

Pfadintegral in der Quantenmechanik

Janine Hütig

21. Juni 2006

1 Einleitung

Das Pfadintegral wurde 1948 von Richard Phillip Feynman entwickelt. Dies war erst möglich, nachdem Wiener 1923 die mathematischen Grundlagen in seiner Arbeit zur Brown'schen Molekularbewegung definierte und Dirac im Jahre 1933 einen Artikel über den Kurzzeitpropagator veröffentlichte, der für das Pfadintegral benötigt wird. Als Feynman dann um 1940 nach einer Verknüpfung zwischen der klassischen Mechanik, insbesondere dem Hamilton'schen Prinzip, und der Quantenmechanik suchte, fand er sie in Diracs Arbeit und konnte so das Pfadintegral definieren.

Inzwischen ist der Pfadintegralformalismus sehr gut entwickelt, selbst das Wasserstoffatom wurde 1979 korrekt mit Hilfe des Pfadintegrals beschrieben.

2 Lagrange-Formalismus

Da wir später die klassische Wirkung und somit die Lagrange-Funktion, sowie die Lagrange-Gleichung benötigen, hier eine kurze Wiederholung des Lagrange-Formalismus:

Der Lagrange-Formalismus eignet sich besonders gut für Systeme mit Zwangsbedingungen zur Herleitung der Bewegungsgleichung. Hierbei betrachtet man generalisierte Koordinaten q_1, \dots, q_n , in die die Zwangsbedingungen schon eingearbeitet sind. Außerdem ist zu beachten, dass die Koordinaten q_i unabhängig sind von ihrer jeweiligen zeitlichen Ableitung \dot{q}_i für alle $i = 1 \dots n$.

Die Lagrange-Funktion ist definiert als $L = T - V$, wobei T die kinetische Energie und V das zu Grunde liegende Potential ist. Nun kann man mit Hilfe des Hamilton'schen Prinzips die Lagrange-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (1)$$

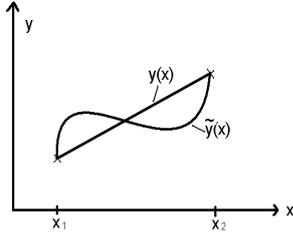
herleiten.

Das Hamilton'sche Prinzip besagt, dass die Bewegung eines mechanischen Systems zwischen den Zeiten t_1 und t_2 derart erfolgt, dass das Wirkungsintegral (die Wirkung) extremal wird. Hierbei ist die Wirkung definiert als

$$S := \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt \quad (2)$$

mit $q = (q_1, \dots, q_n)$ und $\dot{q} = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n)$.

Um nun S_{extremal} zu berechnen, verwendet man Variationsrechnung:



Definiere also die Funktion

$$\tilde{y}(x) := y(x) + \varepsilon\eta(x)$$

mit ε als Parameter und η beliebiger differenzierbarer Funktion mit $\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0$. Somit haben \tilde{y} und y die gleichen Anfangs- und Endpunkte, dazwischen kann jedoch jeder mögliche Weg angenommen werden.

Wenn jetzt also $S =: I(\varepsilon)$ extremal werden soll, ist dies gleichbedeutend mit $\frac{dI(\varepsilon)}{d\varepsilon}\Big|_{\varepsilon=0} = 0$. Also erhalten wir mit $\tilde{y}' = \frac{d\tilde{y}}{dx}$:

$$\begin{aligned} \frac{dI(\varepsilon)}{d\varepsilon} &= \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial f(\tilde{y}, \tilde{y}', x)}{\partial \tilde{y}} \frac{d\tilde{y}}{d\varepsilon} + \frac{\partial f(\tilde{y}, \tilde{y}', x)}{\partial \tilde{y}'} \frac{d\tilde{y}'}{d\varepsilon} \right) dx \\ \frac{dI(\varepsilon)}{d\varepsilon}\Big|_{\varepsilon=0} &= \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial f(y, y', x)}{\partial y} \eta(x) + \frac{\partial f(y, y', x)}{\partial y'} \eta'(x) \right) dx \end{aligned}$$

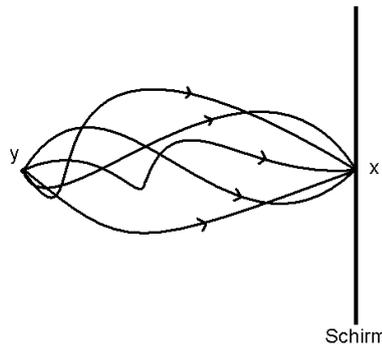
wobei im zweiten Schritt $\frac{d\tilde{y}}{d\varepsilon} = \eta$ und $\frac{d\tilde{y}'}{d\varepsilon} = \eta'$ benutzt wurde und das Integral an der Stelle $\varepsilon = 0$ ausgewertet wurde.

