Fortsetzung ins Euklidische und Erzeugende Funktionale

Seminar über Teilchen- und Kerntheorie
bei: M. Stingl, A. Weiguny, Ch. Wieczerkowski

Thomas Schulze-Trautmann, 10.05.00, Münster

1 Einführung

Da Erwartungswerte bei quantenmechanischen bzw. feldtheoretischen Betrachtungen eine wichtige Rolle spielen, soll versucht werden, eine geeignete Formulierung im Pfadintegral-Formalismus zu finden. Hierbei stößt man auf das Problem des nicht notwendig konvergierenden Integranden im Feynman-Kern. Ein mathematischer Trick hilft, das Integral auf ein konvergierendes Gauß-Integral zu bringen. Dadurch kann der Formalismus der erzeugenden Funktionen auch auf die Pfadintegrale angewendet werden.

2 Fortsetzung ins Euklidische

2.1 Das Pfadintegral

Der grundlegende Ansatz zum Aufstellen der Wellenfunktion im Heisenbergbild zur Zeit t_f am Ort x_f

$$\psi(x_f, t_f) = \langle x_f, t_f | \psi \rangle_H \tag{1}$$

ist in der Theorie der Pfadintegrale die Integration über den Feynman-Kern bei gegebener Wellenfunktion zur Zeit t_i am Ort x_i:

$$\psi(x_f, t_f) = \int dx \, \langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle_H \langle x_i, t_i | \psi \rangle_H \tag{2}$$

wobei der Feynman-Kern (oder Propagator) aus dem mit $\mathcal{N}$ normierten Pfadintegral im Ortsraum über das Wirkungsfunktional $S[x]$

$$\langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle_H = \mathcal{N} \int \mathcal{D}x \; e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \tag{3}$$

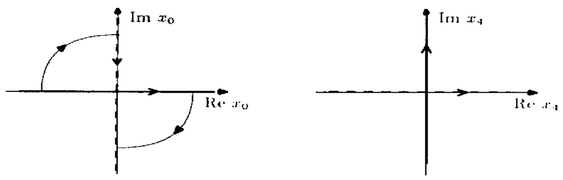

Abbildung 1: Rotation der Zeitachse in der Komplexen Ebene um $\delta = \frac{\pi}{2}$

berechnet wird. Das Problem, welches bei diesem Pfadintegral im Minkowski-Raum auftaucht, ist der imaginäre Exponent der e-Funktion, welcher einen oszillierenden Integranden verursacht und so keine Konvergenz mehr garantiert. Über eine analytische Fortsetzung in den Euklidischen Raum mit Hilfe der Wick-Rotation kann dieses Problem behoben werden.

2.2 Die Wick-Rotation

Ziel ist es, in der oszillierenden Exponentialfunktion einen Dämpfungsterm zu erzeugen. Hierfür wird die reelle Zeitkomponente x_0 des Vektors

$$\begin{aligned} x = x_\mu &= (x_0, x_1, x_2, x_3) \\ &= (x_0, \vec{x}) \end{aligned} \tag{4}$$

in der komplexen Ebene betrachtet, wo die Zeitintegration entlang der reellen Achse $x_0 \equiv \Re(x_0)$ verläuft. Dreht man nun die reelle Zeitachse in der komplexen Ebene um den Winkel δ entsprechend der Vorschrift

$$t = e^{-i\delta}\tau \tag{5}$$

wobei τ eine reelle Zeit sein soll, so erhält man eine neue komplexe Zeitvariable $t \neq \Re(t)$. Hat man bei dieser Rotation keine Singularitäten in der komplexen Ebene überstrichen, so ist dies eine erlaubte analytische Fortsetzung, und das Ergebnis ist unabhängig von der Drehung δ. Es zeigt sich, daß eine Drehung in mathematisch negative Richtung mit $\delta \leq \frac{\pi}{2}$ erlaubt ist (daher das negative Vorzeichen in Gleichung (5)).

