

Zur Konvergenz der numerischen Berechnung von Energieniveaus mit Hilfe der Wegintegralmethode

A. Freudenhammer und G. Simon

Institut A für Theoretische Physik der Technischen Universität Braunschweig

(Z.Naturforsch. 29 a, 1860–1862 [1974]; eingegangen am 31. Oktober 1974)

On the Convergence of the Numerical Calculations of Eigenvalues with the Method of Path Integrals

A method is presented which permits computation of the spectra of hamiltonians with special potentials. This method uses path integrals for the evaluation of Feynman-propagators and is a generalization of Evseev's method. It is shown that, depending on the form of the potential, expansions of series occur which can be summed up according to criteria of convergency for divergent series, i. e. Cesàro- or Euler-summability. Consequently interchanging of summation and integration is not allowed for all regions of the complex time plane. This is shown explicitly for the 6-dimensional harmonic oscillator.

Einleitung

Der Feynman-Propagator $G(r_2, r_1; t_2 - t_1)$ ¹ ist definiert als die Lösung der partiellen Differentialgleichung

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t_2} G(r_2, r_1; t_2 - t_1) = \hat{H} G(r_2, r_1; t_2 - t_1) \quad (1)$$

mit der Anfangsbedingung

$$\lim_{t_2 \rightarrow t_1} G(r_2, r_1; t_2 - t_1) = \delta(r_2 - r_1) \quad (2)$$

und Randbedingungen, siehe z. B. J. Meixner². Dabei ist \hat{H} der Hamilton-Operator eines n -dimensionalen Systems ohne Spin (r , n -dimensionaler Vektor). Die Lösung von (1) und (2) kann auf zweierlei Weise dargestellt werden. Sie kann einerseits nach Eigenfunktionen $\Phi_s(r)$ entwickelt werden,

$$G(r_2, r_1; t) = \sum_{s=0}^{\infty} \Phi_s(r_2) \Phi_s^*(r_1) \exp[-i\omega_s t], \quad (3)$$

wobei $\hbar \omega_s$ die Eigenwerte des Hamilton-Operators sind und $t = t_2 - t_1$ gesetzt ist. Andererseits können wir die Lösung nach Feynman¹ in Form eines Funktionalintegrals angeben:

$$G(r_b, r_a; t) = \lim_{k \rightarrow \infty} G_k(r_b, r_a; t). \quad (4)$$

Dabei ist

$$\begin{aligned} G_k(r_b, r_a; t) &= \int \dots \int G_0(r_b, r_1; \delta) \exp\left[-\frac{i\delta}{\hbar} V(r_1)\right] \\ &\quad * G_0(r_1, r_2; \delta) \exp\left[-\frac{i\delta}{\hbar} V(r_2)\right] \dots \\ &\quad \exp\left[-\frac{i\delta}{\hbar} V(r_k)\right] G_0(r_k, r_a; \delta) dr_1^n \dots dr_k^n \end{aligned} \quad (5)$$

mit $\delta = t/k$, $k = 1, 2, 3 \dots$ und

$$G_0(r_i, r_j; \delta) = \left(\frac{2\pi i \hbar \delta}{m}\right)^{-k/2} \exp\left[\frac{i m}{2\hbar \delta} (r_i - r_j)^2\right] \quad (6)$$

G_0 ist die Lösung der Differentialgleichung (1) mit der Anfangsbedingung (2) für verschwindendes Potential (d. h. für freie Teilchen).

Mit dem Feynman-Propagator kann man z. B. die Elektronendichte $n(\mathbf{r})$ für ein System von beliebig vielen Elektronen ausdrücken³ oder G kann zur Berechnung von Energieniveaus für nicht zu viele Elektronen Verwendung finden. Auf dieses Problem wird im folgenden eingegangen.

