Der harmonische Oszillator in Pfadintegraldarstellung

Marcel Asbach
308746
m_asba01@uni-muenster.de

27.08.2014

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Der harmonische Oszillator wird in der klassischen Physik und in der Quantenmechanik häufig als einführendes Beispiel verwendet. Daher soll auch hier die Benutzung von Pfadintegralen mit Hilfe des harmonischen Oszillators verdeutlicht werden. Dies bedeutet, dass die Übergangsamplitude des harmonischen Oszillators $\left\langle x|e^{-iHt}|y\right\rangle$ mit Hilfe von Pfadintegralen bestimmt wird.
Dazu wird zunächst die Wirkung des klassischen Pfades und im Anschluss daran die Wirkung eines beliebigen Pfades bestimmt. Dies ist notwendig, da bei einer quantenmechanischen Betrachtung alle Pfade zur Übergangsamplitude beitragen.
Zuletzt kann dann die Übergangsamplitude berechnet werden. Diese wird dann noch genutzt, um die Eigenwerte des harmonischen Oszillators zu bestimmen.

2 Vorbereitungen

Bevor mit den eigentlichen Berechnungen begonnen werden kann, seien einige Punkte erwähnt, die für die folgenden Berechnungen wichtig sind, aber hier nicht explizit hergeleitet werden.
Es wurde $\hbar = 1$ gesetzt und es gilt

$$\left\langle x|e^{-iHt}|y\right\rangle = \int e^{iS[x]}\mathcal{D}x \tag{1}$$

mit

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

für die Übergangsamplitude in Pfadintegraldarstellung.
Die Wirkung S ist als das Zeitintegral über die Lagrangefunktion $S = \int L\,dt$ definiert.
Analog zum endlichdimensionalen Differenzial

$$df = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i}dx_i \tag{3}$$

wird die Funktionalbleitung $\frac{\delta F}{\delta x(s)}$ eines Funktionals $F[x]$, welches von Funktionen $x(s)$ abhängt, über die Beziehung

$$\delta F[x] = \int \frac{\delta F}{\delta x(s)}\delta x(s)\,ds \tag{4}$$

definiert. Aus dieser Definition ergibt sich insbesondere die Folgerung

$$F[x]=x(t)\quad\Longrightarrow\quad\frac{\delta F}{\delta x(s)}=\delta(s-t)\quad. \tag{5}$$

Weiterhin ist die Übergangsamplitude des freien Teilchens

$$\left\langle x|e^{-iH_0t}|y\right\rangle=\sqrt{\frac{m}{2\pi it}}e^{i\frac{m}{2t}(x-y)^2} \tag{6}$$

bereits bekannt, welche mit Hilfe der Gleichung

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{a}{2}x^2+bx}dx=\sqrt{\frac{2\pi}{a}}e^{\frac{b^2}{2a}} \tag{7}$$

berechnet wurde.

3 Der harmonische Oszillator

Da die Vorbereitungen abgeschlossen sind, wird nun der harmonische Oszillator betrachtet. Um seine Übergangsamplitude mit Hilfe von Pfadintegralen darzustellen, ist es nach Gleichung (1) nötig, die Wirkung zu berechnen. Die Lagrangefunktion des harmonischen Oszillators L mit

$$L=\frac{m}{2}\dot{x}^2-\frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{8}$$

ist bereits bekannt. Klassisch betrachtet, ist die Wirkung nach dem Hamilton-Prinzip extremal und es gilt daher $\delta S[x]=0$.
Betrachtet man eine Variation des Pfades $x(s)\longrightarrow x(s)+\delta x(s)$ mit $\delta x(0)=\delta x(t)=0$, so folgt für die Variation der Wirkung:

$$\begin{aligned}\delta S[x] &= \int_0^t\left(\frac{\partial L}{\partial x}\delta x+\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\delta\dot{x}\right)ds && (9)\\ &= \int_0^t\frac{\partial L}{\partial x}\delta x\,ds+\left[\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\delta x\right]_0^t-\int_0^t\left(\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right)\delta x\,ds && (10)\end{aligned}$$

Dabei wurde partiell integriert. Durch Ausnutzen der Randbedingungen der Variation erhält man:

$$\delta S[x]=\int_0^t\left(\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right)\delta x ds\quad. \tag{11}$$

Damit das Hamilton-Prinzip in jedem Fall erfüllt ist, muss also

$$\frac{\delta S}{\delta x(s)} = 0 = \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \tag{12}$$

gelten.

