

Harmonischer Oszillator in der Pfadintegraldarstellung

David Lappe

Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie

26.11.2014

1 Einleitung

Der harmonische Oszillator ist eines der wenigen exakt lösbaren quantenmechanischen Systeme. Seine Beschreibung ist auch daher sehr wichtig, da er ein harmonisches Potential besitzt. Mit einem solchen Potential kann man jegliche Potentiale, die sich nahe einer stabilen Gleichgewichtslage befinden, näherungsweise beschreiben. Auch stellt er ein gutes Modell für die Beschreibung von schwingenden Systemen dar. So lassen sich beispielsweise die Photonen des EM-Feldes, Phononen in Festkörpern oder Molekülschwingungen gut mit seiner Hilfe beschreiben. Quantenmechanisch kann er gut mit der Operator Darstellung berechnet werden. Alternativ soll hier jedoch gezeigt werden, wie dies auch mithilfe von Pfadintegralen geschehen kann.

2 Harmonischer Oszillator in Pfadintegraldarstellung

Die Lagrange Funktion L des Harmonischen Oszillators lautet

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (1)$$

Hieraus kann die Wirkung dieses Systems bestimmt werden

$$S = \int L dt, \quad (2)$$

und über die Funktionaldifferenziation der Wirkung die Bewegungsgleichung. Sie ergibt sich zu:

$$-\frac{\delta S}{\delta x(t)} = m\ddot{x}(t) + m\omega^2 x(t) = 0. \quad (3)$$

Da wir das Problem quantenmechanisch betrachten und jeder Pfad beachtet werden muss, reicht es nicht sich nur den klassischen Pfad x_c anzuschauen. Einen beliebigen Pfad $x(t)$ erhalten wir durch eine Zerlegung in den klassischen Pfad und einen nicht weiter bekannten Pfad $y(t)$

$$x(t) = x_c(t) + y(t), \quad (4)$$

mit den Randbedingungen für den klassischen Pfad

$$x_c(t_a) = x_a, x_c(t_b) = x_b$$

und entsprechend für $y(t)$

$$y(t_a) = y(t_b) = 0. \quad (5)$$

Nun kann die Wirkung dieses Pfades um den klassischen Pfad bis zum quadratischen Term entwickelt werden:

$$S[x] = S[x_c] + \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{\delta S[x_c]}{\delta x(t)} y(t) + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^{t_b} dt dt' \frac{\delta^2 S[x_c]}{\delta x(t) \delta x(t')} y(t) y(t'). \quad (6)$$

Da es sich bei $S[x_c]$ um die Wirkung klassischen Pfad handelt, und diese stationär ist, fällt der mittlere Term sofort weg. Die Funktionaldifferenziation des dritten Terms führen wir aus zu

$$\frac{\delta^2 S[x_c]}{\delta x(t) \delta x(t')} = -m \frac{d^2}{dt^2} \delta(t - t') - m\omega^2 \delta(t - t') = -m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) \delta(t - t') \quad (7)$$

und lösen damit das erste der beiden Integrale. Letztendlich bekommen wir für die Gesamtwirkung des Systems den Ausdruck:

$$S[x] = S[x_c] + \frac{m}{2} \int_0^T dt y(t) \left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2 \right) y(t) = S[x_c] + S[y]. \quad (8)$$

Als Zwischenziel soll nun die Übergangsamplitude

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int \mathcal{D}x e^{iS[x]} = e^{iS[x_c]} \int_{y(t_a)=y(t_b)=0} \mathcal{D}y e^{iS[y]} \quad (9)$$

bestimmt werden, um daraus die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators zu errechnen.

Wir müssen zur exakten Bestimmung der Übergangsamplitude also die Wirkungen $S[x_c]$ und $S[y]$ explizit ausrechnen.

Für den klassischen Pfad lösen wir die Bewegungsgleichung (3) mithilfe der Randbedingungen (2) mit dem Ansatz:

$$x_c(t) = A \sin \omega T + B \cos \omega T. \quad (10)$$

Die Lösung lautet

$$x_c(t) = \frac{1}{\sin \omega T} [(x_b \cos \omega t_a - x_a \cos \omega t_b) \sin \omega t + (x_a \sin \omega t_b - x_b \sin \omega t_a) \cos \omega t], \quad (11)$$

mit $T = t_b - t_a$.