Zur numerischen Berechnung von Energieniveaus

Für die nachfolgenden Überlegungen bilden wir die beiden Funktionen $L(0, z)$ und $F(\omega; p, \varepsilon)$ mittels

$$L(0, z) = \int dr^n G(r, 0; z) \quad (7)$$

und

$$F(\omega; p, \varepsilon) = \int_{-\infty - i\varepsilon}^{+\infty - i\varepsilon} dz \exp[i\omega z - p(z + i\varepsilon)^2] L(0, z), \quad (8)$$

$p, \varepsilon > 0$.

Die mittels (8) eingeführte Funktion $F(\omega; p, \varepsilon)$ ist ein Spezialfall einer Spektralfunktion⁴ und $\varepsilon = 1/kT$ kann als Kehrwert einer absoluten Temperatur

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. G. Simon, Inst. für Theoret. Physik A der Techn. Univ. Braunschweig, D-3300 Braunschweig, Mendelsohnstr. 1 A.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

tur angesehen werden, wie ein Ersetzen von t durch $t - i\varepsilon$ in (3) unmittelbar zeigt. Um die Eigenschaften einer Spektralfunktion für $F(\omega; p, \varepsilon)$ zu zeigen, wählen wir den n -dimensionalen harmonischen Oszillator als Beispiel und berechnen $F(\omega; p, \varepsilon)$ über $L(0, z)$ nach (7) und den Feynman-Propagator $G(r_2, r_1; t)$ nach (3). Die Eigenfunktionen des Problems sind bekannt, und wir erhalten nach einiger Rechnung

$$F(\omega; p, \varepsilon) = \sum_{M=0}^{\infty} A_M'(\omega, \varepsilon) \sqrt{\pi/p} \cdot \exp[-(\omega - \omega_M)^2/4p] \quad (9)$$

mit

$$A_M'(\omega, \varepsilon) = (-1)^M 2^{n/2} A_M \exp(\omega - \omega_M) \varepsilon \quad (10)$$

und

$$A_M = \begin{pmatrix} M + \frac{n}{2} - 1 \\ \frac{n}{2} - 1 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Der Entartungsgrad des Zustands M , A_M , ist hier für gerade n angegeben; für ungerade n erhält man eine etwas veränderte Form.

Die Funktion $F(\omega; p, \varepsilon)$ hat Extrema an den Stellen $\omega_v = \omega_0(v + n/2)$, d. h. beim Grundzustand und jedem zweiten darauffolgenden Eigenwert. Daß nicht alle Eigenwerte auftreten, liegt an der speziell gewählten Form der Funktion $L(0, z)$. Ferner sehen wir, daß die Parameter p, ε größer Null aber sonst weitgehend beliebig gewählt werden können. Es müssen nur die Extrema genügend gut erkennbar sein.

Die Stellen ω_v der Extrema der Funktion $F(\omega; p, \varepsilon)$ sind Eigenwerte des Hamilton-Operators. Wenn es also gelingt, die Funktion $F(\omega; p, \varepsilon)$ auf irgend einem Wege zu berechnen, erhält man die gesuchten Eigenwerte.

Konvergenzverhalten der Reihe für $L(0, z)$

Für den n -dimensionalen Oszillator erhalten wir für die Funktion $L(0, z)$ – ausgehend von der Darstellung des Feynman-Propagators durch Eigenfunktionen gemäß (3) – die Reihenentwicklung

$$L(0, z) = 2^{n/2} \exp(-i\omega_0 n/2) \sum_{M=0}^{\infty} (-1)^M A_M \exp(-2i\omega_0 M z). \quad (12)$$

Diese Reihe kann formal aufsummiert werden mit dem Resultat:

$$L(0, z) = (\cos \omega_0 z)^{-n/2}. \quad (13)$$

Dasselbe Resultat erhält man auch, wenn man von der Funktionalintegraldarstellung (4) ausgeht.

