53) \quad B_1(\lambda = 0) = B_2(\lambda = 0) = 0$$

so ergibt sich der Zusammenhang

$$(54) \quad \lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} f_{1,2}(\tau, \lambda = 0) = e^{\mp\omega\tau} = \frac{1}{2a\omega N} y_0(\tau).$$

Als nächstes geht man wieder von Gleichung (45) aus. Separat stellt man diese für $f_1(\tau, \lambda_1)$ und $f_2(\tau, \lambda_2)$ auf und multipliziert anschließend von links mit der jeweils anderen Lösungsfunktion, also:

$$(55) \quad f_2(\tau, \lambda_2) \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + m\omega^2 \right) f_1(\tau, \lambda_1) = 2\pi\hbar\lambda_1 f_1(\tau, \lambda_1) f_2(\tau, \lambda_2)$$

$$(56) \quad f_1(\tau, \lambda_1) \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + m\omega^2 \right) f_2(\tau, \lambda_2) = 2\pi\hbar\lambda_2 f_1(\tau, \lambda_1) f_2(\tau, \lambda_2)$$

Subtraktion (55)-(56) liefert:

$$(57) \quad \frac{\partial}{\partial \tau} \left(f_1(\tau, \lambda_1) \frac{\partial f_2(\tau, \lambda_2)}{\partial \tau} - \frac{\partial f_1(\tau, \lambda_1)}{\partial \tau} f_2(\tau, \lambda_2) \right) \\ = \frac{2\pi\hbar}{m} (\lambda_1 - \lambda_2) f_1(\tau, \lambda_1) f_2(\tau, \lambda_2)$$

Setzt man noch $\lambda_2 = 0$, leitet nach λ_1 ab und setzt auch $\lambda_1 = 0$, so folgt:

$$(58) \quad \frac{\partial^2}{\partial \lambda_1 \partial \tau} \left(f_1(\tau, \lambda_1) \frac{\partial f_2(\tau, 0)}{\partial \tau} - \frac{\partial f_1(\tau, \lambda_1)}{\partial \tau} f_2(\tau, 0) \right) \Big|_{\lambda_1=0} \\ = \frac{2\pi\hbar}{m} f_1(\tau, 0) f_2(\tau, 0) = \frac{2\pi\hbar}{m} \frac{1}{(2a\omega N)^2} y_0^2(\tau)$$

Zum Schluss integriert man beide Seiten von $-\frac{T}{2}$ bis $\frac{T}{2}$ ($T \rightarrow \infty$) über τ und erhält damit den Zusammenhang

$$(59) \quad \lim_{\lambda_1 \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda_1} \left(f_1(\tau, \lambda_1) \frac{\partial f_2(\tau, 0)}{\partial \tau} - \frac{\partial f_1(\tau, \lambda_1)}{\partial \tau} f_2(\tau, 0) \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} \\ = -2\omega \frac{\partial B_1(\lambda_1)}{\partial \lambda_1} \Big|_{\lambda_1=0} = \frac{2\pi\hbar}{m (2a\omega N)^2}.$$

Jetzt kann man sich die schon zuvor abgeleitete Gleichheit in 49 zunutze machen.

$$(60) \quad -\frac{\partial B_1(\lambda_1)}{\partial \lambda_1} \Big|_{\lambda_1=0} = -\frac{\partial \Delta(\lambda_1)}{\partial \lambda_1} \Big|_{\lambda_1=0} = \frac{2\pi\hbar}{2m\omega (2a\omega N)^2}$$

Erstaunlicherweise ist die linke Seite aber nichts anderes als die zu interessierende Größe, wie schon in (43) gezeigt.

$$(61) \implies \frac{\text{Det}' \frac{1}{2\pi\hbar} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(x_{\text{kl}}) \right)}{\text{Det} \frac{1}{2\pi\hbar} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + m\omega^2 \right)} = \frac{2\pi\hbar}{2m\omega (2a\omega N)^2}$$

Damit lässt sich dann auch die vollständige Lösung des Ein-Instanton ($a \rightarrow -a$) angeben.

$$(62) \quad K_E = \left\langle -a | e^{-\frac{1}{\hbar}HT} | a \right\rangle$$

$$= A \cdot \frac{1}{\sqrt{\text{Det}' \frac{1}{2\pi\hbar} \left(-m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(x_{\text{kl}}) \right)}} e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{\text{kl}}]} \cdot \frac{1}{N_N} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau_c$$

$$= A \cdot \sqrt{\frac{\frac{4ma^2\omega^3}{\pi\hbar}}{\text{Det} \frac{m}{2\pi\hbar} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \omega^2 \right)}} e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{\text{kl}}]} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau_c$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \cdot \sqrt{\frac{4ma^2\omega^3}{\pi\hbar}} e^{-\frac{1}{\hbar} \frac{2}{3} m\omega a^2} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau_c$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \cdot R \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau_c$$

Im vorletzten Schritt wurde noch die Lösung des einfachen harmonischen Oszillators ausgenutzt.