Setzt man dies nun in die Lagrangefunktion ein und integriert, erhält man die Wirkung für den Pfad x_c :

$$S[x_c] = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2x_a x_b]. \quad (12)$$

Um nun die Wirkung für den Pfad $y(t)$ zu bestimmen, müssen wir nach (8) das Integral

$$S[y] = \frac{m}{2} \int_0^T dt y(t) \left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2 \right) y(t) \quad (13)$$

lösen. Hierfür bestimmen wir für den Operator $\left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2 \right)$ Eigenfunktionen und Eigenwerte. Mit den Randbedingungen (5) und einer Sinus-Fouriertransformation schreiben wir die Eigenfunktionen als:

$$y_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \frac{n\pi t}{T}. \quad (14)$$

Sie bilden ein vollständiges Orthonormalsystem $\int_0^T dt y_n(t) y_m(t) = \delta_{n,m}$.

Die Eigenwerte λ_n können jetzt leicht über die Eigenwertgleichung bestimmt werden:

$$\left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2 \right) y_n(t) = \left(\frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right) y_n(t) \equiv \lambda_n y_n(t). \quad (15)$$

Zerlegen wir nun den Pfad $y(t)$ nach den $y_n(t)$: $y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n y_n(t)$, erhalten wir für die Wirkung den folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned}
S[y] &= \frac{m}{2} \int_0^T dt y(t) \left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2 \right) y(t) \\
&= \frac{m}{2} \int_0^T dt \left(\sum_{m=1}^{\infty} a_m y_m \right) \left(\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n y_n \right) \\
&= \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n^2.
\end{aligned} \tag{16}$$

Schauen wir uns jetzt wieder die Übergangsamplitude

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = e^{iS[x_c]} \int_{y(t_a)=y(t_b)=0} \mathcal{D}y e^{iS[y]} \tag{17}$$

an, so muss noch das Integral gelöst werden. Hierbei ist $\mathcal{D}y$ das Integrationsmaß in den Variablen a_n . Die Konstante J ist die Jacobi-Determinante, welche durch die Variablentransformation zu den a_n ins Spiel kommt. Es gilt:

$$\mathcal{D}y = J \prod_{n=1}^{\infty} da_n. \tag{18}$$

Das Integral lässt sich nun mit der eben bestimmten Wirkung $S[y]$ lösen

$$\begin{aligned}
\int \mathcal{D}y e^{iS[y]} &= J \int \prod_{n=1}^{\infty} da_n e^{i \frac{m}{2} \sum_n \lambda_n a_n^2} \\
&= J \prod_{n=1}^{\infty} \int da_n e^{i \frac{m}{2} \lambda_n a_n^2} \\
&= J \prod_{n=1}^{\infty} \left[\frac{m}{2\pi i} \lambda_n \right]^{-\frac{1}{2}},
\end{aligned} \tag{19}$$

wobei im letzten Schritt das bekannte Gaußsche Integral gelöst wird. Mit einem kleinen Trick wird außerdem die Konstante J eliminiert. Hierfür macht man sich die Eigenschaft zunutze, dass der harmonische Oszillator für $\omega = 0$ in das freie Teilchen übergeht. Von diesem kennen wir die Amplitude

$$F_0(T) = \left(\frac{m}{2\pi i T} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{20}$$

sowie die zugehörigen Eigenwerte

$$\lambda_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2}{T^2}. \quad (21)$$

Bestimmt man jetzt das Verhältnis $\frac{F(T)}{F_0(T)}$ und multipliziert diesen Ausdruck mit $F_0(T)$, so bekommt man den gesuchten Ausdruck für $F(T)$:

$$\frac{F(T)}{F_0(T)} = \prod_{n=1}^{\infty} \left[\frac{\lambda_n}{\lambda_n^{(0)}} \right]^{-\frac{1}{2}} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}} = \left(\frac{\sin \omega T}{\omega T} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (22)$$

$$\Rightarrow F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (23)$$

Im letzten Schritt wird die Produktentwicklung des Sinus ausgenutzt. Damit ist jetzt die Übergangsamplitude explizit bestimmt und beträgt