Integriert man nun in letzter Gleichung den zweiten Term partiell, so erhält man mit $\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0$

$$\frac{dI(\varepsilon)}{d\varepsilon}\Big|_{\varepsilon=0} = \int_{x_1}^{x_2} \underbrace{\left(\frac{\partial f(y, y', x)}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f(y, y', x)}{\partial y'} \right)}_{=:g(x)} \eta(x) dx \stackrel{!}{=} 0. \quad (3)$$

Hierbei ist $g(x) = 0$ gerade die Euler-Lagrange-Gleichung. Somit erhalten wir also, wie oben behauptet, als Bedingung für die Extremalität von S die Euler-Lagrange-Gleichung.

3 Das Pfadintegral



Wenn wir nun das Pfadintegral herleiten möchten, sehen wir uns zunächst einmal die Übergangsamplitude $\langle x|U(t)|y \rangle$ an (hierbei ist $U(t) = U(t_1, t_0) = \exp[\frac{i}{\hbar}(t_1 - t_0)H]$ der Zeitentwicklungsoperator), da das Quadrat dieser Amplitude die Wahrscheinlichkeit dafür beschreibt, dass sich das Teilchen zum Zeitpunkt t_0 am Ort y und zum Zeitpunkt t_1 am Ort x befindet.

Man könnte nun also die Behauptung aufstellen, dass man die Übergangsamplitude erhält, indem man über jeden möglichen Pfad von y nach x integriert, also: $\langle x, t_1|y, t_0 \rangle = \int A[x(t)]\mathcal{D}[x(t)]$, wobei $A[x(t)]$ ein noch zu bestimmendes Funktional in Abhängigkeit der Funktion $x(t)$ ist und $\mathcal{D}[x(t)]$ ein noch unbekanntes Integrationsmaß.

3.1 freies Teilchen

Zunächst einmal betrachten wir das freie Teilchen, für das der Hamiltonoperator definiert ist als $H = H_0 = \frac{p^2}{2m}$.

Außerdem müssen wir uns an folgende Relationen erinnern:

- $\mathbf{1} = \int |p\rangle \langle p| dp$ (*) vollständige Eins
- $\langle p|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p\xi}$ (**) Eigenfunktion des Impulsoperators in Darstellung ebener Wellen

Wenn wir nun $t_0 = 0$ und $t_1 = t$ setzten, erhalten wir also mit dem Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ für die Übergangsamplitude:

$$\begin{aligned} \langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}|y\rangle &\stackrel{(*)}{=} \int \langle x|p\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} \langle p|y\rangle dp \\ &\stackrel{(**)}{=} \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{i}{\hbar}p(x-y)} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} dp \end{aligned}$$

Mit dem Gauß'schen Integral $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a}{2}x^2+bx} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}}$ und $a = \frac{it}{\hbar m}$ und $b = \frac{i}{\hbar}(x-y)$ erhalten wir also für die Übergangsamplitude des freien Teilchens:

$$\boxed{\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|y\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} e^{i\frac{m}{2\hbar t}(x-y)^2}. \quad (4)}$$

3.2 Teilchen in beliebigen nur vom Ort abhängenden Potential

Nun wollen wir uns die Übergangsamplitude für Teilchen mit Potential ansehen. Für diesen Fall hat der Hamiltonoperator im Allgemeinen für ein nur vom Ort abhängendes Potential die Form $H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = H_0 + V$. Mit diesem Hamiltonoperator lässt sich nun leider die Übergangsamplitude nicht mehr exakt berechnen, wir müssen also eine Näherung verwenden. Diese gilt für kleine Zeiten, so dass wir im Folgenden $t = \varepsilon$ setzten werden. Somit ergibt sich für unseren Zeitentwicklungsoperator $U(t)$

$$U(t) \rightarrow U_\varepsilon = e^{-\frac{i}{\hbar}H\varepsilon} = e^{-\lambda(H_0+V)}$$

wobei $\lambda = \frac{i\varepsilon}{\hbar}$ ist.