Bis hierhin wurde der harmonische Oszillator und damit der tatsächlich durchlaufene Pfad rein klassisch betrachtet. Bei einer quantenmechanischen Betrachtung trägt allerdings jeder Pfad zur Übergangsamplitude bei. Ein beliebiger Pfad lässt sich als Kombination aus dem klassischen Pfad x_c und einer Abweichung davon als

$$x(t) = x_c(t) + y(t) \tag{13}$$

mit den Randbedingungen

$$x_c(t_1) = x_1 \qquad , \qquad x_c(t_2) = x_2 \tag{14}$$

$$y(t_1) = y(t_2) = 0 \tag{15}$$

darstellen. Dies sei beispielhaft in Abbildung 1 dargestellt.

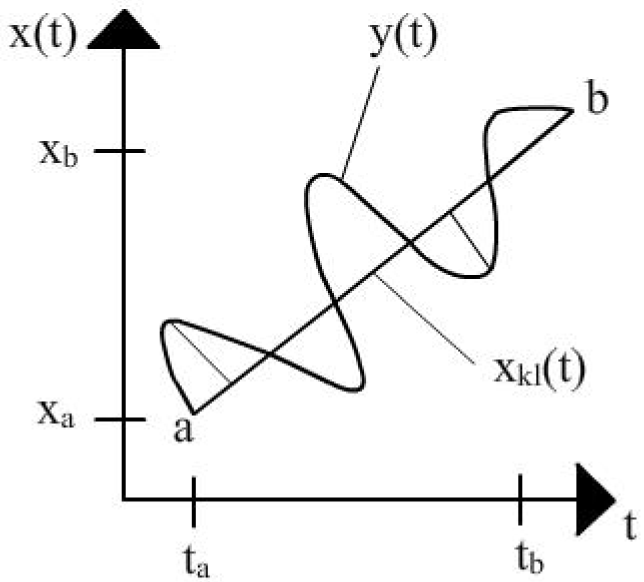

Abbildung 1: Der klassische Pfad und die Abweichung von diesem, entnommen aus [2].

Um die quantenmechanische Wirkung zu berechnen, wird diese um den klassischen Pfad

$x_c(t)$ bis zum quadratischen Term taylorentwickelt.

$$
\begin{aligned}
S[x] &= S[x_c] + \int_{t_1}^{t_2} \frac{\delta S[x_c]}{\delta x(t)} y(t) dt + \frac{1}{2} \int_{t_1'}^{t_2'} \int_{t_1}^{t_2} \frac{\delta^2 S[x_c]}{\delta x(t')\delta x(t)} y(t') y(t) dt' dt && (16) \\
&= S[x_c] + \frac{1}{2} \int_{t_1'}^{t_2'} \int_{t_1}^{t_2} \frac{\delta^2 S[x_c]}{\delta x(t')\delta x(t)} y(t') y(t) dt' dt && (17)
\end{aligned}
$$

Die Umformung gilt, da der klassische Pfad die Bewegungsgleichung löst und Gleichung (12) erfüllt. Um die beiden übrigen Integrale zu lösen, wird das Funktional

$$
\frac{\delta^2 S[x_c]}{\delta x(t')\delta x(t)} = \frac{\delta}{\delta x(t')} \left(-m\ddot{x}(t) - m\omega^2 x(t) \right) \tag{18}
$$

betrachtet. Mit Hilfe von Gleichung (5) lässt sich dies zu

$$
\begin{aligned}
\frac{\delta}{\delta x(t')} \left(-m\ddot{x}(t) - m\omega^2 x(t) \right) &= \frac{\delta}{\delta x(t')} \left(-m\frac{d^2}{dt^2} - m\omega^2 \right) x(t) && (19) \\
&= \left(-m\frac{d^2}{dt^2} - m\omega^2 \right) \frac{\delta}{\delta x(t')} x(t) && (20) \\
&= \left(-m\frac{d^2}{dt^2} - m\omega^2 \right) \delta(t-t') && (21)
\end{aligned}
$$

