

Orthogonalitätsrelationen der mehrzeitigen erzeugenden Funktionale des Harmonischen Oszillators

R. WEBER

Institut für Theoretische Physik der Universität Tübingen

(Z. Naturforsch. **26 a**, 220–223 [1971]; eingegangen am 8. Dezember 1970)

We treat the one-dimensional harmonic oscillator completely in the field theoretic calculus of many time generating functionals. Without the results of common quantum mechanics we compute eigen values and functionals of the energy preparing all information of the harmonic oscillator. As an example of functional integration and for applications in scattering theory we prove orthonormality relations of these functionals.

1. Einführung

In der Quantenfeldtheorie kann die Dynamik von physikalischen Systemen durch Funktionale von zeitgeordneten Produkten mit Feldoperatoren in der Heisenbergdarstellung und die zugehörigen Funktionalgleichungen beschrieben werden^{1–5}. Diese vermitteln alle physikalischen Informationen und man besäße in ihnen ein nützliches mathematisches Hilfsmittel, falls man sie ohne Störungstheorie lösen könnte. Der eindimensionale Harmonische Oszillator kann als ein Testsystem betrachtet werden, weil er im Funktionalkalkül exakt lösbar ist und eine Verallgemeinerung auf freie Felder zuläßt⁶.

In Abschnitt 2 wird das Problem zunächst formuliert, dann werden in den Abschnitten 3 bis 7 schrittweise die Funktionalgleichungen gelöst und schließlich in Abschnitt 8 die Orthonormiertheit der Lösungsfunktionale unter einem speziellen Skalarprodukt gezeigt, wodurch dann Konvergenzprobleme im Zusammenhang mit der Entwicklung nach Funktionalsystemen behandelt werden können⁷.

2. Funktionale Grundgleichungen

Die kanonischen Bewegungsgleichungen des Harmonischen Oszillators

$$\frac{d}{dt} q = p, \quad \frac{d}{dt} p = -\omega^2 q \quad (2.1)$$

Sonderdruckanforderungen an Dr. REINHARD WEBER, D-7016-Gerlingen, Robert Bosch GmbH, Forschungsbereich.

¹ K. SYMANZIK, Z. Naturforsch. **9a**, 809 [1954].

² Yu. V. NOVOZHILOV and A. V. TULUB, The Method of Functionals in Quantum Field Theory, Gordon and Breach New York 1961.

³ H. RAMPACHER, H. STUMPF u. F. WAGNER, Fortschr. Phys. **13**, 385 [1965].

⁴ H. P. DÜRR u. F. WAGNER, Nuovo Cim. **46**, 223 [1966].

lassen sich mit Hilfe eines spinoriellen Feldoperators

$$\psi_\alpha(t) = \begin{cases} q(t) & \text{für } \alpha = 1 \\ p(t) & \text{für } \alpha = 2 \end{cases} \quad (2.2)$$

ähnlich wie in ⁸ und ⁹ beim Anharmonischen Oszillator in der Form schreiben

$$\frac{d}{dt} \psi_\alpha(t) = B_{\alpha\beta} \psi_\beta(t), \quad (B_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Die Vertauschungsrelationen lauten dann

$$[\psi_\alpha(t), \psi_\beta(t)]_- = i A_{\alpha\beta} \mathbf{1} \quad (A_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

In ^{8–11} sind Vorschriften angegeben, wie daraus Funktionalgleichungen für die erzeugenden Funktionale der mehrzeitigen Operatorprodukte gebildet werden können. Wir benutzen hier zunächst Matrixelemente in einer beliebigen Hilbert-Raum-Basis $|a\rangle, |b\rangle \dots$

$$T_{ab}(j) = \langle a | T e^{i \int j_\alpha(t) \cdot \psi_\alpha(t) dt} | b \rangle. \quad (2.5)$$

Das Symbol T bedeutet Zeitordnung; bei griechischen Indizes wird die Summenkonvention verwendet. Für die Quellfunktionen $j_\alpha(t)$ wählen wir Funktionen aus dem Raum S (der quadratintegrierbaren und im Unendlichen hinreichend stark abfallenden Funktionen).

