BAYERISCHE AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN
MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICHE KLASSE

SITZUNGSBERICHTE

JAHRGANG
1973

MÜNCHEN 1974

VERLAG DER BAYERISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN
In Kommission bei der C. H. Beck'schen Verlagsbuchhandlung München

Quantisierung des gedämpften harmonischen Oszillators*

Von **Fritz Bopp** in München

Sektion Physik der Ludwig-Maximilians-Universität München

Vorgelegt am 4. Mai 1973

Abstract

How to quantize dissipative classical equations of motion is still an open question. Some people even believe that it might be impossible for deep reasons. In particular, wave equations cannot give account on the growing entropy connected with the dissipation. – However, if we derive both, a dissipative equation and its adjoint one, from one common Lagrangean we obtain by cannonical quantization quantum states with certain energies, lifetimes and transition probalities. That is all what we need, to formulate the stochastic equation describing the energy disspation. – The result may be important for the quantization of the electromechanical equations of motion including the whole radiation force, even its dissipative part neglected up to now in such considerations[1].

1. Einleitung

Die Schwierigkeiten, die der Quantisierung eines dissipativen Systems der klassischen Mechanik entgegenstehen, sind bekannt. Sie rühren davon her, daß keine Hamiltonfunktion existiert, die ihre Dynamik beschreibt. Frühere Versuche[2] des Verfassers, sie zu umgehen, sind gescheitert. Teils waren die Methoden, auf Umwegen zu Hamiltonfunktionen zu gelangen, nicht in ersichtlicher Weise auf beliebige Systeme anwendbar, teils mochten Interpretationsschwierigkeiten im Wege stehen. Der Umstand, daß es in der klassischen Mechanik ohne Schwierigkeiten möglich ist, Reibungskräfte zu berücksichtigen, läßt uns immer wieder fragen, wie man dissipative Kräfte quantisieren kann.

---

* 15. März 1973.

Nachdem es gelungen ist, die Bewegungsgleichungen der Elektromechanik[3] bei Vernachlässigung des dissipativen Anteils der Strahlungskraft in Strenge zu bestimmen, zu quantisieren und die entstehende Wellengleichung zu integrieren, stellt sich obige Frage unabweisbar. Denn so wie die Frequenz eines Oszillators durch seine Dämpfung modifiziert wird, so wird die Masse einer Punktladung auch von dem dissipativen Anteil der Strahlungskraft abhängen.

Am Beispiel des gedämpften harmonischen Oszillators wollen wir zeigen, wie man die Aufgabe bewältigen kann. Zu jeder dissipativen Bewegungsgleichung gibt es eine davon verschiedene adjungierte. Schon die mathematische Analyse der Differentialgleichung zeigt, daß man beide Gleichungen zusammen ins Augen fassen soll, auch wenn die adjungierte Gleichung keine physikalische Bedeutung hat. Für die Quantisierung ist es von Bedeutung, daß sich beide Gleichungen zusammen aus einer gemeinsamen Lagrangefunktion ableiten lassen.

Damit ist der Weg zu formaler kanonischer Quantisierung geöffnet. Es ergibt sich eine Wellengleichung, die zu zwei Systemen von Quantenzuständen führt. Beide Systeme haben ein Oszillatorspektrum. Die Frequenz stimmt mit der des klassischen gedämpften Oszillators überein. Die Amplituden der zugehörigen Wellenfunktionen fallen bei dem einen Oszillatorsystem exponentiell ab. Bei dem anderen steigen sie entsprechend an. Sie liefern die Lebensdauer des betreffenden Zustands. Nur der Grundzustand ist stationär. Läßt man keine Operatoren zu, die die sich selbst aufschaukelnden Oszillatoren anregen, so spannen diejenigen Zustände, bei denen die sich aufschaukelnden Oszillatoren im Grundzustand sind, einen Zustandsraum auf, der dem gedämpften Oszillator zugeordnet ist.