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2x_a x_b] \right\}. \quad (24)$$

Dieser Ausdruck wird auch als Mehlerformel bezeichnet, und aus dieser können die Energieeigenwerte, aber auch Wellenfunktionen, des harmonischen Oszillators berechnet werden. Dies soll für die Energieeigenwerte hier geschehen. Dafür schaut man sich das Spektrum des Hamiltonoperators und bildet die Spur des Zeitentwicklungsoperators. Bekanntermaßen kann dies auf folgende Weise getan werden

$$Sp(e^{-iHT}) = \int dx \langle x | e^{-iHT} | x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx K(x, t_b; x, t_a) \quad (25)$$

$$= \frac{1}{2i \sin \frac{\omega}{2} T} = \frac{e^{-i\frac{\omega}{2} T}}{1 - e^{-i\omega T}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})T}, \quad (26)$$

unter Verwendung der geometrischen Reihe. Zu dem wissen wir, dass gilt:

$$Sp(e^{-iHT}) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_n T}. \quad (27)$$

Durch Vergleich folgt also letztendlich $E_n = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$.

Zur Vereinfachung der Herleitung wurde zu Beginn $\hbar = 1$ gesetzt. Es zeigt sich also, dass die Energieeigenwerte auch über den Pfadintegralformalismus bestimmt werden können.

3 Der klassische Grenzfall

Klassisch gesehen vergleicht die Natur alle möglichen Pfade die ein System nehmen könnte, und wählt denjenigen mit extremaler Wirkung. Bei Pfadintegralen tragen jedoch alle Pfade zum Ergebnis bei. Schaut man sich in der Quantenmechanik die Bewegung eines Teilchen von einem Punkt a zu einem Punkt b, integriert man mit einem Pfadintegral über jeden möglichen Weg den dieses Teilchen beschreiben kann.

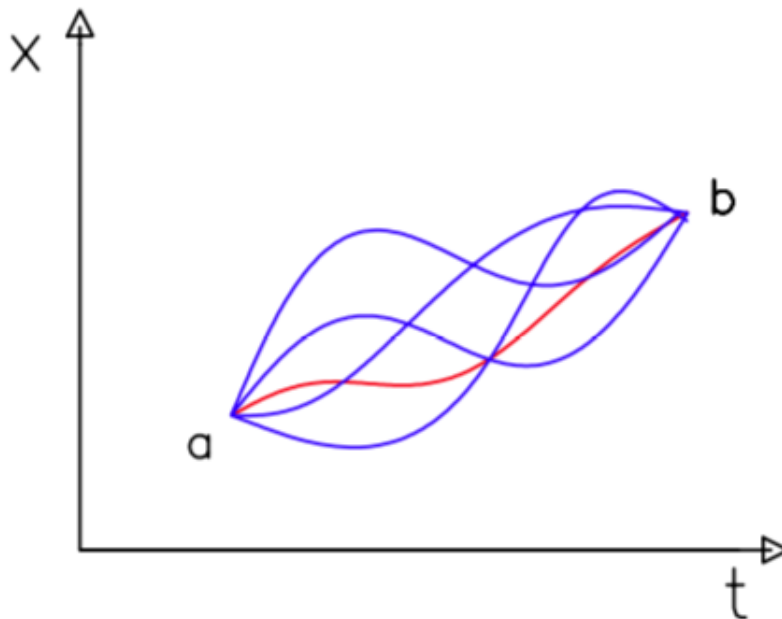


Abbildung 1: Quantenmechanische Propagation eines Teilchens von a nach b. Der klassische Pfad ist durch eine rote Linie gekennzeichnet (aus: 3., S.10)

