Path integral za Harmonski oscilator

Simon Čopar

16. junij 2007

1 Propagator

Propagator definiramo kot

$$K(q_1, t_1; q_0, t_0) = \langle q_1, t_1 | q_0, t_0 \rangle$$

kar je ravno verjetnostna amplituda, da delec, ki je bil ob času t_0 na položaju q_0, najdemo na položaju q_1. Izpišimo operator časovnega razvoja.

$$K(q', T; q, 0) = \left\langle q' | e^{-\frac{iHT}{\hbar}} | q \right\rangle$$

Propagator lahko izračunamo z običajnimi prijemi. Alternativna možnost pa je preko integracije po vseh poteh, ki jih delec lahko opiše. Po tej poti dobimo

$$K(q', T; q, 0) = \int \mathcal{D}q(t) e^{\frac{iS(q(t))}{\hbar}}$$

Kjer je $S(q(t))$ akcija za posamezno pot od q do q' v času T.

2 Klasična akcija HO

Klasično se delec v harmonskem potencialu giblje takole:

$$q(t) = A \sin \omega t + B \cos \omega t$$

$$p(t) = m\omega(A \cos \omega t - B \sin \omega t)$$

z začetnim in končnim pogojem določimo koeficienta

$$A = \frac{q - q' \cos \omega T}{\sin \omega T}$$

$$B = q$$

Lagrangeovo funkcijo harmonskega oscilatorja poznamo:

$$\mathcal{L}(q, p) = T - V = \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 q^2}{2}$$

Izračunajmo akcijo (izvedbe osnovnih trigonometričnih integralov ne bom pisal):

$$S = \int_0^T \mathcal{L}(q(t))\,\mathrm{d}t$$

$$S = \int_0^T \frac{m\omega^2}{2}\left((A\cos\omega t - B\sin\omega t)^2 - (A\sin\omega t + B\cos\omega t)^2\right)\,\mathrm{d}t$$

$$S = \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left((q^2 + q'^2)\cos\omega T - 2qq'\right)$$

3 Gaussov integral

Potrebovali bomo integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ax^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

4 Izpeljava

Operator časovnega razvoja lahko razpišemo v produkt manjših delov.

$$e^{-\frac{\mathrm{i}HT}{\hbar}} = e^{-\frac{\mathrm{i}HN\delta}{\hbar}} = \left(e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}}\right)^N$$

Propagator lahko na ta način razbijemo na majhne dele in med posamezne člene vrinemo operator identitete $\int \mathrm{d}q|q\rangle\langle q|$.

$$K(q', T; q, 0) = \left\langle q'|e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}} \cdots e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}} e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}}|q\right\rangle =$$

$$\left\langle q'|e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}} \cdots \int \mathrm{d}q_2|q_2\rangle\langle q_2|e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}} \int \mathrm{d}q_1|q_1\rangle\langle q_1|e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}}|q\right\rangle$$

Integrale preselimo na začetek, v vmesnih členih pa prepoznamo propagatorje na posameznih časovnih odsekih.

$$K(q', T; q, 0) = \int \mathrm{d}q_1\,\mathrm{d}q_2\,\mathrm{d}q_3 \cdots \mathrm{d}q_{N-1} K(q', T; q_{N-1}, T-\delta) \cdots K(q_2, 2\delta; q_1, \delta) K(q_1, \delta; q, 0)$$

Integral pomeni vsoto verjetnostnih amplitud po vseh poteh, ki vodijo med danima točkama.