3 Instantonlösungen

3.1 Berechnung der Übergangsamplitude

Die zuvor berechnete Übergangsamplitude berücksichtigt allerdings nur den einmaligen Übergang. Praktisch sind aber auch mehrfache Übergänge möglich. Tunnelt nämlich das Teilchen von a nach $-a$, so dürfte nichts dagegensprechen, wenn es nach einer kleinen Totzeit wieder zurücktunneln würde und im Anschluss wieder nach $-a$. Dies muss man bei der Rate berücksichtigen und in der Tat sind auch höhere Übergangsordnungen beteiligt, 5, 7, 9, 11, ... Entscheidend sind dabei nur die Randbedingungen. Ein Teilchen mit den Randbedingungen $a \rightarrow a$ würde ja klassisch für immer bei a verbleiben. Quantenmechanisch sind jetzt auch die Übergänge $a \rightarrow -a \rightarrow a$ usw. also alle geradzahigen Übergangsmöglichkeiten beteiligt. Dies liegt unter anderem daran, dass die Zeiten bis ein Übergang auftritt in der Praxis

sehr klein gegenüber den Beobachtungszeiten sind. Für das obige Beispiel (Abbildung 4) der quadratischen Übergangsrate, mit den Randbedingungen $a \rightarrow a$, ergibt sich damit

$$\begin{aligned} K_E^2 &= \left\langle a \left| e^{-\frac{1}{\hbar} H \left(\frac{T}{2} - \tau_{c_2} \right)} \right| -a \right\rangle \left\langle -a \left| e^{-\frac{1}{\hbar} H \left(\frac{T}{2} + \tau_{c_2} \right)} \right| a \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega}{2} \left(\frac{T}{2} - \tau_{c_2} \right)} e^{-\frac{\omega}{2} \left(\frac{T}{2} + \tau_{c_2} \right)} \cdot R^2 \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau_{c_2} \int_{-\frac{T}{2}}^{\tau_{c_2}} d\tau_{c_1} \end{aligned}$$

mit $\tau_{c_1} \ll \tau_{c_2}$.

Allgemein kann ein n-Instanton auch geschrieben werden als:

$$\begin{aligned} (63) \quad K_E^n &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \cdot R^n \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau_{c_n} \cdots \int_{-\frac{T}{2}}^{\tau_{c_3}} d\tau_{c_2} \int_{-\frac{T}{2}}^{\tau_{c_2}} d\tau_{c_1} \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \cdot R^n \frac{T^n}{n!} \end{aligned}$$

mit $-\frac{T}{2} < \tau_{c_1} < \tau_{c_2} < \cdots < \tau_{c_n} < \frac{T}{2}$.

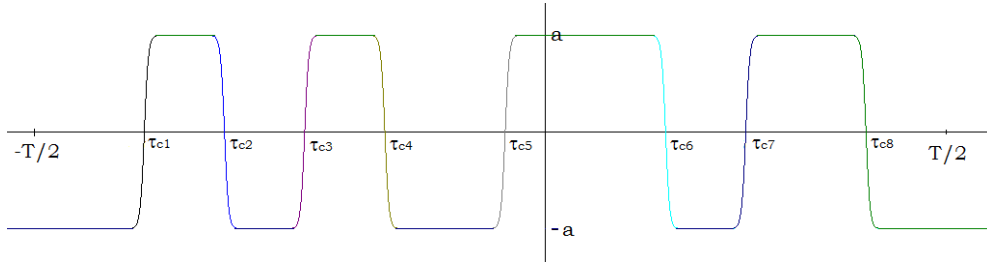


Abbildung 5: Multi-Instanton Konfiguration ($-a \rightarrow -a$)