Im Folgenden soll eine Rotation um $\frac{\pi}{2}$ betrachtet werden, so daß

$$\begin{aligned} x_0 &= e^{-i\frac{\pi}{2}} x_4 \\ &= -i x_4 \qquad \text{mit } x_4 \text{ reell} \end{aligned} \tag{6}$$

Dies bewirkt, daß $x_0 \equiv \Im(x_0)$ nun rein imaginär geworden ist (siehe Abbildung 1). Definiert man nun analog zu (4) einen neuen vierdimensionalen Vektor

$$\begin{aligned} x_{E\mu} &= (x_1, x_2, x_3, x_4) \\ &= (\vec{x}, x_4) \end{aligned} \tag{7}$$

so folgt

$$\begin{aligned}\vec{x}^2 - x_0^2 &= \vec{x}^2 - (-i)^2 x_4^2 \\ &= \vec{x}^2 + x_4^2 \\ &= x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 \\ &= x_{E\mu}^2 \qquad (8)\end{aligned}$$

Die Wick-Rotation um $\delta = \frac{\pi}{2}$ hat also durch den Faktor i gerade den Vorzeichenunterschied in der Metrik des Minkowski-Raumes aufgehoben, und die Vektoren $x_{E\mu}$ bilden einen vierdimensionalen Euklidischen Raum (Index E). Daher spricht man bei der Wick-Rotation auch von der Fortsetzung ins Euklidische.

Was ist nun durch diese analytische Fortsetzung der Zeitkomponente erreicht worden in Bezug auf das Konvergenzproblem? Integriert man in Gleichung (3) entlang der reellen x_4 Achse, so verwandelt der Faktor $-i$ aus (6) zusammen mit dem Faktor i aus (3) wegen $i(-i) = 1$ bei auftreten eines negativen Exponenten die oszillierende e-Funktion in einen abklingenden Integranden um. Das Ergebnis ist eine "euklidische Übergangsamplitude", welche durch analytisches Fortsetzen zur Minkowski-Zeitkoordinate mit $x_4 = ix_0$ das Ergebnis in der physikalisch realisierten Raum-Zeit ergibt.

2.3 Beispiel

Als Beispiel soll das Pfadintegral betrachtet werden, welches aus der Rechnung zum harmonischen Oszillator bekannt ist:

$$\langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\eta \; e^{-\frac{im}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \; \eta(t)(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2)\eta(t)} \qquad (9)$$

Analytische Fortsetzung zu komplexen Zeiten $t \rightarrow -i\tau$ ergibt

$$\langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle \rightarrow \mathcal{N}_E \int \mathcal{D}\eta \; e^{-\frac{m}{2\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau \; \eta(\tau)(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2)\eta(\tau)} \qquad (10)$$

so daß das Integral nun konvergiert. Das Ergebnis müßte dann mit $\tau \rightarrow it$ wieder zurück zu reellen Zeiten analytisch fortgesetzt werden.

Betrachtet man das Integral in Gleichung (10) so erkennt man, daß es im wesentlichen die Form eines Gauß-Integrals

$$I = \int dx \; e^{-\frac{x^2}{2}} \qquad (11)$$

hat. Diese Struktur soll im Folgenden genutzt werden, um auf relativ einfache Weise Erwartungswerte zu berechnen.

3 Einschub aus der Statistik

3.1 Momente

Sei x eine Zufallsvariable mit dem Wert x_i und der Wahrscheinlichkeit p_i im Zustand i. Dann ist das k-te Moment definiert als

$$\begin{aligned} M_k &:= \langle x^k \rangle \\ &= \sum_i p_i x_i^k \end{aligned} \tag{12}$$

Die erzeugende Funktion der Momente ist definiert als

$$\begin{aligned} F(J) &:= \langle e^{Jx} \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J^n}{n!} \langle x^n \rangle \\ &\overset{(12)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J^n}{n!} M_n \end{aligned} \tag{13}$$

Mit diesen beiden Definitionen ist es möglich, das k-te Moment durch k-maliges Ableiten der erzeugenden Funktion zu erzeugen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^k}{\partial J^k} F(J) &= \sum_{n=0}^{\infty} M_n \frac{1}{n!} \frac{\partial^k J^n}{\partial J^k} \\ &= \sum_{n=k}^{\infty} M_n \frac{1}{n!} \frac{\partial^k J^n}{\partial J^k} \\ &= \sum_{n=k}^{\infty} M_n \frac{1}{n!} \underbrace{n \cdot (n-1) \cdots (n-k+1)}_{=n! \text{ für } n=k} \underbrace{J^{n-k}}_{\substack{=1 \\ \text{für } n=k}} \\ &= M_k + \sum_{n=k+1}^{\infty} M_n \frac{1}{n!} n \cdot (n-1) \cdots (n-k+1) J^{n-k} \end{aligned} \tag{14}$$

so daß man auch schreiben kann

$$M_k = \left(\frac{\partial^k}{\partial J^k} F(J) \right)_{J=0} \tag{15}$$

Die Menge aller Momente charakterisiert die Zustandsvariable x. Um bei unabhängigen Systemen Additivität extensiver Größen zu erreichen ist es jedoch sinnvoll die Kumulanten einzuführen.