Posamezen propagator deluje za majhen čas, zato ga smemo razviti po Taylorju in zintegrirati del z gibalno količino[1].

$$K(q_{i+1}, t+\delta; q_i, t) = \langle q_{i+1}|1 - \frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}\frac{p^2}{2m} - \frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}V(q)|q_i\rangle$$

Razpišimo člen z gibalno količino po ravnih valovih

$$\langle q_{i+1}|p^2|q_i\rangle = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar}\langle q_i + 1|p^2|p_i\rangle\,\langle p_i|q_i\rangle = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar} p_i^2\,\langle q_{i+1}|p_i\rangle\,\langle p_i|q_i\rangle$$

vemo da je $\langle p|q\rangle = e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}pq}$

$$\langle q_{i+1}|p^2|q_i\rangle = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar} p_i^2 e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_i(q_{i+1}-q_i)}$$

ostali deli propagatorja vsebujejo:

$$\langle q_{i+1}|q_i\rangle = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_i(q_{i+1}-q_i)}$$

$$\langle q_{i+1}|V(q)|q_i\rangle = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar} V(q_i) e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_i(q_{i+1}-q_i)}$$

Tako lahko propagator zapišemo v prostoru ravnih valov in pretvorimo nazaj v eksponentno obliko.

$$K(q_{i+1}, t+\delta; q_i, t) = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar}\left(1 - \frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}\frac{p_i^2}{2m} - \frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}V(q_i)\right) e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_i(q_{i+1}-q_i)} = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}(p_i\frac{q_{i+1}-q_i}{\delta} - \frac{1}{2m}p_i^2 - V(q_i))}$$

To je pa gaussov integral ki ga lahko rešimo (opazimo še prvo diferenco koordinate v eksponentu).

$$K(q_{i+1}, t+\delta; q_i, t) = \sqrt{\frac{m\hbar}{2\pi\mathrm{i}\delta}} e^{\frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}(\frac{m\dot{q_i}^2}{2} - V(q_i))}$$

Propagator za celoten čas je torej

$$K(q', T; q, 0) = \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\delta}\right)^{N/2} \int \prod_{i=1}^{N-1} \mathrm{d}q_i e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(q(t))}$$

5 Prehod na homogene robne pogoje

Poti harmonskega oscilatorja zapišimo kot vsoto klasične poti in popravkov s homogenimi robnimi pogoji.

$$q(t) = q_c(t) + y(t)$$

$$S(q) = S(q_c + y) = \int_0^T \mathrm{d}t \left(\frac{m\dot{q}^2}{2} - \frac{m\omega^2 q^2}{2}\right) = S(q_c) + S(y) + \int_0^T \mathrm{d}t \left(m\dot{q_c}\dot{y} - m\omega^2 q_c y\right)$$

Ker za q_c velja Euler-Lagrangeova enačba $\ddot{q_c} = -\omega^2 q_c$, zadnji člen izgine.

$$\int_0^T \mathrm{d}t\,(\dot{q_c}\dot{y} + \ddot{q_c}y) = \int_{(0)}^{(1)} \mathrm{d}(y\dot{q_c}) \equiv 0$$

Od integrala ostane torej le

$$K = e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(q_c)} \int \mathcal{D}y e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(y)}$$

6 Izračun integrala s pomočjo Fourierove vrste

Če razpišemo diskretni približek akcije zgoraj, vidimo da so prisotni mešani členi oblike $q_i q_j$.

$$S \approx \frac{\delta m}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left(\left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\delta} \right)^2 - \omega^2 x_n^2 \right)$$

Po drugi strani v Fourierovi reprezentaciji za zvezno akcijo lahko zapišemo enostavno

$$S = \frac{m}{2} \sum_{k=1}^{N-1} a_k^2 \left(\left(\frac{k\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right)$$

kjer očitno ni mešanih členov. Ker imamo izpeljan propagator za diskretizirano akcijo, bi integracija takega nastavka izgubila vse normalizacijske konstante, ostala bi samo odvistnost $K \propto (\sin \omega T)^{-1/2}$. Kako z mahanjem rok odčarati divergentne predfaktorje je med drugim opisano v [3].

