Harmonischer Oszillator in Pfadintegraldarstellung

Sebastian Lüker

28. April 2010

Inhaltsverzeichnis

1 Der Harmonische Oszillator

Der harmonische Oszillator ist eines der wichtigsten physikalischen Modellsysteme. Dies hat mehrere Gründe. Zum einen ist der harmonische Oszillator eines der wenigen quantenmechanischen Systeme, das exakt lösbar ist. Zum anderen lassen sich viele wichtige physikalische Systeme durch harmonische Oszillatoren annähern. Hierzu zählen zum Beispiel Phononen, die Schwingungsspektren von Molekülen oder auch Photonen.

In der Wellenmechanik ist der Hamiltonoperator durch

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \tag{1}$$

gegeben. Zur Lösung ist es zweckmäßig Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren einzuführen durch

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\sqrt{m\omega} q + i \frac{p}{\sqrt{m\omega}}), \tag{2}$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\sqrt{m\omega} q - i \frac{p}{\sqrt{m\omega}}). \tag{3}$$

Diese Operatoren erfüllen die Kommutatorrelation

$$[a, a^+] = 1. \tag{4}$$

Der Hamiltonoperator ergibt sich mit den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zu

$$H = \hbar\omega(a^+ a + \frac{1}{2}). \tag{5}$$

Im Hamiltonoperator taucht der Besetzungszahloperator

$$\hat{n} = a^+ a \tag{6}$$

auf. Damit ergibt sich das Spektrum des harmonischen Oszillators zu

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \qquad \text{mit} \quad n = 0, 1, 2, ... \tag{7}$$

2 Harmonischer Oszillator im Pfadintegralformalismus

Nun soll der harmonische Oszillator im Pfadintegralformalismus berechnet werden. Im folgenden werden natürliche Einheiten benutzt, es gilt somit

$$\hbar = 1. \tag{8}$$

Die Übergangsamplitude ist gegeben durch

$$\left\langle x \left| e^{-iHt} \right| y \right\rangle = \int Dx e^{iS[x]} \tag{9}$$

mit

$$Dx = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} dx(t_1) \cdots dx(t_{N-1}) \tag{10}$$

Damit berechnet sich zum Beispiel die Übergangsamplitude eines freien Teilchen zu

$$\left\langle x \left| e^{-iHt} \right| y \right\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi it}} e^{i\frac{m}{2t}(x-y)^2}. \tag{11}$$

Die Lagrangefunktion des harmonischen Oszillators ist aus der klassischen Mechanik bekannt, sie ist gegeben durch die Differenz von kinetischer und potentieller Energie. Es gilt somit

$$L = T - V = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{12}$$

Daraus lässt sich die Wirkung

$$S = \int L(x, \dot{x}, t) dt \tag{13}$$

berechnen. Die Wirkung $S[x]$ ist ein Funktional von der Funktion $x(t)$. Analog zum totalen Differential

$$df = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i \tag{14}$$

lässt sich die Funktionalableitung definieren durch

$$\delta F[x] = \int ds \frac{\delta F}{\delta x(s)} \delta x(s). \tag{15}$$

Das hamiltonsche Prinzip besagt, dass die Wirkung für die klassische Bahnkurve extremal wird, es gilt also

$$\delta S[x] = 0. \tag{16}$$

Durch Anwendung des hamiltonschen Prinzips ergibt sich die Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0. \tag{17}$$

Aus der Euler-Lagrtange-Gleichung ergibt sich die klassische Bewegungsgleichung. Für den harmonischen Oszillator ergibt sich die Bewegungsgleichung mit (11) zu

$$m\ddot{x}(t) + m\omega^2 x(t) = 0. \tag{18}$$

Im folgenden bezeichnen wir die Lösung dieser Bewegungsgleichung mit $x_c(t)$. Sie entspricht der klassischen Bahnkurve mit den Randbedingungen $x_c(t_a) = x_a$ und $x_c(t_b) = x_b$. Eine beliebige Kurve $x(t)$ lässt sich zerlegen in die klassische Bahnkurve und einen Anteil $y(t)$, der die Abweichung von der klassischen Bahnkurve darstellt. Es gilt somit

$$x(t) = x_c(t) + y(t). \tag{19}$$

Die Randbedingungen für die Abweichung $y(t)$ sind offensichtlich $y(t_a) = y(t_b) = 0$, die Abweichung ist somit unabhängig von den Anfangs- und Endpunkten x_a und x_b.