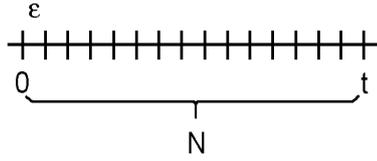
Nun können wir die Baker-Hausdorff-Formel für Operatoren in e-Funktionen anwenden:

$$e^{-\lambda(H_0+V)} = e^{-\lambda\frac{V}{2}} e^{-\lambda H_0} e^{-\lambda\frac{V}{2}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) =: W_\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

Der Vorteil dieser Darstellung liegt nun darin, dass wir die Übergangsamplitude von W_ε berechnen können:

$$\begin{aligned} \langle x|W_\varepsilon|y\rangle &= \langle x|e^{-\lambda\frac{V}{2}} e^{-\lambda H_0} e^{-\lambda\frac{V}{2}}|y\rangle \\ &= e^{-\frac{\lambda}{2}V(x)} \langle x|e^{-\lambda H_0}|y\rangle e^{-\frac{\lambda}{2}V(y)} \\ &\stackrel{4}{=} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}} \exp\left\{i\frac{m}{2\varepsilon\hbar}(x-y)^2 - i\frac{\varepsilon}{2\hbar}(V(x) + V(y))\right\} \quad (5) \end{aligned}$$

wobei im zweiten Schritt verwendet wurde, dass V diagonal ist, was gleichbedeutend ist mit $e^{-i\hat{V}}|x_j\rangle = |x_j\rangle e^{-iV(x_j)}$. Im letzten Schritt konnten wir mit Gleichung 4 die Übergangsamplitude für das freie Teilchen einfach einsetzen. Nun haben wir also das Ergebnis für kleine Zeiten ε .



Da man sich meist für größere Zeiten interessiert, möchten wir uns jetzt das ganze mal für die Zeit $t = N\varepsilon$ ansehen. Dies bedeutet, dass man das Zeitintervall t in N Stücke der Länge ε unterteilt (s. Abb.). Hierfür kann man also mit Hilfe der Funktionalgleichung der e-Funktion schreiben:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = \left(e^{-\frac{i}{\hbar}H\varepsilon}\right)^N = W_\varepsilon^N + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

Für den Limes $N \rightarrow \infty$ ergibt sich dann die Trotter-Produktformel:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = \lim_{N \rightarrow \infty} W_\varepsilon^N.$$

Nun können wir also die Übergangsamplitude für beliebige Zeiten berechnen. Dazu setzten wir zur Übersichtlichkeit $x_0 := y$ und $x_N := x$.

$$\begin{aligned} \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} | y \rangle &= \langle x | (e^{-\frac{i}{\hbar}H\varepsilon})^N | y \rangle \stackrel{(*)}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \langle x_j | W_\varepsilon | x_{j-1} \rangle dx_1 \dots dx_{N-1} \\ &\stackrel{5}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int e^{\frac{i}{\hbar}S_\varepsilon} dx_1 \dots dx_{N-1} \end{aligned} \quad (6)$$

mit dem Exponenten

$$\frac{i}{\hbar}S_\varepsilon = i \frac{m}{2\hbar\varepsilon} \sum_{j=1}^N (x_j - x_{j-1})^2 - i\varepsilon \sum_{j=1}^N \frac{V(x_j) + V(x_{j-1})}{2\hbar}$$

Hierbei wurden bei (*) $N-1$ vollständige Einsen eingeführt, außerdem wurde die Trotter-Produktformel eingesetzt. Der letzte Schritt ergibt sich, wenn man für alle Übergangsamplituden $\langle x_j | W_\varepsilon | x_{j-1} \rangle$ das Ergebnis nach Gleichung 5 einsetzt. Betrachtet man nun den Exponenten der e-Fkt. $\frac{i}{\hbar}S_\varepsilon$ genauer, kann man die Summe vorziehen und nach teilen durch $\frac{i}{\hbar}$ erhält man:

$$S_\varepsilon = \frac{\varepsilon}{2} \sum_{j=1}^N \left\{ m \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon} \right)^2 - (V(x_j) + V(x_{j-1})) \right\}$$

