

# Der Harmonische Oszillator im Pfadintegralformalismus

Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und  
kondensierten Materie

Westfälische Wilhelms Universität

Kevin Eckert, E-Mail: [k\\_ecke03@uni-muenster.de](mailto:k_ecke03@uni-muenster.de)

16. Januar 2012

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Lösungsansatz und Separabilität</b>	<b>4</b>
<b>4</b>	<b>Berechnung der Funktion <math>F(T)</math></b>	<b>5</b>
<b>5</b>	<b>Vergleich mit freiem Teilchen</b>	<b>8</b>
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>9</b>

## 1 Einleitung

Der Pfadintegralformalismus ist ein alternativer Zugang zur Quantenmechanik, der 1948 von Richard P. Feynmann entwickelt wurde. Das Besondere dabei ist, dass die Pfadintegralmethode völlig auf Operatoren verzichtet und nur mit klassischen Größen auskommt. Dafür tauchen ungewöhnliche Konzepte wie die Summation über eine unendliche Anzahl von Wegen auf. Tatsächlich gehen alle Wege, die ein Teilchen nehmen kann, gewichtet mit dem Faktor  $\exp(\frac{i}{\hbar} \cdot S)$ , wobei  $S$  die klassische Wirkung dieses Weges ist, in die Berechnung von Übergangsamplituden ein. Dieses Konzept soll hier anhand der kompakten Abhandlung des harmonischen Oszillators vorgestellt werden.

## 2 Grundlagen

Der harmonische Oszillator wird hier aufgrund einer Vielfalt von Vorteilen gegenüber anderen theoretischen Modellen behandelt. Diese Vorteile sind u.a.:

- exakte Lösbarkeit
- gute Näherung einer Vielzahl von Systemen durch den Oszillator
- bereits mit herkömmlichen Methoden behandelt; Überprüfbarkeit der Ergebnisse der Pfadintegralmethode

Kennt man die Wellenfunktion  $\Psi$  eines Systems zu einem Zeitpunkt  $t$ , so kann man die Wellenfunktion  $\Psi'$  zu jedem beliebigen Zeitpunkt  $t'$  und an jedem Raumpunkt bestimmen. Dies wird mit Hilfe der Green'schen Funktion  $G$  bewerkstelligt. Man schreibt im Eindimensionalen:

$$\Psi(x', t') = \int_{-\infty}^{\infty} G(x', t'; x, t) \cdot \Psi(x, t) dx \quad (1)$$

$G$  nennt man auch den Propagator. Wie bereits aus der Herleitung des Pfadintegrals bekannt ist, stellt der Propagator die Übergangsamplitude eines Teilchens von einem Ort  $x$  zur Zeit  $t$  zu einem Ort  $x'$  zur Zeit  $t'$  dar. Durch Bildung des Absolutbetragsquadrats des Propagators erhält man die Wahrscheinlichkeit für diesen Übergang. Im Folgenden soll nun der Propagator des harmonischen Oszillators berechnet werden. Ganz allgemein gilt im Pfadintegralformalismus:

$$\begin{aligned} G(t_b, x_b; t_a, x_a) &= \int_{x_a}^{x_b} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} Dx(t) \\ &= \int_{x_a}^{x_b} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt} Dx(t) \end{aligned} \quad (2)$$

Dabei ist  $S[x(t)]$  die klassische Wirkung des Weges  $x(t)$  und das Integrationsmaß  $Dx(t)$  ist zu verstehen als  $\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \frac{dx_n}{A}$ , wobei  $A$  bereits aus der Behandlung des freien Teilchens bekannt ist:  $A = \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m}}$ .  $L$  ist die klassische Lagrangefunktion des harmonischen Oszillators und aus der Mechanik wohlbekannt:

$$L(\dot{x}, x, t) = L(\dot{x}, x) = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) \quad (3)$$

Zusätzlich stellt man an den Propagator die Bedingung der Kausalität:

$$G(t_b, x_b; t_a, x_a) = 0 \quad \text{für } t_b < t_a \quad (4)$$

Man betrachtet somit nur die retardierte Lösung der Green'schen Funktion.

### 3 Lösungsansatz und Separabilität

Für rechentechnische Vorteile wählt man nun für einen beliebigen Weg  $x(t)$  den Ansatz:

$$x(t) = x_{kl}(t) + y(t) \quad (5)$$

$x_{kl}(t)$  ist dabei der Weg, den das Teilchen gemäß der klassischen Lagrangefunktion und den daraus resultierenden Bewegungsgleichungen nehmen würde.  $y(t)$  beschreibt die Abweichung des Weges  $x(t)$  vom klassischen Weg. Man beachte insbesondere, dass  $y(t)$  an den Endpunkten des Weges Null ist, da feste Endpunkte betrachtet werden. Zur Veranschaulichung betrachte man die folgende Skizze.