Man erhält so die funktionalen Bewegungsgleichungen

$$\left(\delta_{\alpha\beta} \frac{d}{dt} - B_{\alpha\beta} \right) \frac{\delta}{i \delta j_\beta(t)} T_{ab}(j) = i A_{\alpha\beta} j_\beta(t) T_{ab}(j) \quad (2.6)$$

⁵ J. RZEWUSKI, Field Theory II (Functional Formulation of S-matrix Theory), Iliffe Books, London 1969.

⁶ H. STUMPF, Z. Naturforsch. **24a**, 1022 [1969].

⁷ H. STUMPF, Z. Naturforsch. **24a**, 188 [1969].

⁸ D. MAISON u. H. STUMPF, Z. Naturforsch. **21a**, 1829 [1966].

⁹ W. SCHULER u. H. STUMPF, Z. Naturforsch. **22a**, 1842 [1968].

¹⁰ W. SCHULER u. H. STUMPF, Z. Naturforsch. **23a**, 902 [1968].

¹¹ H. SOHR, Preprint, Universität Tübingen 1968.



und die funktionale Quantenbedingung

$$\lim_{t_1 > t_2 \rightarrow t} \left(\frac{\delta^2}{i \delta j_{\alpha_1}(t_1) i \delta j_{\alpha_2}(t_2)} - \frac{\delta^2}{i \delta j_{\alpha_2}(t_1) i \delta j_{\alpha_1}(t_2)} \right) T_{ab}(j) = A_{\alpha_1 \alpha_2} T_{ab}(j). \quad (2.7)$$

Für Energieeigenzustände als Basisvektoren m' , $m = 0, 1, 2, \dots$ ergeben sich zusätzlich die funktionalen Eigenwertgleichungen.

$$\int dt j_{\alpha}(t) \frac{d}{dt} \frac{\delta}{i \delta j_{\alpha}(t)} T_{mm'}(j_1 j_2) = (E_m - E_{m'}) T_{mm'}(j_1 j_2). \quad (2.8)$$

3. Lösungsansatz

Zur Lösung von Gl. (2.6) definieren wir folgende Green-Funktion

$$\left(\delta_{\alpha\beta} \frac{d}{dt} - B_{\alpha\beta} \right) G_{\beta\varrho}(t - t') = \delta_{\alpha\varrho} \delta(t - t'), \quad (3.1)$$

wofür wir durch Fourier-Transformation und anschließende Feynman-Integration in bekannter Weise berechnen¹²

$$(G_{\alpha\varrho}(t - t')) = \frac{1}{2} \left(\frac{\text{sgn}(t-t')}{-i\omega} \right) \frac{i/\omega}{\text{sgn}(t-t')}. \quad (3.2)$$

Zwischen dieser Green-Funktion und der Feynman-Propagator-Funktion des Harmonischen Oszillators

$$\Delta_{\alpha\beta}^F(t - t') := \langle 0 | T \psi_{\alpha}(t) \psi_{\beta}(t') | 0 \rangle \quad (3.3)$$

besteht also die einfache Beziehung

$$A_{\alpha\varrho} G_{\beta\varrho}(t - t') = \Delta_{\alpha\beta}^F(t - t'). \quad (3.4)$$

Mit Hilfe dieser Green-Funktion erhalten wir aus (2.6)

$$\frac{\delta}{i \delta j_{\alpha}(t)} T_{ab}(j) = i \int G_{\alpha\beta}(t - t') A_{\beta\varrho} j_{\varrho}(t') dt' T_{ab}(j) + H_{\alpha}(j). \quad (3.5)$$

Dabei ist der Einfluß der vorläufig nicht näher spezifizierten Randbedingungen im Funktional $H_{\alpha}(j)$ enthalten, für das gilt

$$\left(\delta_{\alpha\beta} \frac{d}{dt} - B_{\alpha\beta} \right) H_{\beta}(j) = 0. \quad (3.6)$$