Die Wirkung eines beliebigen Pfades lässt sich um den klassischen Pfad entwickeln, es gilt damit

$$S[x] = S[x_c + y] = S[x_c] + \int_{t_a}^{t_b} dt \underbrace{\frac{\delta S[x_c]}{\delta x(t)}}_{=0} y(t) + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^{t_b} dt dt' \frac{\delta^2 S[x_c]}{\delta x(t) \delta x(t')} y(t) y(t'). \quad (20)$$

Da die Wirkung quadratisch in der Ortskoordinate ist, bricht diese Entwicklung nach drei Termen ab. Der zweite Term verschwindet auf Grund des hamiltonschen Prinzips. Um den dritten Term zu berechnen, betrachten wir zuerst als Nebenrechnung die Funktionalableitung des Funktionals

$$F[x(t)] = x(t) = \int dt' \delta(t - t') x(t'). \quad (21)$$

Die Funktionalableitung ergibt sich durch Betrachtung von

$$\delta F[x(t)] = \delta x(t) = \int dt' \delta(t - t') \delta x(t') \stackrel{!}{=} \int dt' \frac{\delta F}{\delta x(t')} \delta x(t') \quad (22)$$

zu

$$\frac{\delta F}{\delta x(t')} = \delta(t - t'). \quad (23)$$

Um den dritten Summanden in der Entwicklung (19) zu berechnen, betrachten wir

$$\frac{\delta^2 S}{\delta x(t) \delta x(t')} = \frac{\delta}{\delta x(t')} (-m \ddot{x}(t) - m \omega^2 x(t))$$

$$= -m \frac{d^2}{dt^2} \delta(t - t') - m \omega^2 \delta(t - t') = -m (\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2) \delta(t - t'). \quad (24)$$

Im ersten Schritt wurde benutzt, dass die Funktionalbleitung der Wirkung auf die Bewegungsgleichung führt.
Durch einsetzen von (24) in (20) ergibt sich die Wirkung zu

$$S[x] = S[x_c] + \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt (\dot{y}^2(t) - \omega^2 y^2(t))$$

$$= S[x_c] + \frac{m}{2} \underbrace{[y(t) \frac{dy}{dt}]_{t_a}^{t_b}}_{=0} - \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} y(t) \frac{d^2}{dt^2} y(t)$$

$$= S[x_c] + \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt y(t) (-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2) y(t) = S[x_c] + S[y]. \quad (25)$$

Von der ersten zur zweiten Zeile wurde eine partielle Integration durchgeführt, damit die Übergangsamplitude später leichter zu berechnen ist.
Die Übergangsamplitude berechnet sich damit zu

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int D x e^{iS[x]} = e^{iS[x_c]} \int D y e^{iS[y]}. \quad (26)$$

Man erkennt, dass die Start- und Endpunkte x_a und x_b nur in die erste Exponentialfunktion einfließen, das Integral hängt nur noch von der Zeitdifferenz $T = t_b - t_a$ ab.

Zuerst berechnen wir nun die Wirkung $S[x_c]$ für den klassischen Pfad, die im Exponenten der ersten Exponentialfunktion steht. Die allgemeine Lösung der Bewegungsgleichung (18) ist

$$x_c(t) = A\sin(\omega t) + b\cos(\omega t). \tag{27}$$

Die Koeffizienten A und B ergeben sich durch die Randbedingungen $x_c(t_a) = x_a$ und $x_c(t_b) = x_b$ in einer einfachen aber länglichen Rechnung. Durch einsetzen der Koeffizienten wird (27) zu

$$x_c(t) = \frac{1}{\sin(\omega T)}\left[x_b \sin(\omega(t - t_a)) + x_a \sin(\omega(t - t_b))\right], \tag{28}$$

wobei $T = t_b - t_a$ die Zeitdifferenz bezeichnet. Wenn wir (28) nun in die Lagrangefunktion einsetzen und diese integrieren erhalten wir für die Wirkung des klassischen Pfades

$$S[x_c] = \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)}\left[(x_a^2 + x_b^2)\cos(\omega T) - 2x_a x_b\right] \tag{29}$$

Im folgenden berechnen wir das Funktionalintegral

$$F(T) = \int Dy e^{iS[y]} = K(0, t; 0, 0) \tag{30}$$

mit

$$S[y] = \frac{m}{2}\int_0^T dt y(t)\left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2\right)y(t). \tag{31}$$

Es ist zweckmäßig, zuerst die Eigenfunktionen und Eigenwerte des Operators $(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2)$ zu berechnen. Offensichtlich sind die Eigenfunktionen durch

$$y_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}}\sin(\frac{n\pi t}{T}) \qquad \text{mit} \quad n = 1, 2, ... \tag{32}$$

gegeben, wobei die Randbedingungen $y(t_a) = y(t_b) = 0$ bereits berücksichtigt wurden. Die Eigenfunktionen bilden ein vollständiges Orthonormalsystem,

$$\int_0^T dt y_n(t) y_m(t) = \delta_{mn}, \tag{33}$$

die Eigenwerte sind

$$(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2)y_n(t) = (\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2)y_n(t) \equiv \lambda_n y_n(t). \tag{34}$$