Wenn man nun den Kontinuumsliches $N \rightarrow \infty$ und somit $\varepsilon = \frac{t}{N} \rightarrow 0$ bildet und $x_j := x(t'_j)$ schreibt, geht die Summe mittels Riemann'scher Summe in ein Integral über und der Term $\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon}$ wird zum Differenzenquotienten. Also folgt:

$$S_\varepsilon = S[x] = \int_0^t \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x(t')) \right\} dt'.$$

Diesen Ausdruck kennen wir allerdings schon, denn der Integrand ist nichts anderes als die kinetische Energie minus der potentiellen Energie, also gerade die Lagrange-Funktion.

Hiermit erhalten wir also mit Gleichung 6 für die Übergangsamplitude

$$\boxed{\langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | y \rangle = \int e^{\frac{i}{\hbar} S} \mathcal{D}x} \quad (7)$$

wobei

$$S = S[x] = \int_0^t L(x, \dot{x}, t') dt'$$

$$\mathcal{D}x = \mathcal{D}[x(t)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} dx(t_1) \dots dx(t_{N-1})$$

und den Randbedingungen $x(0) = y, x(t) = x$.

Hierbei ist zu beachten, dass der Limes $N \rightarrow \infty$ immer erst nach Ausführung der Integration zu bilden ist.

Bemerkungen

- Die obige Darstellung der Übergangsamplitude (Gleichung 7) ist unabhängig von Operatoren, also haben wir das gesuchte Pfadintegral gefunden.
- Die Dimension des Integrals ist unendlich.
- Das Integral wird auch Funktionalintegral genannt, da über eine Menge von Funktionen integriert wird.
- Der Integrand enthält die klassische Wirkung für den jeweiligen Pfad, diese kennen wir schon.
- Im Gegensatz zur klassischen Mechanik tragen in der Quantenmechanik alle Wege zum Pfadintegral bei, in der klassischen Mechanik wird nur der Weg mit $\delta S = 0$ (*Extremalprinzip*) durchlaufen.

4 Beispiel: Der harmonische Oszillator

Kommen wir nun zu einem typischen Beispiel in der Physik, das wir auch hier verwenden wollen: der harmonische Oszillator. Zunächst benötigen wir aber noch ein Hilfsmittel aus der Funktionalanalysis, und zwar die Funktionalableitung.

4.1 Funktionalableitung

Da wir im Folgenden die Funktionalableitung $\frac{\delta S}{\delta x(s)}$ benötigen, müssen wir uns einmal die Definition der Funktionalableitung genauer ansehen:

$$\delta F[x] = \int ds \frac{\delta F}{\delta x(s)} \delta x(s).$$

Dies kann man sich in Analogie zur totalen Ableitung

$$df = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i$$

vorstellen. Wenn wir nun also $\frac{\delta S}{\delta x(s)}$ berechnen wollen, sehen wir uns noch einmal Gleichung 3 an. Hier entspricht die linke Seite gerade der Variation δS und $\eta(x)$ entspricht der Variation um den ursprünglichen Weg $\delta(x)$. Also erhalten wir für die Funktionalableitung von S die Euler-Lagrange-Gleichung:

$$\begin{aligned}\frac{\delta S}{\delta x(t)} &= -\frac{d}{dt} \frac{\partial L(x(t), \dot{x}(t))}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial L(x(t), \dot{x}(t))}{\partial x} \\ \frac{\delta S}{\delta x(t)} &= -m\ddot{x}(t) + \frac{d}{dx} V(x(t)) \stackrel{!}{=} 0.\end{aligned}\tag{8}$$

4.2 Berechnung

Jetzt können wir also versuchen, die Übergangsamplitude (Green'sche Funktion) des harmonischen Oszillators zu berechnen. Dazu benötigen wir zunächst die Lagrangefunktion des harmonischen Oszillators

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2.$$

Außerdem kennen wir schon die klassische Lösung der Bewegungsgleichung $x_{kl}(t)$ mit den Randbedingungen $x_{kl}(t_a) = x_a$ und $x_{kl}(t_b) = x_b$.