Zato želimo dobiti Fourierovo reprezentacijo direktno iz diskretnega nastavka (v prispevku [2] avtor uporabi Wickovo rotacijo in kompleksno FT). Uporabimo diskretno sinusno transformacijo v unitarni obliki, zato da ne reskaliramo integralov.

$$x_n = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k a_k \sin \frac{k\pi n}{N}$$

$$x_n - x_{n-1} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k a_k \left(\sin \frac{k\pi n}{N} - \sin \frac{k\pi (n-1)}{N} \right) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k a_k \left(2 \cos \frac{k\pi (n+1/2)}{N} \sin \frac{k\pi}{2N} \right)$$

Ker gledamo primer $N \gg 1$ lahko polovičko takoj pozabimo.

$$S = \frac{m\delta}{N} \sum_n \sum_k a_k^2 \left(\frac{4 \cos^2 \frac{k\pi n}{N} \sin^2 \frac{k\pi}{2N}}{\delta^2} - \omega^2 \sin^2 \frac{k\pi n}{N} \right)$$

Vsoto po n prevedemo nazaj na integral: $\sum_n \delta \cos^2 \frac{k\pi n}{N} = \frac{T}{2}$

$$S = \frac{mT}{2N} \sum_k a_k^2 \left(\frac{4 \sin^2 \frac{k\pi}{2N}}{\delta^2} - \omega^2 \right) = \frac{m}{2N^2 \delta} \sum_k a_k^2 \left(\left(2N \sin \frac{k\pi}{2N} \right)^2 - (\omega T)^2 \right)$$

Izračunajmo sedaj $U = \int \prod_k \mathrm{d}a_k e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S}$ z uporabo Gaussovega integrala.

$$U = \left(\frac{2N^2 \delta \pi \hbar}{m\mathrm{i}} \right)^{(N-1)/2} \prod_k \left(\left(2N \sin \frac{k\pi}{2N} \right)^2 - (\omega T)^2 \right)^{-1/2}$$

Z uporabo matematične relacije $\prod_{k=1}^{N-1} \left(2 \sin \frac{k\pi}{N} \right) = N$ ([2]) vidimo, da za velike N zaradi dvojke v imenovalcu argumenta zmnožimo ravno polovico med seboj enakih členov, zato velja $\prod_{k=1}^{N-1} \left(2 \sin \frac{k\pi}{2N} \right) =$

$\sqrt{N}$ (relacijo sem zaradi matematično sumljivega sklepa numerično preveril). Tako lahko izpostavimo sinusni člen.

$$U = \left(\frac{2N^2\delta\pi\hbar}{m\mathrm{i}}\right)^{(N-1)/2} \left(\frac{1}{N^{N-1}\sqrt{N}}\right) \prod_k \left(1 - \left(\frac{\omega T}{2N \sin\frac{k\pi}{2N}}\right)^2\right)^{-1/2}$$

V limiti $N \to \infty$ so edini členi produkta, ki se bistveno razlikujejo od 1 tisti, za katere je argument sinusa majhen. Uporabimo približek majhnih kotov.

$$U = \left(\frac{2N^2\delta\pi\hbar}{m\mathrm{i}}\right)^{(N-1)/2} \left(\frac{1}{N^{N-1}\sqrt{N}}\right) \prod_k \left(1 - \left(\frac{\omega T}{k\pi}\right)^2\right)^{-1/2}$$

Iz kompleksne analize vemo, da funkcijo do faktorja natančno določajo njene ničle in poli.

$$\prod_{k\neq 0} \left(1 - \frac{x}{k\pi}\right) = \frac{\sin x}{x}$$

$$U = \left(\frac{2\pi\delta\hbar}{m\mathrm{i}}\right)^{(N-1)/2} \sqrt{\left(\frac{\omega T}{N \sin\omega T}\right)}$$

Dodamo še normalizacijsko konstanto in klasični del akcije in dobimo rešitev

$$K = \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\delta}\right)^{N/2} U e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_c}$$

$$\boxed{K = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega T}} e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left((q^2+q'^2)\cos\omega T - 2qq'\right)}}$$

Literatura

[1] http://arxiv.org/PS_cache/quant-ph/pdf/0004/0004090v1.pdf

[2] http://bolvan.ph.utexas.edu/~vadim/Classes/2004f.homeworks/osc.pdf

[3] http://galileo.phys.virginia.edu/classes/752.mf1i.spring03/StatPhaseSHO.htm