3.2 Berechnung der Energieaufspaltung

Wie zuvor bereits erwähnt, kann abhängig von den Randbedingungen entweder nur eine gerade oder ungerade Anzahl an Instantonübergängen stattfinden. Erlaubte Übergänge tragen allerdings sämtlich zur Gesamtübergangsrate bei, so dass sich diese bei einer Randbedingung $a \rightarrow a$ zu

$$\begin{aligned} (64) \quad \left\langle a \left| e^{-\frac{1}{\hbar} HT} \right| a \right\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \cdot \frac{(RT)^{2n}}{(2n)!} \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \cosh(RT) \end{aligned}$$

ergibt. Analog erhält man für den Fall $a \rightarrow -a$:

$$(65) \quad \langle -a | e^{-\frac{1}{\hbar}HT} | a \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega T}{2}} \sinh(RT)$$

Um nun die Energieaufspaltung zu berechnen schiebt man vor den Ket-Vektor eine vollständige Eins ein und berücksichtigt nur die ersten beiden Terme. Dies ist legitim, da die gegenüber den beiden niedrigsten Zuständen verhältnismäßig weit höher liegenden Energieniveaus in Kombination mit der Limesbildung ($\lim_{T \rightarrow \infty}$) die e-Funktion wesentlich stärker abfallen lassen, so dass alle diese Terme vernachlässigbar sind.

$$(66) \quad \begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} \langle \pm a | e^{-\frac{1}{\hbar}HT} | a \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{\hbar}E_n T} \langle \pm a | n \rangle \langle n | a \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \begin{cases} \left(e^{-(\frac{\omega}{2}-R)T} + e^{-(\frac{\omega}{2}+R)T} \right) & \text{für } (a \rightarrow a) \\ \left(e^{-(\frac{\omega}{2}-R)T} - e^{-(\frac{\omega}{2}+R)T} \right) & \text{für } (a \rightarrow -a) \end{cases} \\ &\approx e^{-\frac{1}{\hbar}E_0 T} \langle \pm a | 0 \rangle \langle 0 | a \rangle + e^{-\frac{1}{\hbar}E_1 T} \langle \pm a | 1 \rangle \langle 1 | a \rangle \\ &= e^{-\frac{1}{\hbar}E_0 T} \varphi_0(\pm a) \varphi_0^*(a) + e^{-\frac{1}{\hbar}E_1 T} \varphi_1(\pm a) \varphi_1^*(a) \end{aligned}$$

Da der Grundzustand symmetrisch und der erste angeregte Zustand antisymmetrisch ist, lassen sich durch Vergleich der Exponenten die Energien der niedrigsten beiden Zustände direkt ablesen. Man erhält:

$$(67) \quad E_0 = \hbar \left(\frac{\omega}{2} - R \right)$$

$$(68) \quad E_1 = \hbar \left(\frac{\omega}{2} + R \right)$$

Die Aufspaltung gegenüber dem Grundzustand des einfachen harmonischen Oszillators beträgt demnach $\hbar R$ und die Energiedifferenz der beiden Zustände:

$$(69) \quad \Delta E = E_1 - E_0 = 2\hbar R = 2\hbar \cdot \sqrt{\frac{4ma^2\omega^3}{\pi\hbar}} e^{-\frac{1}{\hbar}\frac{2}{3}m\omega a^2}$$

4 Überblick

Zusammenfassend kann man also festhalten: Instantonen sind zeitlich lokalisierte Lösungen der klassischen euklidischen Bewegungsgleichung. Ein Teilchen im Grundzustand des Doppelmuldenpotentials befindet sich nur bis auf

einen kurzen Augenblick dort (except for an instant). Daher der Name Instanton.

Der Pfadintegralformalismus eignet sich besonders gut um solch kleine Energieaufspaltungen, die der Störungstheorie verborgen bleiben, in guter Näherung zu berechnen. Als Vergleich bietet sich die Näherungslösung mittels WKB-Methode an.

$$\Delta E_{\text{PI}} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sqrt{ma^2 \hbar \omega^3} e^{-\frac{1}{\hbar} \frac{2}{3} m \omega a^2}$$

$$\Delta E_{\text{WKB}} = \frac{4e}{\pi} \sqrt{ma^2 \hbar \omega^3} e^{-\frac{1}{\hbar} \frac{2}{3} m \omega a^2}$$

Hier zeigt sich nur eine kleine Abweichung durch den Vorfaktor $\frac{1}{\sqrt{\pi}} \approx 0,56$ gegenüber $\frac{e}{\pi} \approx 0,86$. Als Haken würde man hier nur die unter Umständen sehr kompliziert (d.h. ungewohnt) werdenden Rechnungen bemängeln. Als Alternativlösungsverfahren steht es jedem aber selber frei, ob er obige Rechnungen weiterhin im ∞ -dimensionalen Hilbertraum durchführen oder auf diese recht elegante Methode zurückgreifen möchte.