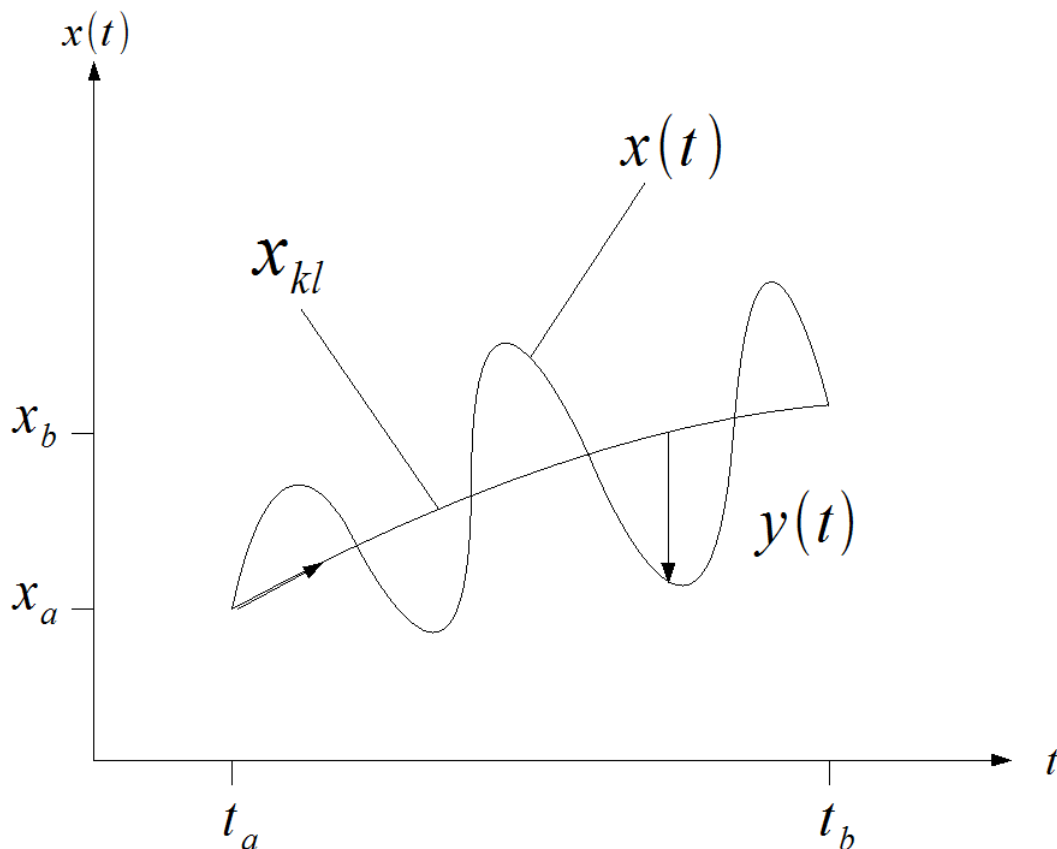


Abbildung 1: Aufspaltung des Weges  $x(t)$

Der Vorteil bei diesem Separationsansatz ist, dass der klassische Weg  $x_{kl}(t)$  bereits aus der Mechanik bekannt ist. Im Folgenden wird nun gezeigt, dass auch die aus diesem Ansatz resultierende Wirkung separabel ist. Es folgt durch einsetzen:

$$\begin{aligned}
S[x(t)] &= S[x_{kl}(t) + y(t)] & (6) \\
&= \int_{t_a}^{t_b} L \, dt \\
&= \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} (\dot{x}_{kl}^2 + 2\dot{x}_{kl} \cdot \dot{y} + \dot{y}^2 - \omega^2(x_{kl}^2 + 2x_{kl} \cdot y + y^2)) \, dt \\
&= \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} (\dot{x}_{kl}^2 - \omega^2 x_{kl}^2) \, dt + \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) \, dt + m \int_{t_a}^{t_b} (\dot{x}_{kl} \cdot \dot{y} - \omega^2 x_{kl} \cdot y) \, dt
\end{aligned}$$