Für die Amplitude bildet man letztendlich die sogenannte 'Summe über alle Pfade':

$$\Phi(a, b) = \sum_{\text{alle Pfade von a nach b}} \Phi_i. \quad (28)$$

Zusätzlich muss klar sein, dass das Plancksche Wirkungsquantum \hbar die Dimension einer Wirkung besitzt. Will man sich jetzt die Gewichtung der einzelnen Pfade anschauen, muss folgende Regel gelten:

Alle Pfade tragen betragsmäßig gleich bei, aber mit verschiedener Phase: die Phase jeden Pfades $x(t)$ ist seine klassische Wirkung $S[x(t)]$ geteilt durch \hbar :

$$\Phi(a, b) = \sum_{\text{alle Pfade von a nach b}} C \cdot e^{iS[x(t)]/\hbar}. \quad (29)$$

Im klassischen Grenzfall sind die betrachteten Größen so groß, dass $\hbar \rightarrow 0$ und damit $S \gg \hbar$ gilt. Das wiederum bedeutet, dass die Exponentialfunktion aus (29) bei kleinsten Änderungen der Wirkung $S[x(t)]$ sehr stark oszilliert. Wählt man dann einen beliebigen Pfad mit positivem Beitrag, findet sich immer ein benachbarter Pfad mit demselben negativen Beitrag und löscht diesen aus. Es kommt zu destruktiver Interferenz für alle Pfade, bis auf denjenigen Pfad, für den gilt: $\delta S = 0$: der klassische Pfad. In dessen unmittelbarer Umgebung kann es aufgrund der stationären Wirkung nur zu konstruktiver Interferenz kommen.

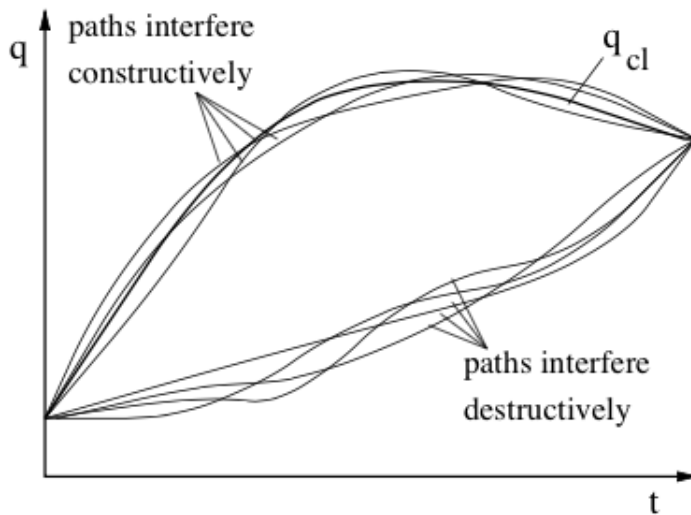


Abbildung 2: Konstruktive Pfadinterferenzen in der Nähe des klassischen Pfads, $q \hat{=} x$ (aus: 4., S.13)

Es bleibt also, wie erwartet, nur der klassische Pfad übrig.

4 Ausblick

Pfadintegrale finden natürlich in vielen weiteren Bereichen der Physik ihre Anwendung, hier seien nur einige wenige Beispiele genannt, um einen kleinen Ausblick zu geben.

- Teilchenbewegungen nahe eines äußeren Magnetfeldes (vgl. Aharonov-Bohm-Effekt)

- Beschreibung von Tunnelphänomenen
- Berechnung thermodynamischer Zustandssummen
- Chemie: Pfadintegrale beschreiben lange Polymerketten
- spielen eine sehr wichtige Rolle in der Quantenfeldtheorie

5 Literaturverzeichnis

1. Feynman R., Hibbs A.: Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill 1965
2. Münster G.: Quantentheorie 2. Auflage, Quantentheorie, de Gruyter, 2010
3. Rosenfelder R.: Pfadintegrale in der Quantenmechanik, <http://arxiv.org/pdf/1209.1315v2.pdf>
4. MacKenzie R.: Path Integral Methods and Applications, <http://arxiv.org/pdf/quant-ph/0004090v1.pdf>