Die Lösung der Gl. (3.5) ohne den inhomogenen Term $H_{\alpha}(j)$ läßt sich leicht angeben

$$T(j) = \Phi_0 \exp \left\{ -\frac{1}{2} (j A G j) \right\} = \Phi_0 \exp \left\{ -\frac{1}{2} (j \Delta^F j) \right\}, \\ (j \Delta^F j) := \int dt dt' j_{\alpha}(t) \Delta_{\alpha\beta}^F(t - t') j_{\beta}(t'). \quad (3.7)$$

Die inhomogene Gleichung versuchen wir durch Variation der Konstanten zu lösen

$$T_{ab}(j) = T(j) \Phi_{ab}(j), \quad (3.8)$$

was nur möglich ist, wenn gilt

$$T(j) \frac{\delta}{i \delta j_{\alpha}(t)} \Phi_{ab}(j) = H_{\alpha}(j). \quad (3.9)$$

Wir erkennen in $T(j)$ das Schwingersche Vakuumfunktional für den Harmonischen Oszillator¹ und in dem Ansatz (3.8) die bekannte Wick-Regel¹³. Durch diesen Ansatz befriedigen wir übrigens auch gleichzeitig die Quantenbedingung (2.7).

4. Lösung der homogenen Gleichung

Wegen (3.6) entsteht aus der Bedingung (3.9) folgende homogene funktionale Differentialgleichung

$$\left(\delta_{\alpha\beta} \frac{d}{dt} - B_{\alpha\beta} \right) \frac{\delta}{i \delta j_{\beta}(t)} \Phi_{ab}(j) = 0. \quad (4.1)$$

Zu ihrer Lösung machen wir einen Ansatz in der Form einer Volterra-Reihe in den $j(t)$

$$\Phi_{ab}(j) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int dt_1 \dots dt_n \varphi_{ab}^n(t_1, \dots, t_n) j_{\alpha_1}(t_1) \dots j_{\alpha_n}(t_n) \quad (4.2)$$

ohne Einschränkung mit symmetrischen Koeffizienten. In der reellen Funktionentheorie entspricht dies einer Weierstraß-Approximation durch Polynome und ist in solchen Funktionenräumen möglich, für welche die lineare Abschließung der Potenzen x^n dicht liegt. Wir betrachten hier also etwas eingeschränkte Funktionale.

Durch Koeffizientenvergleich erhält man ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\left(\delta_{\alpha\beta} \frac{d}{dt} - B_{\alpha\beta} \right) \varphi^n(t_1, \dots, t_{n-1}, t) = 0, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.3)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$\varphi^n(t_1, \dots, t_n) = \sum_{P(\lambda_1, \dots, \lambda_n)} \sum_{k=0}^n c_k^n Z^1(t_{\lambda_1}) \dots Z^{(\lambda_k)}(t_{\lambda_k}) Z^2(t_{\lambda_{k+1}}) \dots Z^{(\lambda_n)}(t_{\lambda_n}), \quad (4.4)$$

wobei die c_k^n komplexe Konstanten und Z^1, Z^2 die zwei linear unabhängigen Lösungen von (4.3) für $n = 1$ sind

$$Z^1(t_{\alpha}) = (2\omega)^{1/2} \cdot (-i\omega)^{\alpha-1} \cdot e^{-i\omega t}, \quad Z^2(t_{\alpha}) = \overline{Z^1(t_{\alpha})}. \quad (4.5)$$

¹² S. S. SCHWEBER, An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, Harper and Row, New York 1964.

¹³ F. A. BEREZIN, The Method of Second Quantization, Academic Press, New York 1966.