Der Übergang von einem zum anderen Quantenzustand wird nicht mehr durch die Wellengleichung selbst beschrieben, sondern durch die von den radioaktiven Zerfallsreihen her bekannte stochastische Gleichung, was damit zusammenhängt, daß dieser Vorgang mit Entropievermehrung verbunden ist. Doch ergeben sich die Übergangswahrscheinlichkeiten aus der dissipativen Kraft.

Man erhält also keine überraschenden Ergebnisse. Aber es stellt sich das, was man erwartet, folgerichtig ein, sobald man die

Lagrangefunktion in Händen hat. Da es zu jeder Bewegungsgleichung eine adjungierte gibt und da die Adjunktion die Existenz einer Lagrangefunktion für beide Gleichungen impliziert, dürfte das Verfahren allgemein anwendbar sein.

2. Kanonische Gleichungen des gedämpften Oszillators

Die klassische Bewegungsgleichung des gedämpften harmonischen Oszillators schreiben wir in folgender Form:

$$m\ddot{x} + 2m\gamma\dot{x} + m\omega_0^2 x = 0 \tag{2.1}$$

Die adjungierte Gleichung lautet:

$$m\ddot{y} - 2m\gamma\dot{y} + m\omega_0^2 y = 0 \tag{2.2}$$

Beide folgen aus der Lagrangefunktion

$$L = m\dot{x}\dot{y} - m\omega_0^2 xy + m\gamma(x\dot{y} - y\dot{x}) \tag{2.3}$$

Daraus erhält man als kanonisch konjungierte Impulse

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{y} - m\gamma y, \; q = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{x} + m\gamma x \tag{2.4}$$

Mittels der Umkehrung

$$m\dot{x} = q - m\gamma x, \quad m\dot{y} = p + m\gamma y \tag{2.5}$$

ergibt sich aus

$$H = p\dot{x} + q\dot{y} - L$$

die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{m} pq - \gamma(xp - yq) + m\omega^2 xy, \; \omega = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}. \tag{2.6}$$

Darin ist ω die Frequenz des gedämpften Oszillators.

Quadratische Formen in kanonischen Koordinaten kann man mittels kanonischer Transformationen auf Hauptsachen bringen. Das leistet hier:

$$
\begin{aligned}
p &= \frac{1}{2}\left(P + m\omega\, Y + iQ + im\omega\, X\right)\\
q &= \frac{1}{2}\left(P + m\omega Y - iQ - im\omega\, X\right)\\
x &= \frac{i}{2m\,\omega}\left(P - m\omega Y + iQ - im\omega\, X\right)\\
y &= \frac{-i}{2m\,\omega}\left(P - m\omega Y - iQ + im\omega X\right)
\end{aligned}
\tag{2.7}
$$

Mittels Poissonklammern zeigt man leicht, daß (2.7) eine kanonische Transformation ist. Durch Substitution in (2.6) erhält man

(2.8)
$$H = \frac{1}{2m}\left(1 - \frac{i\gamma}{\omega}\right)\left(P^2 + m^2\omega^2 X^2\right) + \frac{1}{2m}\left(1 + \frac{i\gamma}{\omega}\right)\left(Q^2 + m^2\omega^2 Y^2\right)$$

Im Limes $\gamma \to 0$ ist das die Hamiltonfunktion für zwei Oszillatoren ohne Wechselwirkung. Daß sich im Falle $\gamma \neq 0$ nur Faktoren ändern, dürfte eine spezielle Eigenschaft von Oszillatoren sein.