Wählen wir also wie bei der Variationsrechnung einen beliebigen Pfad $x(t) = x_{kl}(t) + y(t)$ mit den Randbedingungen $y(t_a) = y(t_b) = 0$.

Wenn wir die Übergangsamplitude berechnen wollen, benötigen wir nach Gleichung 7 die Wirkung $S[x]$. Diese wird dann zur Wirkung $S[x_{kl} + y]$, welche wir um den klassischen Pfad x_{kl} taylorentwickeln (sattelpunktentwickeln) können. Wir erhalten:

$$S[x] = S[x_{kl}] + \int_{t_a}^{t_b} dt \underbrace{\frac{\delta S[x_{kl}]}{\delta x(t)}}_{\stackrel{!}{=} 0} y(t) + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^{t_b} dt dt' \underbrace{\frac{\delta^2 S[x_{kl}]}{\delta x(t) \delta x(t')}}_{=?} y(t) y(t').$$

Da S eine quadratische Wirkung ist, endet die Entwicklung nach dem 3. Term. Berechnen wir die zweifache Funktionalableitung von S, wir erhalten:

$$\begin{aligned}\frac{\delta^2 S[x_{kl}]}{\delta x(t) \delta x(t')} &= \frac{\delta}{\delta x(t')} \frac{\delta S}{\delta x(t)} = \frac{\delta}{\delta x(t')} (-m\ddot{x}(t) - m\omega^2 x(t)) \\ &= -m \frac{d^2}{dt^2} \delta(t - t') - m\omega^2 \delta(t - t') \\ &= -m \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) \delta(t - t')\end{aligned}$$

Setzt man dies Ergebnis oben wieder ein, erhält man:

$$\begin{aligned}S[x] &= S[x_{kl}] - \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^{t_b} dt dt' \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) y(t) y(t') \delta(t - t') \\ &= S[x_{kl}] + \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\left(\frac{d}{dt} y(t) \right)^2 - \omega^2 y(t)^2 \right) \\ &=: S[x_{kl}] + S[y]\end{aligned}$$

Somit können wir nun also die Green'sche Funktion (Übergangsamplitude) des harmonischen Oszillators aufstellen:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) := \int e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \mathcal{D}[x] = e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{kl}]} \cdot \int_{\substack{y(t_a)=0 \\ y(t_b)=0}} e^{\frac{i}{\hbar} S[y]} \mathcal{D}y.$$

Hierbei wurde verwendet, dass $S[x_{kl}]$ nur noch vom Anfangs- und Endort abhängt und man die e-Fkt. deshalb aus dem Integral herausziehen kann. Das Pfadintegral ist unabhängig vom Anfangs- und Endort, da $y(t_a) = y(t_b) = 0$ gewählt wurde. Es hängt jedoch noch von der Zeitdifferenz $t_a - t_b := T$ ab. Da das Pfadintegral aber Invariant unter Zeittranslation ist, kann man im Folgenden auch die Zeitspanne $0 \rightarrow T$ betrachten.

Betrachten wir zunächst also die klassische Lösung x_{kl} . Hierfür wurde meist der Ansatz $x_{kl} = A \sin \omega t + B \cos \omega t$ verwendet. Mit Hilfe der Anfangsbedingungen $x_{kl}(t_a) = x_a$ und $x_{kl}(t_b) = x_b$ kann man nun die Koeffizienten A und B berechnen und erhält:

$$x_{kl}(t) = \frac{1}{\sin \omega T} [(x_b \cos \omega t_a - x_a \cos \omega t_b) \sin \omega t + (x_a \sin \omega t_b - x_b \sin \omega t_a) \cos \omega t]$$

Dies wiederum können wir in die Lagrangegleichung (siehe Gleichung 1) einsetzen und das Wirkungsintegral gemäß Gleichung 2 berechnen. Wir erhalten also für die klassische Wirkung:

$$S[x_{kl}] = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2x_a x_b].$$

Nun müssen wir also noch den Fluktuationsterm $F(T) := \int e^{\frac{i}{\hbar} S[y]} \mathcal{D}y$ berechnen. Dazu sehen wir uns die Wirkung $S[y]$ an, die wir definiert hatten als

$$\begin{aligned} S[y] &:= \frac{m}{2} \int_0^T (\dot{y}^2 - \omega y^2) dt \\ &\stackrel{\text{part. Int.}}{=} \frac{m}{2} \int_0^T y(t) \left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2 \right) y(t) dt \end{aligned}$$