3.2 Kumulanten

Die erzeugende Funktion der Kumulanten ist definiert als

$$
\begin{aligned}
G(J) &:= \ln F(J) \\
&= \ln\langle e^{Jx}\rangle \\
&= \ln \sum_i p_i e^{Jx_i} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{J^n}{n!}\Gamma_n \qquad \text{mit entsprechenden } \Gamma_n
\end{aligned} \tag{16}
$$

Analog zu den Momenten werden die Koeffizienten Γ_n die Kumulanten genannt. Aus der vorherigen Betrachtung folgt, daß auch sie durch Ableiten erzeugt werden können mit

$$
\Gamma_k = \left(\frac{\partial^k}{\partial J^k} G(J)\right)_{J=0} \tag{17}
$$

Es soll nun gezeigt werden, daß sich die über den Logarithmus definierten Kumulanten für zwei unabhängige Systeme A und B, deren Zustände mit i und j indiziert sind ($p_{ij} = p_i^A p_j^B$ für $x_{ij} = x_i^A + x_j^B$) additiv verhalten:

$$
\begin{aligned}
G(J) &= \ln \sum_{i,j} p_{ij} e^{Jx_{ij}} \\
&= \ln \sum_{i,j} p_i^A p_j^B e^{J\left(x_i^A + x_j^B\right)} \\
&= \ln \sum_i p_i^A e^{J\left(x_i^A\right)} + \ln \sum_j p_j^B e^{J\left(x_j^B\right)} \\
&= G^A(J) + G^B(J)
\end{aligned} \tag{18}
$$

$$
\Rightarrow \Gamma_k = \Gamma_k^A + \Gamma_k^B \tag{19}
$$

Aus (17) ergibt sich sofort:

$$
\Gamma_0 = 0 \tag{20}
$$

$$
\Gamma_1 = \langle x\rangle \qquad \text{Erwartungswert} \tag{21}
$$

$$
\Gamma_2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 \qquad \text{Varianz} \tag{22}
$$

4 Erzeugende Funktionale und Pfadintegrale

Nach der vorangegangenen Diskussion liegt es nahe, aus Pfadintegralen der Form (11) analog zu einem Erwartungswert

$$
\langle x\rangle = N \int dx\ x e^{-x^2/2} \tag{23}
$$

eine Gleichung für einen quantenmechanischen Erwartungswert zu suchen

4.1 Erwartungswerte zeitgeordneter Produkte

Im Folgenden soll der Index H des Heisenbergbildes nicht mehr extra angeführt werden. Als Beispiel wird der Erwartungswert des Produktes zweier Operatoren $X(t_1)$ und $X(t_2)$ mit $t_i \leq t_2 < t_1 \leq t_f$ betrachtet:

$$\begin{aligned}
&\langle x_f, t_f | X(t_1) X(t_2) | x_i, t_i \rangle \\
&= \int dx_1\ dx_2\ \langle x_f, t_f | X(t_1) | x_1, t_1 \rangle \langle x_1, t_1 | X(t_2) | x_2, t_2 \rangle \langle x_2, t_2 | x_i, t_i \rangle \\
&= \int dx_1\ dx_2\ x_1 x_2 \langle x_f, t_f | x_1, t_1 \rangle \langle x_1, t_1 | x_2, t_2 \rangle \langle x_2, t_2 | x_i, t_i \rangle \\
&= \mathcal{N} \int \mathcal{D}x\ x(t_1) x(t_2) e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \qquad \text{mit } x(1) \equiv x_1 \text{ und } x(2) \equiv x_2
\end{aligned} \tag{24}$$