Die physikalisch sinnvollen Lösungen von (2.1/2) sind Linearkombinationen von

$$x = e^{\pm i\omega t - \gamma t}, \quad y = 0 \tag{2.9}$$

Gl. (2.4) macht daraus

$$p = 0, \quad q = \pm\, im\omega e^{\pm i\omega t - \gamma t} \tag{2.10}$$

Damit erhält man aus (2.7) beziehungsweise:

$$
\begin{aligned}
&P = 0,\ X = 0,\ Q = -m\omega x,\ Y = ix,\ x = e^{+i\omega t - \gamma t}\\
&P = -im\omega x,\ X = x,\ Q = 0,\ Y = 0,\ x = e^{-i\omega t - \gamma t}
\end{aligned}
\tag{2.11}
$$

Die Hamiltonfunktion (2.8) beschreibt zwei Oszillatoren. Beide sind an den physikalisch sinnvollen Lösungen beteiligt, wenn man bereits x als unmittelbar relevante Koordinaten betrachtet, beide aber nicht mit allen Lösungen. Denn aus (2.8) erhält man als „Frequenzen" für

$$
\begin{aligned}
P, X&:\ \Omega = \pm(\omega - i\gamma)\\
Q, Y&:\ \Omega = \pm(\omega + i\gamma)
\end{aligned}
\tag{2.12}
$$

also stets abklingende und sich aufschaukelnde Teile zusammen, d. h. Lösungen für den Oszillator und den unphysikalischen adjungierten Oszillator.

Es empfiehlt sich in Hinblick auf die Quantisierung zu folgenden Variablen überzugehen, die nur noch bis auf einen Faktor kanonisch sind:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(P - im\omega X\right), & b &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(Q - im\omega Y\right) \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(P + im\omega X\right), & b^+ &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(Q + im\omega Y\right) \end{aligned} \tag{2.13}$$

Diejenigen Poissonklammern, welche nicht verschwinden, lauten:

$$[a, a^+] = \frac{i}{\hbar}, \quad [b, b^+] = \frac{i}{\hbar} \tag{2.14}$$

Durch Substitution von (2.11) erhält man für $y = 0$ und

$$\begin{aligned} x &= e^{+i\omega t - \gamma t} : a = a^+ = 0, \; b = 0, \; b^+ = -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, x; \\ x &= e^{-i\omega t - \gamma t} : b = b^+ = 0, \; a^+ = 0, \; a = -i\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, x. \end{aligned} \tag{2.15}$$

Dieses verschränkte Ergebnis versteht man noch besser, wenn man die neuen Variablen (2.13) in (2.7) einführt:

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{2}\sqrt{2m\hbar\omega}\,(a^+ + ib), & q &= \frac{1}{2}\sqrt{2m\hbar\omega}\,(a - ib^+) \\ x &= +\frac{i}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\left(a + ib^+\right), & y &= -\frac{i}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\left(a^+ - ib\right) \end{aligned} \tag{2.16}$$

Schließlich lautet die Hamiltonfunktion (2.8) in den neuen Variablen:

$$H = \hbar\omega\,(a^+a + b^+b) - i\hbar\gamma\,(a^+a - b^+b) \tag{2.17}$$

3. Quantisierung des gedämpften Oszillators

Die kanonische Quantisierung besteht darin, daß wir die vorkommenden Größen durch hermitesche Operatoren und die Poissonklammern $[A, B]$ durch die Kommutatoren $\frac{i}{\hbar}[A, B]$ ersetzen. Danach folgt aus (2.14) für die Kommutatoren:

$$[a, a^+] = 1, \; [b, b^+] = 1 \tag{3.1}$$

In (2.17) haben wir

$$a^+a \to {}^1/_2 \, (a^+a + aa^+) = a^+a + \frac{1}{2}$$

$$b^+b \to {}^1/_2 \, (b^+b + bb^+) = b^+b + \frac{1}{2}$$

zu ersetzen, weil die Nullpunktenergie experimentell faßbar ist, so daß sich folgender Hamiltonoperator ergibt:

$$H = \hbar\omega \, (a^+a + b^+b + 1) - i\hbar\gamma \, (a^+a - b^+b) \tag{3.2}$$