Durch die partielle Integration haben wir den Operator $(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2)$ erhalten. Um das Integral lösen zu können, überlegen wir uns zunächst, welche Wirkung dieser Operator auf die Funktion $y(t)$ hat. Dabei können wir uns an das Teilchen im Potentialtopf der Breite T mit unendlich hohen Wänden erinnern. Hier haben die Eigenfunktionen die gleichen Randbedingungen wie unsere Funktion y , denn sie verschwinden beide am Rand. Für das Teilchen im Topf hatten wir die Eigenfunktionen

$$y_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \frac{n\pi t}{T}, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

bereits berechnet. Diese bilden ein vollständiges Orthonormalsystem, wie sich leicht überprüfen lässt. Wir können jetzt auch die Funktion y mit Hilfe der y_n darstellen, nämlich:

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

Außerdem können wir die Eigenwerte unseres Operators bezogen auf die Funktionen $y_n(t)$ berechnen:

$$\left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2\right) y_n(t) = \underbrace{\left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2\right)}_{=: \lambda_n} y_n(t).$$

Hiermit können wir jetzt also für $S[y]$ schreiben:

$$\begin{aligned} S[y] &= \frac{m}{2} \int_0^T y(t) \left(-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2\right) y(t) dt \\ &= \frac{m}{2} \int_0^T \left(\sum_{m=1}^{\infty} a_m y_m\right) \left(\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n y_n\right) dt \\ &= \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 \lambda_n. \end{aligned} \quad (9)$$

Hierbei wurde die Orthonormalität der y_n verwendet.

Um den Fluktuationsterm zu berechnen, stellt sich nun die Frage nach dem $\mathcal{D}y$. Dies geht nun also über in $\mathcal{D}y = J \prod_{n=1}^{\infty} da_n$, wobei J ein unbestimmter Normierungsfaktor ist. Damit erhalten wir für $F(T)$:

$$\begin{aligned} F(T) &= \int e^{\frac{i}{\hbar} S[y]} \mathcal{D}y \stackrel{9}{=} J \int \prod_{n=1}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \sum_n \lambda_n a_n^2} da_n \\ &= J \prod_{n=1}^{\infty} \int e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \lambda_n a_n^2} da_n \\ &= J \prod_{n=1}^{\infty} \left(\frac{m\hbar}{2\pi i} \lambda_n\right)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Bleibt also J zu bestimmen und da wir dies nicht berechnen wollen, greifen wir zu einem kleinen Trick: Wir sehen uns an, was passiert, wenn wir den Limes $\omega \rightarrow 0$ betrachten. Dann erhalten wir nämlich das freie Teilchen, dessen Amplitude $F(T)|_{\omega=0} = F_0(T) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{\frac{1}{2}}$ wir schon kennen (siehe Gl. 4). Die dazugehörigen Eigenwerte ergeben sich dann zu $\lambda_n^{(0)} = \frac{n^2\pi^2}{T^2}$.

Wenn wir nun also das Verhältnis $F(T)/F_0(T)$ berechnen, erhalten wir:

$$\frac{F(T)}{F(T)|_{\omega=0}} = \prod_{n=1}^{\infty} \left[\frac{\lambda_n}{\lambda_n^{(0)}}\right]^{-\frac{1}{2}} = \prod_{n=1}^{\infty} \left[1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2}\right]^{-\frac{1}{2}} = \left[\frac{\sin \omega T}{\omega T}\right]^{-\frac{1}{2}}.$$

Also folgt für den Fluktuationsterm $F(T)$:

$$\frac{F(T)}{F_0(T)} \cdot F_0(T) = \left(\frac{\sin \omega T}{\omega T}\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Jetzt können wir also die Green'sche Funktion für den harmonischen Oszillator, die sog. Mehlerformel hinschreiben:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2x_a x_b] \right\}$$

Mit Hilfe dieser Formel lassen sich die interessanten Größen des harmonischen Oszillators berechnen. Wir möchten uns dies am Beispiel der Energieeigenwerte einmal ansehen.