umformen. Dabei wurde die Eigenschaft der Funktionalableitung bei der letzten Umformung genutzt. Einsetzen liefert

$$
\begin{aligned}
& \tfrac{1}{2} \int_{t_1'}^{t_2'} \int_{t_1}^{t_2} \tfrac{\delta^2 S[x_c]}{\delta x(t')\delta x(t)} y(t') y(t) dt' dt && (22) \\
= \; & \tfrac{1}{2} \int_{t_1'}^{t_2'} \int_{t_1}^{t_2} \left(-m\tfrac{d^2}{dt^2} - m\omega^2 \right) \delta(t-t') y(t') y(t) dt' dt && (23) \\
= \; & \tfrac{1}{2} \int_{t_1'}^{t_2'} \int_{t_1}^{t_2} y(t') \left(-m\tfrac{d^2}{dt^2} - m\omega^2 \right) \delta(t-t') y(t) dt' dt && (24) \\
= \; & -\tfrac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} y(t) \left(\tfrac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) y(t) dt && (25) \\
= \; & -\tfrac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} y(t)\ddot{y}(t) dt - \tfrac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} \omega^2 y^2(t) dt && (26) \\
= \; & \tfrac{m}{2} \left[y(t)\dot{y}(t) \right]_{t_1}^{t_2} - \tfrac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} y(t)\ddot{y}(t) dt - \tfrac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} \omega^2 y^2(t) dt && (27) \\
= \; & \tfrac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} \dot{y}^2(t) dt - \tfrac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} \omega^2 y^2(t) dt && (28) \\
= \; & \int_{t_1}^{t_2} \left(\tfrac{m}{2} \dot{y}^2(t) - \tfrac{m\omega^2}{2} y^2(t) \right) dt && (29) \\
= \; & S[y] && (30)
\end{aligned}
$$

und damit lässt sich die Wirkung als

$$S[x] = S[x_c] + S[y] \tag{31}$$

ausdrücken. Dabei ergibt der erste Summand in Gleichung (27) aufgrund der Randbedingungen Null. Dieser Summand wurde nur hinzugefügt, um eine partielle Integration durchzuführen, die in der darauffolgenden Umformung angewendet wurde.

Die Wirkung eines beliebigen Pfades lässt sich also als Summe der Wirkung des klassischen Pfades und der Wirkung eines Pfades mit den in Gleichung (15) genannten Randbedingungen ausdrücken.
Bevor endgültig zum Pfadintegralformalismus übergegangen wird, soll explizit sowohl die Wirkung des klassischen Pfades als auch die Wirkung der Abweichung von diesem berechnet werden.

3.1 Der klassische Pfad

In diesem Unterabschnitt wird der klassische Pfad explizit berechnet.

Um die Konstanten aus der allgemeinen Lösung des klassischen harmonischen Oszillators

$$x_c(t) = A \sin \omega t + B \cos \omega t \tag{32}$$

zu bestimmen, werden die Randbedingungen aus Gleichung (14) genutzt. Als Lösung erhält man

$$x_c(t) = \frac{1}{\sin \omega T} \left[(x_2 \cos \omega t_1 - x_1 \cos \omega t_2) \sin \omega t + (x_1 \sin \omega t_2 - x_2 \sin \omega t_1) \cos \omega t \right] \tag{33}$$

mit $T = t_2 - t_1$. Durch Einsetzen in und Integration über die Lagrangefunktion ergibt sich

$$S[x_c] = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} \left[\left(x_1^2 + x_2^2 \right) \cos \omega T - 2x_1 x_2 \right] \tag{34}$$

als die Wirkung des klassischen Pfades. Es bleibt die Wirkung der Abweichung vom klassischen Pfad zu berechnen.