Bei der Frage nach der Bedeutung dieses Ergebnisses haben wir davon auszugehen, daß die in (2.3) vorkommenden Koordinaten, anders als oben angenommen, keine unmittelbar ersichtliche physikalische Bedeutung haben, wie aus der Hamiltonfunktion (2.6) hervorgeht. Eine solche bietet sich erst in (2.8) an. Denn diese geht im Limes $\gamma \to 0$ in zwei unabhängige ungedämpfte Oszillatoren über. Wir werden also X und Y als Oszillatorkoordinaten betrachten. In Hinblick auf (3.2) sprechen wir von a- und b-Oszillatoren. Offensichtlich ist (3.2) separierbar. Wir erhalten

$$H = H' + H'' \tag{3.3}$$

$$H' = \hbar\omega \left(a^+a + \frac{1}{2}\right) - i\hbar\gamma \, a^+a, \; H'' = \hbar\omega \left(b^+b + \frac{1}{2}\right) + i\hbar\gamma b^+b$$

wenn wir die Nullpunktsenergie wie im Falle $y = 0$ auf beide Oszillatoren verteilen. Die Eigenlösungen lauten:

$$\left| n' > \right. = \frac{1}{\sqrt{n'!}} \left(a^+\right)^{n'} \left| 0' > \right., \; \left| n'' > \right. = \frac{1}{\sqrt{n''!}} \left(b^+\right)^{n''} \left| 0'' > \right. \tag{3.4}$$

falls

$$a \, | \, 0' > = 0, \; b \, | \, 0'' > = 0 \tag{3.5}$$

Als Eigenwerte von H' und H'' erhält man

$$\begin{aligned} H' &= \hbar\omega \left(n' + \frac{1}{2}\right) - i\hbar\gamma n' \\ H'' &= \hbar\omega \left(n'' + \frac{1}{2}\right) + i\hbar\gamma n'' \end{aligned} \tag{3.6}$$

Daraus ergeben sich folgende Zeitabhängigkeiten der Eigenzustände:

$$(3.7)\quad \begin{aligned} \psi'_{n'} &= \exp\left(-i\left(n' + \tfrac{1}{2}\right)\omega t - n'\gamma t\right)\Big| n' > \\ \psi''_{n''} &= \exp\left(-i\left(n'' + \tfrac{1}{2}\right)\omega t + n''\gamma t\right)\Big| n'' > \end{aligned}$$

Wegen der Zeitfaktoren kann man diese Zustandsvektoren nicht zeitunabhängig auf 1 normieren. Vielmehr erhält man für die Normen

$$(3.8)\qquad \psi'^{+}_{n'}\psi'_{n'} = e^{-2n'\gamma t},\ \psi''^{+}_{n''}\psi''_{n''} = e^{+2n''\gamma t}.$$

Die exponentiell anwachsenden Oszillationen sind unphysikalisch. Sie treten auf, weil die unphysikalischen adjungierten Oszillatoren mit im Spiele sind und lassen sich wie im klassischen Fall separieren, so daß wir im weiteren nur die ersten Gleichungen aus (3.3/8) zu berücksichtigen brauchen.

Wir haben gezeigt, daß es für den gedämpften Oszillator die Hamiltonfunktion H' gibt. Sie liefert auch bei Dämpfung Quantenzustände, und zwar solche mit den Energien $n'\hbar\omega$, d. h. mit der erwarteten, durch die Dämpfung modifizierte Frequenz $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}$. Außerdem liefert sie die Zerfallskonstanten

$$(3.9)\qquad \lambda_{n'} = -\frac{d\psi^{t}_{n'}\psi_{n'}}{dt}\Big/\psi^{t}_{n'}\psi_{n'} : \lambda_{n'} = 2n'\gamma.$$

Der zerfallende Zustand könnte in alle tieferen übergehen. Was wirklich passiert, regelt der dissipative Term in der zu (2.1) analogen Gleichung für a. Nach (3.2) ist

$$\dot{a} = \frac{i}{\hbar}\left[H, a\right] = -i(\omega - i\gamma)a,\ \ddot{a} = -(\omega - i\gamma)^2 a.$$

