Der Harmonische Oszillator in Pfadintegraldarstellung

Jörg Wassenberg

26.04.2000

1 Einleitung

In der Pfadintegraldarstellung der Quantenmechanik berechnet man Propagatoren $\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle$, mit deren Hilfe sich die Zeitentwicklung einer Wellenfunktion $\psi(q,t)$ zwischen zwei Zeitpunkten t_i und t_f bestimmen läßt:

$$\psi(q_f, t_f) = \int dq_i \, \langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle \psi(q_i, t_i) \tag{1}$$

Falls die Hamiltonfunktion des Systems die Form $H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$ hat, kann der Propagator folgendermaßen berechnet werden:

$$\begin{aligned} \langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle &= \lim_{N\to\infty, \varepsilon\to 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int dq_1 \cdots dq_{N-1} \times \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\varepsilon} \right)^2 - V(q_n) \right] \right\} \end{aligned} \tag{2}$$

Hier sind in das Zeitintervall $[t_i, t_f]$ $N-1$ äquidistante Stützstellen t_n im Abstand $\varepsilon = \frac{t_f - t_i}{N}$ eingefügt worden. Im Grenzfall $N \to \infty$ steht im Exponenten die Wirkung $S[q]$ entlang des Weges $q(t)$:

$$\lim_{N\to\infty, \varepsilon\to 0} \frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\varepsilon} \right)^2 - V(q_n) \right] = \frac{i}{\hbar} S[q] \tag{3}$$

Anhand des harmonischen Oszillators soll in diesem Vortrag die konkrete Berechnung eines Propagators demonstriert werden.

2 Eindimensionaler Harmonischer Oszillator

2.1 Koordinatentransformation

Die Hamiltonfunktion des eindimensionalen harmonischen Oszillators hat die Form

$$H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 q^2 \tag{4}$$

Für diese Hamiltonfunktion ist der Propagator gemäß (2) bzw. (3) zu berechnen. Dazu soll zuerst ein Ausdruck für $S[q]$ hergeleitet werden. Die Wirkung ist definiert als Zeitintegral über die Lagrangefunktion $L(q,\dot{q},t)$:

$$S[q] = \int_{t_i}^{t_f} dt\, L(q,\dot{q},t) \tag{5}$$

mit der Lagrangefunktion des harmonischen Oszillators

$$L\left(q,\dot{q}\right) = \frac{m}{2}\left(\dot{q}^2 - \omega^2 q^2\right) \tag{6}$$

Der Weg $q(t)$ läßt sich zerlegen in den klassischen Weg $\bar{q}(t)$ und eine Abweichung $\eta(t)$:

$$q(t) = \bar{q}(t) + \eta(t) \tag{7}$$

Da alle denkbaren Wege im selben Punkt q_i beginnen und im selben Punkt q_f enden, gelten für die Abweichungen $\eta(t)$ die Randbedingungen

$$\eta(t_i) = 0 \quad , \quad \eta(t_f) = 0 \tag{8}$$

Wir entwickeln $L(q,\dot{q})$ um den klassischen Weg $(\bar{q},\dot{\bar{q}})$:

$$\begin{aligned} L(q,\dot{q}) \quad &= \quad L\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right) + \frac{\partial L}{\partial q}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right)\eta + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right)\dot{\eta} + \\ &\quad + \frac{1}{2}\underbrace{\frac{\partial^2 L}{\partial q^2}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right)}_{-m\omega^2}\eta^2 + \underbrace{\frac{\partial^2 L}{\partial q \partial \dot{q}}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right)}_{0}\eta\dot{\eta} + \frac{1}{2}\underbrace{\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^2}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right)}_{m}\dot{\eta}^2 \end{aligned} \tag{9}$$

L ist quadratisch in q und $\dot{q}$, deshalb treten keine höheren Ableitungen in der Entwicklung auf. Das Integral über die ersten Ableitungen verschwindet:

$$\begin{aligned} &\int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \frac{\partial L}{\partial q}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right)\eta + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right)\dot{\eta} \right\} \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \left[\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right)\right]\eta + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right)\dot{\eta} \right\} \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt\, \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right)\eta\right] \\ &= \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right)\eta\right]_{t=t_i}^{t=t_f} \\ &= 0 \end{aligned} \tag{10}$$