Man identifiziert die ersten beiden Terme mit den Wirkungen der Wege  $x_{kl}(t)$  und  $y(t)$ . Der Mischterm lässt sich mittels der Beziehung  $\dot{x}_{kl} \cdot \dot{y} = \frac{d}{dt}(\dot{x}_{kl} \cdot y) - \ddot{x}_{kl}y$  darstellen. Man erhält:

$$\begin{aligned}
S[x(t)] &= S[x_{kl}(t)] + S[y(t)] + m \int_{t_a}^{t_b} \left( \frac{d}{dt}(\dot{x}_{kl}y) - \ddot{x}_{kl}y - \omega^2 x_{kl}y \right) dt & (7) \\
&= S[x_{kl}(t)] + S[y(t)] + m \dot{x}_{kl}y \Big|_{t_a}^{t_b} - m \int_{t_a}^{t_b} (\ddot{x}_{kl} + \omega^2 x_{kl})y \, dt
\end{aligned}$$

Der dritte Term ist Null, da  $y(t_a)$  und  $y(t_b)$  die Abweichungen vom klassischen Weg an dessen Endpunkten darstellen (Da wir feste Endpunkte betrachten ist hier die Abweichung stets gleich Null). Der vierte Term verschwindet, da als Integrand die klassische Bewegungsgleichung des Oszillators auftritt:  $\ddot{x}_{kl} + \omega^2 x_{kl} = 0$ . Es zeigt sich somit, dass auch die Wirkung vollständig separiert:

$$S[x(t)] = S[x_{kl}(t)] + S[y(t)] \quad (8)$$

Setzt man nun Gleichung (8) in die des Propagators (2) ein, erkennt man, dass in jedem der unendlich vielen Integrale der Faktor  $e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{kl}(t)]}$  auftaucht. Dieser Faktor kann somit heraus gezogen werden und man erhält:

$$G(t_b, x_b; t_a, x_a) = e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{kl}(t)]} \cdot F(t_b, y_b; t_a, y_a) \quad (9)$$

## 4 Berechnung der Funktion $F(T)$

Das Problem der Berechnung ist somit reduziert auf die Berechnung der noch unbekanntem Funktion  $F$ , da die klassische Wirkung hinreichend bekannt ist. Man führt nun eine Substitution durch und verschiebt die Zeiten von  $t_a$  und  $t_b$  nach 0 und  $T = t_b - t_a$ , da dies rechentechnisch bequemer ist. Diese Verschiebung der Zeitkoordinate lässt den Propagator völlig unverändert, da er nicht explizit von der Zeit abhängt. Man schreibt nun unter Ausnutzung der Randbedingungen von  $y(t)$  für die Funktion  $F$ :

$$\begin{aligned}
F(t_b, y_b; t_a, y_a) &= F(T, y_b; 0, y_a) = \int_{y_a}^{y_b} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{m}{2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt} Dy(t) \\
&= \int_0^0 e^{\frac{i}{\hbar} S[y(t)]} Dy(t) \\
&= F(T) & (10)
\end{aligned}$$

Das Integrationsmaß  $Dy(t)$  ist völlig analog zu  $Dx(t)$ . Zudem zeigt es an, dass es sich hier nicht um ein gewöhnliches Integral handelt, sondern vielmehr um eine unendliche Anzahl von Integralen über unendlich viele verschiedene  $y(t)$ . Dadurch erhält die Integration von Null bis Null einen Sinn, man integriert über Abweichungen vom klassischen Weg, die an den Endpunkten Null sind. Die folgende Skizze veranschaulicht den Sachverhalt:

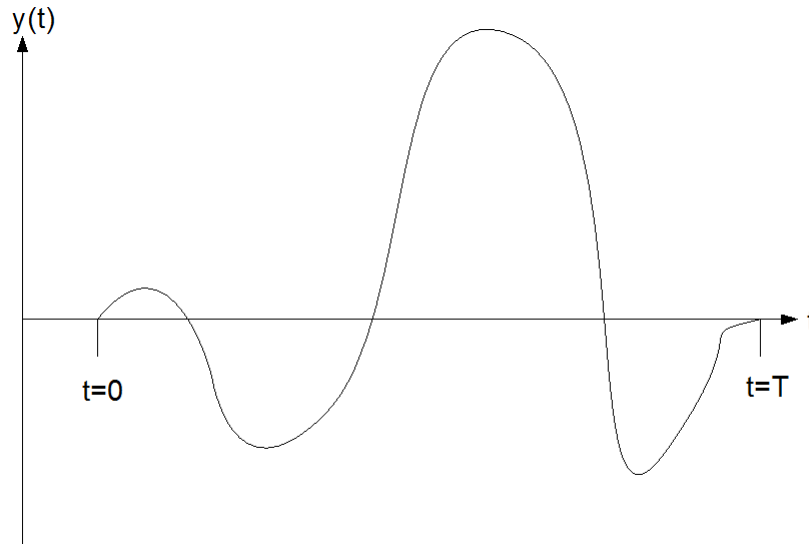


Abbildung 2: Beispiel für einen Weg  $y(t)$  mit Randbedingungen

Die Randbedingungen von  $y(t)$  kann man nun ausnutzen um  $y(t)$  als Fourier-Sinusreihe darzustellen. Es gilt:

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n y_n \quad (11)$$

Die Funktionen  $y_n$  sind bekannt, zum Beispiel erhält man diese bei der Diskussion des Potentialtopfs mit unendlich hohen Wänden:

$$y_n = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \quad (12)$$

Daraus folgt:

$$y(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \quad (13)$$

Für die Wirkung  $S[y(t)]$  folgt daraus mit  $\dot{y}(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{n\pi}{T} \cos\left(\frac{n\pi t}{T}\right)$ :

$$\begin{aligned}
S[y(t)] &= \frac{m}{2} \int_0^T (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt \\
&= \frac{m}{2} \cdot \frac{2}{T} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} a_n a_m \frac{n\pi}{T} \frac{m\pi}{T} \int_0^T \cos\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \cos\left(\frac{m\pi t}{T}\right) dt \\
&\quad - \frac{m}{2} \cdot \omega^2 \frac{2}{T} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} a_n a_m \int_0^T \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \sin\left(\frac{m\pi t}{T}\right) dt
\end{aligned} \tag{14}$$

Mit der Beziehung  $\int_0^T \cos\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \cos\left(\frac{m\pi t}{T}\right) dt = \frac{2}{T} \delta_{n,m}$  ergibt sich daraus:

$$S[y(t)] = \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right) a_n^2 \tag{15}$$

Für die Funktion  $F(T)$  (10) ergibt sich daraus:

$$\begin{aligned}
F(T) &= J \int_0^T e^{\frac{im}{2\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right) a_n^2} Da_n \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} J \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{\sum_{n=1}^N \frac{im}{2\hbar} \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right) a_n^2} \frac{da_1}{A} \frac{da_2}{A} \dots \frac{da_N}{A} \\
\text{mit } A &= \sqrt{\frac{2\pi i \hbar}{m}}
\end{aligned} \tag{16}$$

Die Konstante  $J$  ist hierbei die Jacobi-Determinante des Wechsels von  $y(t)$  zu den  $a_n$ . Sie wird hier jedoch nicht berechnet, da sie im nächsten Schritt eliminiert werden kann. Der Wechsel zum Integrationsmaß  $Da_n$  bedeutet, dass nun über die Fourier-Koeffizienten  $a_n$  integriert wird. Dies wird im zweiten Schritt noch einmal verdeutlicht. Wie man erkennt, handelt es sich um eine unendliche Anzahl von Gaußintegralen der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im}{2\hbar} \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right) a_n^2} \frac{da_n}{A} \tag{17}$$

Mit der Beziehung

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \tag{18}$$

gilt:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m}{2i\hbar} \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right) a_n^2} \frac{da_n}{A} &= \sqrt{\frac{2i\hbar}{m}} \cdot \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \cdot \sqrt{\pi} \cdot \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar}} \\
&= \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}
F(T) &= J \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \\
&= J \left( \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \right) \left( \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left( 1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \right) \\
&= C \cdot \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left( 1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \\
&= C \cdot \sqrt{\frac{\omega T}{\sin(\omega T)}} \tag{19}
\end{aligned}$$

Die Funktion wurde somit in einen Anteil abhängig von  $\omega$  und einen davon unabhängigen aufgespalten. Letzterer wurde mit der Konstante  $J$  zu einer weiteren Konstante  $C$  zusammen gezogen. Bei der Auswertung des von  $\omega$  abhängigen Terms wurde die Produktreihendarstellung des Sinus benutzt.