Das Konvergenzverhalten der Reihe (12) ist wie folgt:

- (a) $\text{Im}(z) < 0$: Die Reihe (12) konvergiert absolut und gleichmäßig.
- (b) $\text{Im}(z) = 0$, $\omega_0 z + \pi/2 \pm \pi v$; $v = 0, 1, 2, \dots$: Die Reihe (12) ist Cesàro-summierbar (Definition siehe Anhang), genauer gesagt, (12) ist C_n -limitierbar (n = Anzahl der Freiheitsgrade des harmonischen Oszillators).
- (c) $\text{Im}(z) = 0$, $\omega_0 z = \pi/2 + \pi v$, $v = 0, 1, 2, \dots$: Die Reihe (12) ist divergent.

Es ist nun zu beachten, daß die Vertauschung der Integration in (8) und der Summation in (12) benötigt wird, um das Resultat (9) zu erreichen. Diese

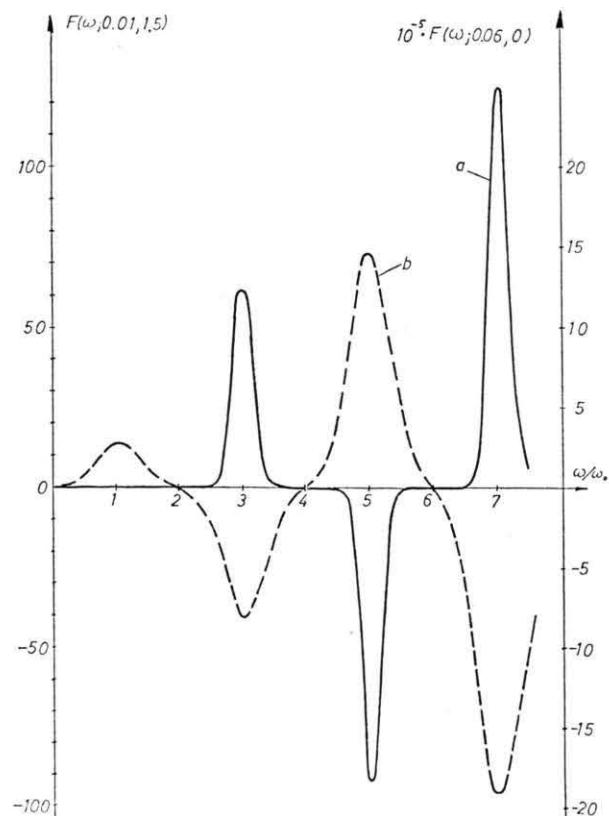


Abb. 1. Numerische Berechnung von $F(\omega; p, \varepsilon)$ für die Fälle a) $F(\omega; 0,01, 1,5)$ und b) $F(\omega; 0,06, 0)$ für den 6-dimensionalen harmonischen Oszillator.

Vertauschung ist aber nur erlaubt, wenn die Summe in (12) gleichmäßig konvergiert. Wenn man dies nicht beachtet, kann man zu irrgen Resultaten gelangen. Wir haben dies nachgewiesen, indem wir $F(\omega; p, \varepsilon)$ nach (8) unter Verwendung der Formel (13) für $L(0, z)$ numerisch integriert haben⁵. (An den Polen wurden Hauptwerte genommen.) In der Abb. 1 sind die Ergebnisse für $n = 6$ dargestellt. Die gestrichelte Kurve ergibt sich, wenn man in der z -Ebene längs der reellen Achse integriert, die ausgezogene Kurve für einen Integrationsweg mit $\text{Im}(z) < 0$. Die Extrema müssen bei $\omega = (2r + 3)\omega_0$; $r = 0, 1, 2, \dots$ liegen. Wir finden aber bei dem inkorrekt Integrationsweg ein zusätzliches Extremum bei $\omega = \omega_0$.