Im ersten Schritt haben wir die Euler-Lagrangesche Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial L}{\partial q}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right) = \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\left(\bar{q},\dot{\bar{q}}\right) \tag{11}$$

im zweiten die Produktregel und im letzten die Randbedingung (8) ausgenutzt. Wenn wir die Entwicklung (9) in die Definition (5) der Wirkung einsetzen, erhalten wir unter Berücksichtigung von (10)

$$S = \bar{S} + \int_{t_i}^{t_f} dt\, \frac{m}{2}\left(\dot{\eta}^2 - \omega^2\eta^2\right) \tag{12}$$

mit der Wirkung $\bar{S} = S\left[\bar{q}\right]$ entlang des klassischen Weges $\bar{q}(t)$:

$$\bar{S} = \int_{t_i}^{t_f} dt\, L(\bar{q},\dot{\bar{q}},t) \tag{13}$$

Setzt man nun (12) in die Ausgangsformel (2) ein, so erhält man unter Ausnutzung von $dq_n = d\eta_n$ als Zwischenergebnis für den Propagator des harmonischen Oszillators:

$$\begin{aligned} \langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle \;=\; & \lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\bar{S}}\int d\eta_1\cdots d\eta_{N-1}\times \\ & \times\exp\left\{\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\sum_{n=0}^{N-1}\left[\left(\eta_{n+1}-\eta_n\right)^2 - \varepsilon^2\omega^2\eta_n^2\right]\right\} \end{aligned} \tag{14}$$

Gegenüber (2) sind in (14) die Integrationsvariablen q_n durch η_n ersetzt, für die die Randbedingungen (8) gelten. Dies wird sich für die Berechnung des Integrals als nützlich erweisen. Außerdem ist ein Phasenfaktor $e^{\frac{i}{\hbar}\bar{S}}$ hinzugekommen.

2.2 Berechnung des Integrals

Zur Vereinfachung von (14) fassen wir η_1 bis η_{N-1} zu einem Vektor $\underline{\eta}$ zusammen:

$$\underline{\eta} \equiv \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_{N-1} \end{pmatrix} \tag{15}$$

Die Summe in (14) schreibt sich nun kürzer

$$\sum_{n=0}^{N-1}\left[\left(\eta_{n+1}-\eta_n\right)^2 - \varepsilon^2\omega^2\eta_n^2\right] = \underline{\eta}^T M \underline{\eta} \tag{16}$$

wobei $\underline{\eta}^T$ der transponierte Vektor zu $\underline{\eta}$ und M die folgende $(N-1)\times(N-1)$-Matrix ist:

$$
\begin{aligned}
M &:= \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & -1 & 2 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} - \varepsilon^2\omega^2 \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a & -1 & & \\ -1 & a & -1 & \\ & -1 & a & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{17}
$$

Im zweiten Schritt haben wir die Abkürzung

$$
a := 2 - \varepsilon^2\omega^2 \tag{18}
$$

eingeführt. In der Matrixschreibweise treten die Summanden mit η_0 und η_N in (16) nicht mehr auf. Dies ist kein Fehler, weil wegen der Randbedingung (8) $\eta_0 \equiv \eta(t_i) = 0$ und $\eta_N \equiv \eta(t_f) = 0$ sind. Das Integral in (14) ist zu einem hochdimensionalen Gauß-Integral geworden:

$$
\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \lim_{N\to\infty, \varepsilon\to 0} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\bar{S}} \int d\eta_1 \cdots d\eta_{N-1} \, \exp\left(\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \underline{\eta}^T M \underline{\eta} \right) \tag{19}
$$

Die Matrix M ist offensichtlich symmetrisch und reell, also hermitesch. Sie kann demnach mittels einer unitären Matrix (sogar Orthogonalmatrix) U diagonalisiert werden:

$$
M = U^T D U \tag{20}
$$

D ist eine Diagonalmatrix:

$$
D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_{N-1} \end{pmatrix} \tag{21}
$$

Über die Matrix U wird eine orthogonale Transformation des Vektors $\underline{\eta}$ vorgenommen:

$$
\underline{\zeta} \equiv \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \vdots \\ \zeta_{N-1} \end{pmatrix} := U\underline{\eta} \tag{22}
$$

Mit (20), (21) und (22) ergibt sich

$$
\underline{\eta}^T M \underline{\eta} = \underline{\eta}^T U^T D U \underline{\eta} = \underline{\zeta}^T D \underline{\zeta} = \sum_{n=1}^{N-1} \lambda_n \zeta_n^2 \tag{23}
$$

Das hochdimensionale Integral (19) faktorisiert in mehrere eindimensionale Gauß-Integrale, die einfach berechnet werden können.

$$\begin{aligned}
\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle &= \lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\bar{S}} \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta_n \, \exp\left(\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\lambda_n \zeta_n^2\right) \\
&= \lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\bar{S}} \prod_{n=1}^{N-1} \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{\lambda_n m}} \qquad (24)
\end{aligned}$$

Wegen der orthogonalen Transformation (22) ist die Funktionaldeterminante beim Koordinatenwechsel gleich eins. Zur Berechnung der Gauß-Integrale haben wir die bekannte Formel