Da $Sp(e^{-\frac{i}{\hbar}HT}) := \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}HT} | x \rangle$ folgt im Ortsraum:

$$\begin{aligned}
 Sp(e^{-\frac{i}{\hbar}HT}) &= \int_{-\infty}^{\infty} G(x, T; x, 0) dx \\
 &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \frac{m\omega}{\sin \omega T} (2(\cos \omega T - 1)x^2) \right\} dx \\
 &= \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2\pi \hbar \sin \omega T}{2im\omega(1 - \cos \omega T)} \right)^{\frac{1}{2}} \\
 &= \left(\frac{1}{2i^2(1 - \cos \omega T)} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2i \sin \frac{\omega T}{2}} \\
 &= \frac{e^{-i\frac{\omega T}{2}}}{1 - e^{-i\omega T}} \stackrel{\text{geom. Reihe}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})T}.
 \end{aligned}$$

Wobei zunächst in die Mehlersche Formel eingesetzt wurde und später ein Additionstheorem, sowie die Exponentialdarstellung der Sinusfunktion benutzt wurde.

Da nun aufgrund der Wahl einer Orthonormalbasis bei der Spurbildung

$$Sp(e^{-\frac{i}{\hbar}HT}) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n T}$$

gilt, folgt durch Vergleich

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Mit weiteren Berechnungen kann man aus der Mehlerschen Formel auch die Wellenfunktion des harmonischen Oszillators berechnen, dies soll hier aber nicht gezeigt werden.

5 Vor- und Nachteile des Pfadintegrals

Die Darstellung im Pfadintegralformalismus hat neben vielen guten Seiten allerdings auch einige Schwächen. Wir wollen uns dies einmal genauer ansehen.

- | | |
|-----------|---|
| Nachteile | <ul style="list-style-type: none"> * Das Integrationsmaß für das Funktionalintegral ist nicht richtig definiert, da nicht über ein Kompaktum integriert wird, denn es handelt sich um ein unendlichdimensionales Integral. * Man erhält ein Problem, da e^{iS} oszilliert und so das Integral nicht konvergieren muss. |
| Vorteile | <ul style="list-style-type: none"> * Das Pfadintegral ist relativistisch invariant. * Es bietet ein sehr anschauliches Verfahren ohne Operatoren. * Es gibt eine sehr übersichtliche Herleitung der Feynmanregeln mit Hilfe der Pfadintegrale. |

Für die Nachteile gibt es natürlich entsprechende Verfahren, um sie zu beheben. So verwendet man z.B. eine Rotation ins Euklidische. Hierbei verwendet man eine Pseudozeit $\tau = it$, wodurch man e^{-S_E} erhält, wobei S_E die euklidische Wirkung ist. Dies ist allerdings exponentiell gedämpften und obiges Integral konvergiert.

6 Verwendung des Pfadintegrals

Das Pfadintegral wird in vielen Bereichen oft genutzt, hier einige Beispiele:

1. Berechnung von Teilchenbahnen in Gegenwart von magn. Flußröhren (Aharanov-Bohm-Effekt)
2. Berechnung von Teilchenmassen (z.B. Mesonen) durch eukl. Feynmansches zeitgittertes Pfadintegral (nichtstörungstheoretische Methoden)
3. Berechnung von Tunnelphänomenen
4. Berechnung von theormodynamischen Zustandssummen
5. Chemie: Pfadintegralbeschreibung von Polymeren

7 Literaturliste

- G. Münster** *Quantentheorie*, de Gryter, 2006
- L. S. Schulman** *Techniques and Applications of Path Integration*, John Wiley & Sons, 1981
- R. P. Feynman, A. R. Hibbs** *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, 1965
- H. Kleinert** *Pfadintegrale in Quantenmechanik, Statistik und Polymerphysik*, B.I.-Wissenschaftsverlag, 1993
- E. F. Taylor** *Teaching Feynman's sum-over-path quantum theory*, American Institute of Physics; Computers in Physics, Vol. 12, No.2, Mar/Apr 1998
- G. Pfanner** *Das Pfadintegral!*, <http://theory.gsi.de/vanhees/faq-pdf/Pfadintegrale.pdf>