3.2 Die Abweichung vom klassischen Pfad

Um die Wirkung der Abweichung vom klassischen Pfad zu berechnen, wird durch die Gleichungen (25) und (15) dazu motiviert $y(t)$ zunächst als Summe von Eigenfunktionen

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n y_n(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \frac{n\pi t}{T} \tag{35}$$

mit den Eigenwerten

$$\lambda_n = \frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2 \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{36}$$

darzustellen, da der Operator aus Gleichung (25) bereits vom unendlich hohen Potentialtopf bekannt ist. Dessen Eigenfunktionen können benutzt werden, da auch die Randbedingungen aus Gleichung (15) übereinstimmen. Zur Vereinfachung der Rechnung wird eine Zeittransformation durchgeführt. Diese hat keine sonstigen Auswirkungen auf die Überlegungen.
Wie im vorherigen Abschnitt erläutert, wird jetzt $y(t)$ in die Gleichung zur Berechnung der Wirkung eingesetzt und man erhält

$$S[y] = \frac{m}{2} \int_0^T \left(\sum_{m=1}^{\infty} a_m y_m(t) \right) \left(\sum_{n=1}^{\infty} a_n y_n(t) \right) dt \quad . \tag{37}$$

Da es sich bei den Eigenfunktionen um ein vollständiges Orthonormalsystem handelt, gilt

$$\int_0^T y_n(t) y_m(t) dt = \delta_{n,m} \tag{38}$$

und unter Ausnutzung dieser Eigenschaft ergibt sich

$$S[y] = \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 \lambda_n \quad . \tag{39}$$

Damit kann nun insgesamt die Wirkung eines beliebigen Pfades mit festem Anfangs- und Endpunkt berechnet werden. Dies wird im folgenden Abschnitt genutzt, um die Übergangsamplitude zu berechnen.

4 Der harmonische Oszillator in Pfadintegraldarstellung

In diesem Abschnitt werden die bisherigen Ergebnisse genutzt, um die Übergangsamplitude $\int e^{iS[x]} \mathcal{D}x$ für den harmonischen Oszillator zu berechnen. Dazu wird Gleichung (31) eingesetzt und man erhält

$$\int e^{iS[x]} \mathcal{D}x = e^{iS[x_c]} \int e^{iS[y]} \mathcal{D}y \tag{40}$$

mit

$$F(T) = \int e^{iS[y]} \mathcal{D}y \quad \text{und} \quad \mathcal{D}y = J \prod_{n=1}^{\infty} da_n \quad . \tag{41}$$

Die Konstante J ergibt sich dabei aus einer Transformation des Integrationsmaßes auf die Variablen a_n, von denen die Wirkung des klassischen Pfades unabhängig ist. Durch Einsetzen von Gleichung (39) erhält man

$$\begin{aligned}
\int e^{iS[y]}\mathcal{D}y &= \int e^{i\frac{m}{2}\sum_{n=1}^{\infty} a_n^2\lambda_n} J \prod_{n=1}^{\infty} da_n & (42)\\
&= J\int \left(\prod_{n=1}^{\infty} e^{i\frac{m}{2}a_n^2\lambda_n}\right)\prod_{n=1}^{\infty} da_n & (43)\\
&= J\prod_{n=1}^{\infty}\int e^{i\frac{m}{2}a_n^2\lambda_n} da_n \quad . & (44)
\end{aligned}$$

Nun wird $F(T,\omega=0)=F_0(T)$ gesetzt und mit Gleichung (7) wird

$$\frac{F(T)}{F_0(T)} = \prod_{n=1}^{\infty}\sqrt{\frac{\lambda_{n,\omega=0}}{\lambda_n}} \tag{45}$$

berechnet. Mit Hilfe der Produktentwicklung des Sinus

$$\sin\omega T = \omega T\prod_{n=1}^{\infty}\left(1-\frac{\omega^2T^2}{n^2\pi^2}\right) \tag{46}$$

ergibt sich dann

$$\frac{F(T)}{F_0(T)} = \left(\frac{\sin\omega T}{\omega T}\right)^{-1/2} \quad . \tag{47}$$

Der Fall $\omega = 0$ entspricht aber dem Fall eines freien Teilchens. Aus Vergleich mit Gleichung (6) wird aber klar, dass für ein freies Teilchen

$$F_0(T) = \left(\frac{m}{2\pi iT}\right)^{1/2} \tag{48}$$

gilt. Damit folgt

$$F(T) = \frac{F(T)}{F_0(T)}F_0(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\sin\omega T}\right)^{1/2} \quad . \tag{49}$$

Damit ergibt sich jetzt aus den Gleichungen (1), (31), (34), (39) und (49) letztendlich

$$\int e^{iS[x]}\mathcal{D}x = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\sin\omega T}\right)^{1/2} e^{i\frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left[\left(x_1^2+x_2^2\right)\cos\omega T-2x_1x_2\right]} \tag{50}$$

als die Übergangsamplitude des harmonischen Oszillators. Gleichung (50) nennt man die Mehlerformel.