Jeder Pfad y(t) lässt sich nach den Eigenfunktionen entwickeln, es gilt somit

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n y_n(t). \tag{35}$$

Wenn wir diese Entwicklung in (31) einsetzen, ergibt sich

$$S[y] = \frac{m}{2}\int_0^T dt y(t)(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2)y(t) = \frac{m}{2}\sum_{m,n}\int_0^T dt a_n a_m y_m(t)\lambda_n y_n(t) = \frac{m}{2}\sum_n a_n^2 \lambda_n, \tag{36}$$

wobei im letzten Schritt die Orthonormalität benutzt wurde. Durch die Variablentransformation zu den a_n ändert sich das Integrationsmaß zu

$$Dy = J\prod_{n=1}^{\infty} da_n, \tag{37}$$

wobei J für die Jacobi-Determinante steht. J bleibt hier als eine Konstante stehen, die explizite Berechnung wird später durch Vergleich mit der Übergangsamplitude umgangen und ist somit nicht nötig.

Damit ergibt sich das Funktionalintegral zu

$$F(T) = \int Dy e^{iS[y]} = J \int \prod_{n=1}^{\infty} da_n e^{i\frac{m}{2}\sum_n \lambda_n a_n^2} \tag{38}$$

$$= J \prod_{n=1}^{\infty} \int da_n e^{i\frac{m}{2}\lambda_n a_n^2} = J \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi i}{m\lambda_n}}. \tag{39}$$

Im Funktionalintegral steht noch die Jacobi-Determinante J. Um diese zu eliminieren betrachten wir den Granzfall $\omega \to 0$. In diesem Fall wird die Lagrangefunktion zu

$$L = \frac{p^2}{2m}, \tag{40}$$

der Lagrangefunktion eines freien Teilchens. Die Übergangsamplitude eines freien Teilchens ist bekannt, es gilt

$$F_0(T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i T}}, \tag{41}$$

die Eigenwerte sind im Fall des freien Teilchens

$$\lambda_n^{(0)} = \frac{n^2\pi^2}{T^2}. \tag{42}$$

Zur Elimination von J betrachten wir nun

$$\frac{F(T)}{F_0(T)} = \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{\lambda_n^{(0)}}{\lambda_n}} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2\pi^2}\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{\omega T}{\sin(\omega T)}}. \tag{43}$$

Im letzten Schritt wurde die Produktentwicklung des Sinus,

$$\sin(x) = x \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{k^2\pi^2}\right), \tag{44}$$

benutzt. Das Funktionialintegral berechnet sich damit zu

$$F(T) = \frac{F(T)}{F_0(T)} F_0(T) = \sqrt{\frac{\omega T}{\sin(\omega T)}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i T}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \sin(\omega T)}}. \tag{45}$$

Wenn wir (45) und (29) in (26) einsetzen, folgt für die Übergangsamplitude des harmonischen Oszillators

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \sin(\omega T)}} \cdot \exp\{i \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)} [(x_a^2 + x_b^2)\cos(\omega T) - 2x_a x_b]\}. \tag{46}$$

Formel (46) wird auch als Mehlerformel bezeichnet.

Um das Ergebnis im Pfadintegralformalismus mit dem Ergebnis der Wellenmechanik zu vergleichen berechnen wir das Spektrum des harmonischen Oszillators. Dazu betrachten wir

$$Sp(e^{-iHt}) = \int dx \left\langle x \left| e^{iHt} \right| x \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx K(x, T; x, 0)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \sin(\omega T)}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{i \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)}(2x^2 \cos(\omega T) - 2x^2)\} = \frac{1}{2i\sin(\frac{\omega}{2}T)}$$

$$= \frac{1}{e^{i\frac{\omega}{2}T} - e^{i\frac{\omega}{2}T}} = e^{-i\frac{\omega}{2}T} \frac{1}{1 - e^{-i\omega T}} = e^{-i\frac{\omega}{2}T} \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-i\omega T})^n = \sum_n e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})T}, \tag{47}$$

wobei im vorletzten Schritt die geometrische Reihe eingesetzt wurde. Das Spektrum des harmonischen Oszillators ergibt sich durch Vergleich von (47) mit

$$Sp(e^{-iHT}) = \sum_n e^{-iE_nT} \tag{48}$$

zu dem aus der Wellenmechanik bekannten Ergebnis

$$E_n = \omega(n + \frac{1}{2}). \tag{49}$$

Hier ist zu beachten, dass wir in natürlichen Einheiten ($\hbar = 1$) gerechnet haben. Das im Pfadintegralformalismus berechnete Spektrum des harmonischen Oszillators stimmt also mit dem Spektum aus der Wellenmechanik überein. Das ist natürlich nicht überraschend, da beide Formalismen äquivalent sind.