Das zugehörige Funktional $Z(j) = \int \sum_{\alpha} dt Z^1(\alpha) j_{\alpha}(t)$ erfüllt die Relation

$$|Z|^2 = (j \operatorname{Re} \Delta F j). \quad (4.6)$$

5. Eigenwertgleichung

Zur Bestimmung der freien Konstanten c_k^n ziehen wir die Eigenwertgleichung (2.8) heran. Sie liefert für die q^n -Funktionen das folgende Gleichungssystem

$$\sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial t_j} q_{mm'}^n(t_1, \dots, t_n) = (E_m - E_{m'}) q_{mm'}^n(t_1, \dots, t_n), \quad (5.1)$$

das man wieder durch Koeffizientenvergleich der j -Potenzen gewinnt. Die Eigenwertdifferenzen der Energie $\varepsilon_{mm'} = (E_m - E_{m'})/\omega$ ergeben sich durch Einsetzen der Lösung (4.4)

$$(\varepsilon_{mm'} - (2k - n)) c_k^n = 0 \quad (5.2)$$

für alle n und $k = 0, 1, 2, \dots, n$,

d.h. man erhält für die $\varepsilon_{mm'}$ alle ganzen Zahlen und für die Energieeigenwerte selbst (E_0 ist willkürliche Konstante)

$$E_m = m \cdot \omega + E_0. \quad (5.3)$$

Bei vorgegebenem Wert für $\varepsilon = \varepsilon_{mm'}$ sind daher nur noch die Parameter c_k^n mit $k = \frac{1}{2}(n + \varepsilon)$ frei wählbar, während alle anderen verschwinden müssen. Wir wollen das zugehörige Eigenfunktional noch festhalten

$$\Phi_{\varepsilon}(j) = \begin{cases} [-Z(j)]^{\varepsilon} \cdot \sum_{l=0}^{\infty} (-)^l c_{l+\varepsilon}^{2l+\varepsilon} \cdot |Z(j)|^{2l} & \varepsilon \geq 0 \\ [Z(j)]^{-\varepsilon} \cdot \sum_{l=0}^{\infty} (-)^l c_l^{2l-\varepsilon} \cdot |Z(j)|^{2l} & \varepsilon \leq 0 \end{cases} \quad \text{für} \quad (5.4)$$

$$Z(j) := i(2\omega)^{1/2} \cdot \int j_1(t) e^{-i\omega t} dt + \omega(2\omega)^{1/2} \cdot \int j_2(t) e^{-i\omega t} dt.$$

6. Bedingung der Unitarität

Zu jedem Eigenwert gehört also noch eine Schar von Eigenfunktionalen, d.h. jeder Eigenwert ist

beim Harmonischen Oszillator unendlich oft entartet.

Zur eindeutigen Festlegung der Funktionale sehen wir zwei Möglichkeiten: entweder man verschafft sich ein orthonormiertes System von Lösungen, was wir im Abschnitt 8 erörtern, oder man verlangt die Unitarität der Funktionale. Darunter wollen wir folgendes verstehen⁵:

Zu jedem Eigenwert E_m gehört im quantenmechanischen Hilbert-Raum ein Eigenvektor $|m\rangle$. Diese bilden beim eindimensionalen Harmonischen Oszillator bekanntlich eine Basis. Die Matrixelemente $T_{mn}(j)$ des erzeugenden Funktionals in dieser Basis müssen daher der Relation genügen

$$\sum_{m=0}^{\infty} \overline{T_{mk}(j)} \cdot T_{ml}(j) = \sum_{m=0}^{\infty} \langle m | T(j) | k \rangle \cdot \langle m | T(j) | l \rangle = \langle k | T^+(j) T(j) | l \rangle = \delta_{kl} \quad (6.1)$$

falls der Zeitordnungsoperator T unitär ist. Diese Tatsache wird hier als ein Postulat eingeführt, der Beweis ist auf anderem Wege für eine wichtige Gruppe von quantenmechanischen Systemen in ¹⁴ erbracht worden.