Daraus folgt

$$\ddot{a} + 2\gamma\dot{a} + \omega_0^2 a = a\left(-(\omega - i\gamma)^2 - 2i\gamma(\omega - i\gamma) + \omega^2 + \gamma^2\right) = 0.$$

Entsprechendes gilt für a^+. Für die Energiedissipation ist

$$2\gamma\dot{a} = -2i\gamma(\omega - i\gamma)a$$

verantwortlich. Die Matrixelemente

$$< m' \, | a | \, n' > = \sqrt{n'} \, \delta_{m' - n' + 1}$$

zeigen, daß nur Übergänge zum nächst niedrigen Quantenzustand vorkommen:

$$n' \to m' = n' - 1 .$$

Die zugehörige Übergangswahrscheinlichkeit ist zum Quadrat des Matrixelements proportional:

$$w_{n'} \sim | < n' - 1 \, | a | \, n' > |^2 = n' .$$

Der Faktor bestimmt sich daraus, daß der untere Zustand das aufnimmt, was die oberen abgeben, weil die Summe der Wahrscheinlichkeiten konstant bleibt. Daraus folgt in unserem Fall schließlich:

$$w_{n'} = 2 \, n' \gamma . \tag{3.10}$$

4. Das Zerfallgesetz

Damit können wir die stochastische Gleichung formulieren, die den zeitlichen Ablauf des Zerfalls beschreibt. Da dabei die Entropie vermehrt wird, ist dafür weder die Schrödingersche, noch die v. Neumannsche Gleichung zuständig. Das ist der Punkt, der einen zweifeln lassen konnte, ob man dissipative Systeme quantisieren kann. Wir haben gesehen, daß und wie die Quantisierung möglich ist, und wir haben gelernt, daß sie die Wahrscheinlichkeiten liefert, die in die stochastische Gleichung eingehen. Die stochastische Beschreibung ist nötig, weil sich bei der Energieabgabe nach außen die Phasen willkürlich ändern. Die zeitabhängige Schrödingergleichung kann also nur von jedem Augenblick zum nächsten gelten.

Wie in der Gleichung für radioaktive Zerfallsketten[4], gilt für die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeit des n-ten Quantenzustands

$$\frac{d w_n}{dt} = - 2 \gamma n w_n + 2 \gamma (n + 1) \, w_{n+1} . \tag{4.1}$$

Daraus folgt

$$\frac{d}{dt}\sum_{n=0}^{\infty} w_n = -2\gamma \sum_{n=1}^{\infty} n w_n + 2\gamma \sum_{n=0}^{\infty} \left(n+1\right) w_{n+1} = 0,$$

so daß die Gesamtwahrscheinlichkeit normierbar bleibt:

$$\sum_{n=0}^{\infty} w_n = 1. \tag{4.2}$$

Klarerweise ist

$$w_0 = 1,\ w_n = 0 \text{ für } n \neq 0 \tag{4.3}$$

ein Integral. Es ist der ergodische Zustand, dem alle Wahrscheinlichkeiten zustreben. Alle Anregungszustände kehren am Ende zum Grundzustand zurück.

Unter der speziellen Voraussetzung

$$w_2(0) = 1,\ w_n(0) = 0 \text{ für } n \neq 2$$

erhält man z. B.

$$w_2 = e^{-4\gamma t}$$

$$w_1 = 2e^{-2\gamma t} - 2e^{-4\gamma t}$$

$$w_0 = 1 - 2e^{-2\gamma t} + e^{-4\gamma t}.$$

Gl. (4.1) läßt sich übrigens leicht allgemein integrieren.