## 5 Vergleich mit freiem Teilchen

Um die Konstante  $C$  zu bestimmen wird nun der Grenzübergang  $\omega \rightarrow 0$  durchgeführt, welches den harmonischen Oszillator in das freie Teilchen überführt. Der Vergleich dieses Resultats mit der bereits bekannten Amplitude des freien Teilchens ermöglicht die Bestimmung von  $C$ . Für das freie Teilchen gilt:

$$F_0(T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \tag{20}$$

Der Grenzübergang  $\omega \rightarrow 0$  von  $F(T)$  ergibt nun:

$$\begin{aligned}
\lim_{\omega \rightarrow 0} F(T) &= \lim_{\omega \rightarrow 0} C \sqrt{\frac{\omega T}{\sin(\omega T)}} \\
&= C \sqrt{\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\omega T}{\sin(\omega T)}} \\
&= C \sqrt{\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{T}{\cos(\omega T) T}} \\
&= C
\end{aligned}$$

Im dritten Schritt wurde die Regel von de l'Hospital angewandt. Man gelangt also zu dem Ergebnis, dass  $C$  gleich  $F_0(T)$  ist. Es folgt nun:

$$C = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \tag{21}$$

Für die Funktion  $F$  erhält man folglich:



$$F(T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \sqrt{\frac{\omega T}{\sin(\omega T)}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} \quad (22)$$

Um den Propagator  $G$  (Gleichung (2)) komplett zu berechnen, wird noch der Ausdruck für die klassische Wirkung benötigt. Dieser ist jedoch eine rein klassische Größe und lässt sich mit Hilfe der Anfangsbedingungen des Systems berechnen. Hier sei nur das Ergebnis angegeben:

$$G(T, x_b; 0, x_a) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} \cdot e^{\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin(\omega T)} ((x_a^2 + x_b^2) \cos(\omega T) - 2x_a x_b)} \quad (23)$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich ein Teilchen, das sich zum Zeitpunkt  $t = 0$  an Ort  $x_a$  befindet, zu einer Zeit  $t = T$  am Ort  $x_b$  befindet ergibt sich durch Bildung des Absolutbetragsquadrats des Propagators. Man erhält:

$$P(T) dx = \frac{m\omega}{2\pi \hbar \sin(\omega T)} dx \quad (24)$$

Dies ist als Wahrscheinlichkeitsdichte in einem kleinen Raumgebiet  $dx$  zu verstehen. Mit Zufriedenheit stellt man fest, dass sich die selbe Übergangswahrscheinlichkeit auch im Rahmen der herkömmlichen Operatorenmethode ergibt. Im komplexen Exponenten des Propagators verbergen sich sogar Eigenfunktionen und Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators, die man mit einigem Aufwand auch zum Vorschein bringen kann. Da jedoch die nötigen Grundlagen dafür im Rahmen der bisherigen Vorlesungen noch nicht behandelt wurden, verweise ich hier auf die Literatur im Anhang. Trotzdem sei dem Leser versichert, dass die Pfadintegraldarstellung alle Informationen erhält, die man auch im Rahmen des Operatorformalismus ableiten kann.

## 6 Zusammenfassung

Wie unschwer ersichtlich, ist die Pfadintegralbehandlung des harmonischen Oszillators mit einem erheblich höheren Rechenaufwand verbunden und es werden keine neuen Ergebnisse erzielt. In anderen Bereichen der Physik (Statistische Physik, Quantenfeldtheorie) ist die Darstellung mit Pfadintegralen jedoch wesentlich unkomplizierter als die Operatorenmethode und bietet einige Vorteile. Dies liegt auch daran, dass der Pfadintegralformalismus gänzlich mit klassischen Größen und ohne Operatoren auskommt. Zudem sei angemerkt, dass sich auch noch allgemeinere Lagrange funktio nen als die des Oszillators mit der gleichen Methodik wie oben dargelegt behandeln lassen. Zu guter letzt bietet der Pfadintegralformalismus eine Anschaulichkeit, die der Operatorenmethode etwas abhanden geht. Es ist ein faszinierender Gedanke, dass ein Teilchen theoretisch unendlich viele Wege zu einem Ziel gehen könnte und tatsächlich jeder dieser Wege die Art beeinflusst, wie sich das Teilchen letztendlich bewegt.

## Literatur

- [1] Gernot Münster: Quantentheorie, 2. Auflage, de Gruyter Verlag
- [2] Ashok Das: Field Theory - A Path Integral Approach, World Scientific Verlag
- [3] Gerhard Soff: Quantenfeldtheorie,  
[www.physik.uni-kassel.de/exp2/Skripte/Soff-Quantenfeldtheorie.pdf](http://www.physik.uni-kassel.de/exp2/Skripte/Soff-Quantenfeldtheorie.pdf)
- [4] G. Pfanner: Pfadintegrale!, <http://theory.gsi.de/vanhees/faq-pdf/Pfadintegrale.pdf>