Auf die Energiedifferenzen ($\varepsilon = m - k$) umgeschrieben lautet die Forderung

$$\sum_{\varepsilon=-k}^{\infty} \overline{\Phi_{\varepsilon}(j)} \cdot \Phi_{\varepsilon+k-l}(j) = \delta_{kl} e^{(j \operatorname{Re} \Delta F j)}. \quad (6.2)$$

Beachtet man ferner, daß neben Φ_{ε} auch $\overline{\Phi_{-\varepsilon}}$ Eigenlösung zum reellen Eigenwert ε ist, so reicht Gl. (6.2) aus, um durch erneuten Koeffizientenvergleich die übrigen freien Parameter zu bestimmen

$$c_{l+m-n}^{2l+m-n} = \begin{cases} \frac{\sqrt{m!n!}}{(n-l)!l!(l+m-n)!} & \text{für } 0 \leq l \leq n \\ 0 & l > n \end{cases}. \quad (6.3)$$

Unsere Ergebnisse wollen wir nochmals zusammenstellen

$$T_{mn}(j) = \begin{cases} e^{-\frac{1}{2}(j \Delta F j)} \cdot Z(j)^{n-m} \cdot \sum_{l=0}^m (-)^l \cdot |Z(j)|^{2l} \frac{\sqrt{m!n!}}{(m-l)!l!(l+n-m)!} & n \geq m \\ e^{-\frac{1}{2}(j \Delta F j)} \cdot (-Z(j))^{m-n} \cdot \sum_{l=0}^n (-)^l \cdot |Z(j)|^{2l} \frac{\sqrt{m!n!}}{(n-l)!l!(l+m-n)!} & m \geq n \end{cases} \quad \text{für} \quad (6.4)$$

Auch mit Hilfe der Schrödinger-Theorie errechnet man diese Ausdrücke¹⁵.

¹⁴ H. SOHR, Z. Naturforsch. **25a**, 804 [1970].

¹⁵ R. WEBER, Dissertation Universität Tübingen 1970.

7. Symmetrisierung

Da die Funktionalgleichungen (2.6) bis (2.8) gegenüber einer Verschiebung des Parameters t invariant sind, wurde in ¹⁰ die Frage untersucht, ob man das Gleichungssystem geeignet symmetrisieren kann, ohne dabei jedoch die Mannigfaltigkeit der Lösungen zu verändern.

Wir klären diese Frage an folgendem „Ausschmierungsoperator“,

$$S(j) = \sum_{\alpha=1}^2 \int dt dt' \left(r_{\alpha\beta}(t-t') j_{\beta}(t') + s_{\alpha\beta}(t-t') \frac{\delta}{i \delta j_{\beta}(t')} \right), \quad (7.1)$$

indem wir ihn auf (3.5), also auf die mittels Green-Funktion integrierte Bewegungsgleichung anwenden. Ohne den inhomogenen Term $S(j)$ $H_{\alpha}(j)$ sollte sie nur die Lösung besitzen

$$T(j) = \Phi_0 \cdot e^{-\frac{1}{2}(j A^{\nu} j)}. \quad (7.2)$$

Wir variieren nun die Konstante Φ_0 durch den Ansatz

$$\Phi_0(j) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int dt_1 \cdots dt_n \varphi_0^n(t_1 \dots t_n) j_{\alpha_1}(t_1) \cdots j_{\alpha_n}(t_n) \quad (7.3)$$

und gehen damit in die ausgeschmierte Gleichung ein. Durch Koeffizientenvergleich der j -Potenzen erhalten wir das Resultat ¹⁵: Nur der Operator

$$S(j) = \sum_{\alpha=1}^2 \int dt j_{\alpha}(t) \quad (7.4)$$

hat die Eigenschaft, daß die ursprüngliche und die symmetrisierte Funktionalgleichung dieselbe Lösungsgesamtheit hat. Aus dem weiteren Lösungsweg in Abschnitt 3 wird sofort klar, daß der inhomogene Term überhaupt keinen Einfluß auf diese Untersuchung besitzt, weil lediglich $H_{\alpha}(j)$ durch $S(j) H_{\alpha}(j)$ ersetzt wird.