5. Ergebnisse

Die Frage nach der Quantisierung dissapativer Kräfte führt in Neuland mit unsicheren Wegen. Wir haben sie am Beispiel des gedämpften harmonischen Oszillators untersucht. Die Beschränkung auf ein Beispiel läßt es geraten erscheinen, noch nicht von Prinzipien zu sprechen. Doch wollen wir einige Thesen formulieren, die verallgemeinerungsfähig sein dürften:

1. Eine Bewegungsgleichung mit Energiedissipation und ihre adjungierte lassen sich aus einer Lagrangefunktion ableiten.
2. Die dadurch bestimmte Hamiltonfunktion führte zu einer Wellengleichung, die bei geeigneter Koordinatenwahl wie vor der Quantisierung in zwei Gleichungen zerfällt, von denen die

eine auf das dissipative und die andere auf das adjungierte System bezogen ist.

3. Bei Beschränkung auf die dissipative Wellengleichung erhält man Quantenzustände mit bestimmter Energie.
4. Die bei der formalen Quantisierung unbestimmt bleibende Faktorfolge muß so gewählt werden, daß der Grundzustand stationär ist. Die Zustandsvektoren der angeregten Zustände haben im allgemeinen eine exponentiell abklingende Amplitude, welche die Lebensdauer zerfallender Zustände bestimmt.
5. Die Auswahlregeln und Übergangswahrscheinlichkeiten leiten sich aus dem dissipativen Term der Bewegungsgleichung im Heisenbergbild ab.
6. Der zeitliche Ablauf des Zerfalls der Quantenzustände ist durch eine stochastische Gleichung bestimmt, in der die Zerfalls- und Übergangswahrscheinlichkeiten aus der quantisierten Gleichungen folgen.

Natürlich ist es bei einem System, dessen Eigenschaften man genügend kennt, leicht zu erkennen, was man tun muß, wenn die überkommenen Prinzipien nicht ausreichen. Erst weitere Anwendungen werden zeigen, ob und wie weit wir auf dem rechten Wege sind, und womöglich zu einer Vertiefung der mathematischen Grundlagen führen.

Literaturhinweise und Anmerkungen

[1] Wheeler, J. A.; R. P. Feqnman: Rev. Mod. Phys. 17, 157 (1945). Erst die Nichtberücksichtigung des dissipativen Anteils der Strahlungskraft zwingt zu der weiterführenden Betrachtung, diese Kräfte als Wechselwirkung mit der nicht zum System gehörigen Materie zu beschreiben, welche durch einen unendlich fernen Absorber simuliert wird. Die dissipative Strahlungskraft beschreibt lokal den „Umwelteinfluß". Vgl. hierzu, wie man in der Frühzeit die Strahlungskraft aus dem Energie- und Impulsfluß im Unendlichen berechnet hat.[5] Angesichts der Äquivalenz der elektromechanischen Bewegungsgleichungen mit dem System aus Bewegungs- und Feldgleichungen haben wir hier anders als Wheeler-Feynman nicht etwa ein neues Konzept[6] (Fernwirkungstheorie), sondern nur eine andere Darstellung.

[2] Bopp, F.: Z. angew. Physik, 14, 699 (1962). Nach Abschluß dieser Arbeit ist ein Vorabdruck eingegangen: M. J. Kahn, N. Y. Rivier: A refor-

mulation of the damped harmonie oseillator problem; Phys. Dpt., Imperial College, London SW 7, 2 BZ.

[3] Bopp, F.; W. Lutzenberger: Z. Naturforschg. 28a, Nr. 4 (1973).

[4] Born, M.; P. Jordan: Elementare Quantenmechanik (Struktur der Materie IX), J. Springer, Berlin 1930, § 65, Gl. (20).

[5] Abraham, M.: Theorie der Elektrizität II, 1. Auflage; B. G. Teubner, Leipzig 1905; Kap. II, § 13, p. 121.

[6] Was geschieht übrigens mit zwei Oszillatoren in 10 Lichtjahren. Abstand klassisch physikalisch in den ersten 10 Jahren, wenn anfangs einer angeregt und der andere in Ruhe ist und wenn wir nur die nicht dissipative Kopplung berücksichtigen?