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-zx^2} = \sqrt{\frac{\pi}{z}} \qquad (25)$$

benutzt, die auch bei imaginärem $z = \frac{\lambda_n m}{2i\hbar\varepsilon}$ verwendet werden kann. Mit der Determinante von M,

$$\det M = \det D = \prod_{n=1}^{N-1} \lambda_n \qquad (26)$$

gelangt man zu folgendem Ausdruck für den Propagator, falls $\det M \neq 0$:

$$\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon \det M}} \, e^{\frac{i}{\hbar}\bar{S}} \qquad (27)$$

2.3 Berechnung der Determinante

Zur weiteren Berechnung des Propagators wird die Determinante von M benötigt, genauer gesagt

$$\lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0} \varepsilon \det M$$

Wir definieren

I_n: Determinante der $n \times n$ - Untermatrix von M

Mit Hilfe des Laplaceschen Entwicklungssatzes sowie der Definitionen (17) von M und (18) von a verifiziert man leicht folgende Rekursionsformel für I_n:

$$I_{n+1} = aI_n - (-1)^2 I_{n-1} = aI_n - I_{n-1} = 2I_n - \varepsilon^2\omega^2 I_n - I_{n-1} \qquad (28)$$

Damit diese Formel auch für $n = 0$ und $n = 1$ Gültigkeit hat, wird definiert:

$$I_0 := 1 \quad , \quad I_{-1} := 0 \qquad (29)$$

Gleichung (28) stellen wir um:

$$\frac{(\varepsilon I_{n+1} - \varepsilon I_n) - (\varepsilon I_n - \varepsilon I_{n-1})}{\varepsilon^2} = -\varepsilon\omega^2 I_n \tag{30}$$

Die Stützstellen im Intervall $[t_i, t_f]$ liegen an den Stellen $t_i + n\varepsilon$; wir definieren eine Variable τ,

$$\tau := n\varepsilon \tag{31}$$

die im Grenzfall $\varepsilon \to 0$ zu einer quasikontinuierlichen Variablen im Intervall

$$0 \leq \tau \leq t_f - t_i =: T \tag{32}$$

wird. Desweiteren definieren wir eine Funktion $\varphi(\tau)$ gemäß

$$\varphi(\tau) = \lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0} \varphi(n\varepsilon) := \lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0} \varepsilon I_n \tag{33}$$

Auf der linken Seite von (30) ist ein zweifacher Differenzenquotient zu erkennen. Vollzieht man den Übergang $\varepsilon \to 0$, wird aus (30) die Differentialgleichung des harmonischen Oszillators:

$$\ddot{\varphi}(\tau) = -\omega^2 \varphi(\tau) \tag{34}$$

Bei der Lösung dieser Differentialgleichung sind folgende Anfangsbedingungen zu berücksichtigen:

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= \lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0} \varepsilon I_0 = 0 \\ \dot{\varphi}(0) &= \lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0} \frac{\varepsilon I_1 - \varepsilon I_0}{\varepsilon} = \lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0} 2 - \varepsilon^2\omega^2 - 1 = 1 \end{aligned} \tag{35}$$

Hier wurde $I_0 = 1$ aus (29) und $I_1 = 2 - \varepsilon^2\omega^2$ aus (17) bzw. (28) benutzt. Mit diesen Anfangsbedingungen ergibt sich die eindeutige Lösung von (34) zu

$$\varphi(\tau) = \frac{\sin(\omega\tau)}{\omega} \tag{36}$$

Einsetzen von (36) in (33) führt wegen $detM \equiv I_{N-1}$ zu

$$\lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0} \varepsilon \det M = \lim_{N\to\infty,\varepsilon\to 0} \varepsilon I_{N-1} = \varphi(T) = \frac{\sin(\omega T)}{\omega} \tag{37}$$

Damit lautet der Propagator (27):

$$\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} e^{\frac{i}{\hbar}\bar{S}} \tag{38}$$

2.4 Die klassische Wirkung

Die einzige verbleibende Unbekannte in (38) ist die klassische Wirkung $\bar{S}$, die in diesem Abschnitt bestimmt werden soll. Bekanntlich hat die klassische Lagrangesche Bewegungsgleichung des eindimensionalen harmonischen Oszillators die allgemeine Lösung

$$\bar{q}(t) = Ae^{i\omega t} + Be^{-i\omega t} \tag{39}$$

Zur Bestimmung der Konstanten A und B werden die Randbedingungen $\bar{q}(t_i) = q_i$ und $\bar{q}(t_f) = q_f$ ausgenutzt:

$$q_i = Ae^{i\omega t_i} + Be^{-i\omega t_i} \tag{40}$$

und

$$q_f = Ae^{i\omega t_f} + Be^{-i\omega t_f} \tag{41}$$

(40) wird mit $e^{-i\omega t_f}$ multipliziert und von der mit $e^{-i\omega t_i}$ multiplizierten Gleichung (41) subtrahiert:

$$\begin{aligned} & q_f e^{-i\omega t_i} - q_i e^{-i\omega t_f} = A\left(e^{i\omega T} - e^{-i\omega T}\right) \\ \Rightarrow \qquad & A = \frac{1}{2i\sin(\omega T)}\left(q_f e^{-i\omega t_i} - q_i e^{-i\omega t_f}\right) \end{aligned} \tag{42}$$