8. Orthogonalitätsrelationen

Wir haben bereits erwähnt, daß man die Eigenfunktionale des Harmonischen Oszillators auch durch Orthonormieren eindeutig festlegen kann. Aus Platzmangel wollen wir in diesem Abschnitt jedoch nur zeigen, daß die errechneten $T_{mn}(j)$ aus (6.4) bezüglich eines speziellen Skalarproduktes im Funktionalraum bereits orthonormiert sind.

Als Skalarprodukt nehmen wir ein sog. Friedrichs-Shapiro-Integral ¹⁶ mit einem bestimmten Maßfaktor; dieses haben STUMPF ⁷ und SOHR ¹¹ zu einem algebraischen Kalkül entwickelt. Für unsere Zwecke genügt dabei folgende Definition. Ein nicht-lineares Funktional sei als Volterra-Reihe gegeben

$$T_{mm'}(j) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{i^r}{r!} \int dt_1 \cdots dt_r \tau_{mm'}^r(t_1 \dots t_r) j_{\alpha_1}(t_1) \cdots j_{\alpha_r}(t_r). \quad (8.1)$$

Dann hat

$$\begin{aligned} \langle T_{mm'}(j) | T_{nn'}(j) \rangle &= \int_{\text{F.S.}} \overline{T_{mm'}(j)} T_{nn'}(j) e^{-(jGj)} \delta j \\ &= \sum_{k+l \text{ gerade}} \frac{(k+l)!}{k! l! (k+l/2)! 2^{(k+l)/2}} \int dt_1 \cdots dt_{k+l} G^{-1}(t_1 t_2) \\ &\quad \cdots G^{-1}(t_{k+l-1} t_{k+l}) \cdot \text{Sym} \{ \tau_{mm'}^k(t_1 \dots t_k) \tau_{nn'}^l(t_{k+1} \dots t_{k+l}) \} \\ &\quad t_1 \dots t_{k+l} \end{aligned} \quad (8.2)$$

die Eigenschaften eines Skalarproduktes, falls die rechte Seite existiert (zum Beweis vgl. ^{7, 11, 16}).

Außerdem ist natürlich auch

$$\langle T_{mm'}(j) | T_{nn'}(j) \rangle_A = \int_{\text{F.S.}} |A(j)|^2 \cdot \overline{T_{mm'}(j)} \cdot T_{nn'}(j) e^{-(jGj)} \delta j \quad (8.3)$$

mit einem multiplikativen Faktor $A(j)$ ein Skalarprodukt für $T_{mn}(j)$. Es genügt daher, die Orthogonalität der Φ -Funktionale nachzuweisen

$$\langle \Phi_{mm'}(j) | \Phi_{nn'}(j) \rangle = \delta_{mn} \cdot \delta_{m'n'}. \quad (8.4)$$

Es gilt nun der Satz: Wählt man als Maßfaktor

$$\begin{aligned} \delta \mu(j) &= e^{-(jGj)} \delta j, \\ (jGj) &:= \int dt dt' j_{\alpha}(t) G_{\alpha\beta}(t, t') j_{\beta}(t') \end{aligned} \quad (8.5)$$

mit dem Kern

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(t, t') &= g_{\alpha\beta} g(t) \delta(t - t'), \\ (g_{\alpha\beta}) &= \begin{pmatrix} \omega^{-1} & 0 \\ 0 & \omega \end{pmatrix}, \quad \int g(t) dt = 1, \end{aligned} \quad (8.6)$$

dann sind die Φ -Funktionale beim Harmonischen Oszillator orthonormiert.

Der Beweis kann direkt durch Ausrechnen der Lebesgue-Integrale geführt werden ¹⁵.

Dagegen liefert das funktionale Integral mit dem einfachen Gauß-Faktor $e^{-(jGj)}$ von SYMANZIK ^{1, 5} schon für den Harmonischen Oszillator eine divergente Norm.

Für die Anregung zu dieser Arbeit und wertvolle Diskussionen ist der Verfasser Prof. Dr. H. STUMPF, Universität Tübingen, zu großem Dank verpflichtet.

¹⁶ K. U. FRIEDRICHS u. H. N. SHAPIRO, Seminar on Integration of Functionals, New York, University 1957.