Da die Übergangsamplitude des harmonischen Oszillators jetzt in Pfadintegraldarstellung vorliegt, soll diese Darstellung genutzt werden, um im folgenden Abschnitt die Eigenwerte des harmonischen Oszillators zu bestimmen.

4.1 Eigenwerte des harmonischen Oszillators

In diesem Abschnitt sollen nun die Eigenwerte des harmonischen Oszillators mit Hilfe von Pfadintegralen bestimmt werden.
Zur besseren Übersichtlichkeit sei hier die Schreibweise

$$\int e^{iS[x]}\mathcal{D}x = K(x_b, t_b; x_a, t_a) \tag{51}$$

benutzt. Das Spektrum des Hamiltonoperators lässt sich dann über die Spur

$$\mathrm{SP}(e^{-iHT}) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_b, t_b; x_a, t_a)dx = \frac{1}{2i\sin\frac{\omega}{2}T} \tag{52}$$

berechnen. Dies lässt sich zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{2i\sin\frac{\omega}{2}T} &= \frac{1}{2i}\frac{2i}{e^{i\frac{\omega}{2}T} - e^{-i\frac{\omega}{2}T}} && (53)\\ &= \frac{1}{e^{i\frac{\omega}{2}T} - e^{-i\frac{\omega}{2}T}}\frac{e^{-i\frac{\omega}{2}T}}{e^{-i\frac{\omega}{2}T}} = \frac{e^{-i\frac{\omega}{2}T}}{1 - e^{-i\omega T}} && (54)\\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)T} && (55) \end{aligned}$$

umformen, wobei im letzten Schritt die Eigenschaft einer geometrischen Reihe ausgenutzt wurde. Da bekannt ist, dass

$$\mathrm{SP}\left(e^{-iHT}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_nT} \tag{56}$$

gilt, folgt aus dem Vergleich der Gleichungen (55) und (56)

$$E_n = \omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{57}$$

für die Eigenwerte des harmonischen Oszillators, wie sie bereits aus der klassischen Betrachtungsweise bekannt sind.

5 Zusammenfassung

An dieser Stelle sei noch einmal das Vorgehen zusammengefasst, um den harmonischen Oszillator mit Hilfe von Pfadintegralen darzustellen (Gleichung (1)).
Dazu wurde zunächst die Wirkung Pfades betrachtet mit dem Ergebnis, dass sich die Wirkung als Summe der Wirkung des klassischen Pfades und der Wirkung eines Pfades mit bestimmten Randbedingungen ergab (Gleichung (31)).
Die Berechnung des klassischen Pfades war bereits bekannt (Gleichung (34)) und die Abweichung von diesem konnte mit Hilfe von Eigenfunktionen des unendlich hohen Potentialtopfes bestimmt werden (Gleichung (39)).

Um die Berechnung des eigentlichen Pfadintegrals zu vereinfachen, wurde eine Koordinatentransformation durchgeführt, wodurch eine unbekannte Konstante in der Übergangsamplitude vorhanden war (Gleichung (44)).
Durch einen Vergleich mit dem freien Teilchen konnte diese Konstante jedoch aus der Gleichung herausgekürzt werden (Gleichung (49)).
Als Ergebnis ergab sich die Mehlerformel für die Übergangsamplitude (Gleichung (50)).
Abschließend konnten die bereits bekannten Eigenwerte des harmonischen Oszillators über den Pfadintegralformalismus ermittelt werden (Gleichung (57)).

Literatur

[1] Münster, G.: *Quantentheorie*. Bd. 2. Berlin New York : de Gruyter, (2010)

[2] Schierbaum, N.: *Harmonischer Oszillator in Pfadintegraldarstellung*, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Seminarvortrag, SS 2009

[3] Lüker, S.: *Harmonischer Oszillator in Pfadintegraldarstellung*, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Seminarvortrag, April 2010