Zusammenfassung und Diskussion

Die vorhergehenden Überlegungen haben den folgenden Zweck. Angenommen, man möchte die Eigenwerte für ein System berechnen, dessen Eigenfunktionen man nicht exakt angeben kann. Ein möglicher Weg besteht darin, den Feynman-Propagator über die Funktionalintegraldarstellung (4) direkt numerisch zu berechnen und dann die Energieeigenwerte beispielsweise über die Funktionen $F(\omega; p, \varepsilon)$ zu bestimmen. Dieser Weg erfordert die Bewältigung der Berechnung von Vielfachintegralen der Dimension über 100. Dies könnte z.B. über die Monte-Carlo-Methode geschehen. Für Systeme mit kleinen Teilchenzahlen wäre diese Methode zwar kaum von Interesse, man sollte aber beachten, daß die Erhöhung der Teilchenzahl die numerischen Schwierigkeiten nicht mehr entscheidend vermehrt. Von daher gesehen könnte es lohnend sein, sich näher mit dem Verfahren zu befassen.

In der Tat hat Evseev⁶ die Grundzustandsenergie von Helium auf diesem Wege berechnet. Er hat dabei den Integrationsweg auf der reellen Achse $\text{Im}(z) = 0$ gewählt. Nach unseren obigen Überlegungen ist dies aber zweifelhaft und die von Evseev mitgeteilten guten numerischen Resultate nicht recht verständlich. Wir konnten sie nicht re-

produzieren. Nach einer Arbeit von Goovaerts und Devreese⁷ ist die Reihe für $L(0, t)$ im Falle des Coulomb-Potentials nur Euler-summierbar, so daß die Vertauschung von Summation und Integration in (8) auch im Coulomb-Fall fragwürdig ist. Allgemein konnten wir bisher kein Kriterium für das Potential V des Hamilton-Operators angeben, derart, daß die für die Interpretation der Extrema notwendige Vertauschung von Summation und Integration in (8) gesichert ist.

Insbesondere muß man noch darauf hinweisen, daß bei dem von Evseev benutzten Integrationsweg für t die Varianz der statistischen Rechnung unendlich wird, weil der Betrag des Integranden Eins ist, während die Varianz im Falle $\varepsilon > 0$ endlich bleibt.

Wir haben gezeigt, daß man zweckmäßigerweise in der komplexen z -Ebene parallel zur imaginären Achse integriert. Die Methode und die damit erzielten numerischen Resultate für Helium werden in einer nachfolgenden Publikation⁸ mitgeteilt.

Anhang

Die Cesàro-Summierbarkeit⁹ ist wie folgt definiert:

Gegeben sei die Reihe

$$\sum_{r=0}^{\infty} B_r, \quad (14)$$

die Partialsummen seien

$$S_n^{(0)} = \sum_{r=0}^n B_r \quad (15)$$

und allgemein sei für $k \geq 1$

$$S_n^{(k)} = \sum_{r=0}^n S_r^{(k-1)}. \quad (16)$$

Dann heißt die Reihe (14) C_k -limitierbar mit dem Grenzwert S , wenn eine kleinste Zahl k existiert, so daß die Folge

$$C_n^{(k)} = S_n^{(k)} / \binom{n+k}{k} \quad (17)$$

im gewöhnlichen Sinne gegen S konvergiert.

¹ R. P. Feynman and A. R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill, New York 1965.

² J. Meixner, Math. Z. **36**, 677 [1933].

³ A. Freudenhammer, Dissertation, Technische Universität Braunschweig 1972.

⁴ L. P. Kadanoff and G. Baym, Quantum Statistical Mechanics, W. A. Benjamin, Inc., New York 1962.

⁵ H. Krome, Diplomarbeit, Technische Universität Braunschweig 1974.

⁶ A. M. Evseev, Sov. Phys. Doklady **14**, 1191 [1970].

⁷ M. J. Goovaerts and J. T. Devreese, J. Math. Phys. **13**, 1070 [1972].

⁸ A. Freudenhammer, in Vorbereitung.

⁹ K. Knopp, Theorie und Anwendungen unendlicher Reihen, S. 498, Springer, Berlin 1964.