Ebenso multipliziert man (40) mit $e^{i\omega t_f}$ und subtrahiert die mit $e^{i\omega t_i}$ multiplizierte Gleichung (41):

$$\begin{aligned} & q_i e^{i\omega t_f} - q_f e^{i\omega t_i} = B\left(e^{i\omega T} - e^{-i\omega T}\right) \\ \Rightarrow \qquad & B = \frac{1}{2i\sin(\omega T)}\left(q_i e^{i\omega t_f} - q_f e^{i\omega t_i}\right) \end{aligned} \tag{43}$$

Die so gewonnenen Ausdrücke für A und B ergeben in (39) eingesetzt den klassischen Weg $\bar{q}(t)$:

$$\begin{aligned} \bar{q}(t) &= \frac{1}{2i\sin(\omega T)}\left[q_i\left(e^{i\omega(t_f-t)} - e^{-i\omega(t_f-t)}\right) + q_f\left(e^{i\omega(t-t_i)} - e^{-i\omega(t-t_i)}\right)\right] \\ &= \frac{1}{\sin(\omega T)}\left[q_i\sin(\omega(t_f-t)) + q_f\sin(\omega(t-t_i))\right] \end{aligned} \tag{44}$$

Durch Ableitung nach der Zeit t erhält man die klassische Geschwindigkeit $\dot{\bar{q}}(t)$:

$$\dot{\bar{q}}(t) = \frac{\omega}{\sin(\omega T)}\left[q_f\cos(\omega(t-t_i)) - q_i\cos(\omega(t_f-t))\right] \tag{45}$$

Mit (44) und (45) lautet die Lagrangefunktion (6) des harmonischen Oszillators:

$$\begin{aligned} L(\bar{q},\dot{\bar{q}}) &= \frac{m\omega^2}{2\sin^2(\omega T)}\{q_i^2\left[\cos^2(\omega(t_f-t))-\sin^2(\omega(t_f-t))\right]+ \\ &+q_f^2\left[\cos^2(\omega(t-t_i))-\sin^2(\omega(t-t_i))\right]-2q_iq_f\times \\ &\times\underbrace{[\cos(\omega(t-t_i))\cos(\omega(t_f-t))+\sin(\omega(t-t_i))\sin(\omega(t_f-t))]}_{\cos(\omega(t_f-2t+t_i))}\} \end{aligned} \tag{46}$$

Hier haben wir noch das Additionstheorem $\cos\alpha\cos\beta+\sin\alpha\sin\beta=\cos(\alpha-\beta)$ verwendet. Eingesetzt in (13) ergibt sich schließlich die klassische Wirkung $\bar{S}$:

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \frac{m\omega^2}{2\sin^2(\omega T)}[q_i^2\frac{1}{-\omega}\cos(\omega(t_f-t))\sin(\omega(t_f-t))+ \\ &+q_f^2\frac{1}{\omega}\cos(\omega(t-t_i))\sin(\omega(t-t_i))-2q_iq_f\frac{1}{-2\omega}\sin(\omega(t_f-2t+t_i))]_{t=t_i}^{t=t_f} \\ &= \frac{m\omega}{2\sin^2(\omega T)}\left[q_i^2\cos(\omega T)\sin(\omega T)+q_f^2\cos(\omega T)\sin(\omega T)-2q_iq_f\sin(\omega T)\right] \\ &= \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)}\left[\left(q_i^2+q_f^2\right)\cos(\omega T)-2q_iq_f\right] \end{aligned} \tag{47}$$

Mit (38) lautet das Endergebnis für den Propagator des eindimensionalen harmonischen Oszillators:

$$\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega T)}}\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin(\omega T)}\left[\left(q_i^2+q_f^2\right)\cos(\omega T)-2q_iq_f\right]\right\} \tag{48}$$

Im Grenzfall $\omega\to 0$ ergibt sich der Propagator des freien Teilchens:

$$\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}\exp\left[\frac{im}{2\hbar T}\left(q_f-q_i\right)^2\right] \tag{49}$$

Literatur

[1] Das, A., **Field Theory**, World Scientific, Singapur 1993

[2] Schulman, L., **Techniques and Applications of Path Integration**, John Wiley

[3] Shankar, R., **Principles of Quantum Mechanics**, Plenum Press, New York 1994