Analog sieht man daß für $t_2 > t_1$

$$\langle x_f, t_f | X(t_2) X(t_1) | x_i, t_i \rangle = \mathcal{N} \int \mathcal{D}x\ x(t_1) x(t_2) e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \tag{25}$$

da $x(t_1)$ und $x(t_2)$ klassische Variablen und daher kommutativ sind. Man kann also verallgemeinern, daß sich für zeitgeordnete Produkte ergibt

$$\langle x_f, t_f | T\left(X(t_1) \cdots X(t_n) \right) | x_i, t_i \rangle = \mathcal{N} \int \mathcal{D}x\ x(t_1) \cdots x(t_n) e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \tag{26}$$

Wegen

$$\begin{aligned}
\langle \psi_f | \psi_i \rangle &= \int dx_f dx_i \langle \psi_f | x_f, t_f \rangle \langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle \langle x_i, t_i | \psi_i \rangle \\
&= \mathcal{N} \int dx_f\ dx_i\ \psi_f^*(x_f, t_f) \psi_i(x_i, t_i) \int \mathcal{D}x\ e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}
\end{aligned} \tag{27}$$

kann auch für Übergänge zwischen zwei Zuständen geschrieben werden

$$\begin{aligned}
&\langle \psi_f | T\left(X(t_1) \cdots X(t_n) \right) | \psi_i \rangle \\
&= \mathcal{N} \int dx_f\ dx_i\ \psi_f^*(x_f, t_f) \psi_i(x_i, t_i) \int \mathcal{D}x\ x(t_1) \cdots x(t_n) e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}
\end{aligned} \tag{28}$$

Für den Erwartungswert des zeitgeordneten Produktes ergibt sich also

$$\begin{aligned}
&\langle \psi_i | T\left(X(t_1) \cdots X(t_n) \right) | \psi_i \rangle \\
&= \mathcal{N} \int dx_f\ dx_i\ \psi_i^*(x_f, t_f) \psi_i(x_i, t_i) \int \mathcal{D}x\ x(t_1) \cdots x(t_n) e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}
\end{aligned} \tag{29}$$

und nach Normierung mit (27)

$$\langle T\left(X(t_1) \cdots X(t_n) \right) \rangle = \frac{\int dx_f\ dx_i\ \psi_i^*(x_f, t_f) \psi_i(x_i, t_i) \int \mathcal{D}x\ x(t_1) \cdots x(t_n) e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}}{\int dx_f\ dx_i\ \psi_i^*(x_f, t_f) \psi_i(x_i, t_i) \int \mathcal{D}x\ e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}} \tag{30}$$

Da der Normierungsfaktor $\mathcal{N}$ herausgekürzt werden konnte sind die Erwartungswerte also ohne Kenntnis des Normierungsfaktors berechenbar.

4.2 Das modifizierte Wirkungsfunktional

Betrachtet man den Erwartungswert (23), so liegt es nahe, durch

$$\left(\frac{d}{dJ}\, N \int dx\ e^{-x^2/2+Jx}\right)_{J=0} = \left(N \int dx\ x e^{-x^2/2+Jx}\right)_{J=0} = \langle x \rangle \tag{31}$$

ein erzeugendes Funktional zu definieren. Daher soll nun das Wirkungsfunktional $S[x] = S[x(t)]$ mit einer Quelle $J(t)$ versehen werden. Es ist dann zu zeigen, daß sich daraus ein erzeugendes Funktional im Sinne von Abschnitt 3 für Erwartungswerte der Form (30) ergibt.

Das modifizierte Wirkungsfunktional wird definiert als

$$S[x,J] = S[x] + \int_{t_i}^{t_f} dt\ x(t)J(t) \tag{32}$$

Weiter wird definiert

$$\langle\psi_i|\psi_i\rangle_J = \mathcal{N} \int dx_f\ dx_i\ \psi_i^*(x_f,t_f)\psi_i(x_i,t_i) \int \mathcal{D}x\ e^{\frac{i}{\hbar}S[x,J]} \tag{33}$$

so daß bei Ausschalten der Quelle

$$\begin{aligned} S[x,0] &= S[x] \qquad \text{und} &(34)\\ \langle\psi_i|\psi_i\rangle_{J=0} &= \langle\psi_i|\psi_i\rangle &(35)\end{aligned}$$

Berechnet man nun in (33) die Funktionalableitung nach der Quelle, so erhält man

$$\begin{aligned}\frac{\delta\langle\psi_i|\psi_i\rangle_J}{\delta J(t_1)} &= \mathcal{N} \int dx_f\ dx_i\ \psi_i^*(x_f,t_f)\psi_i(x_i,t_i) \int \mathcal{D}x\ \frac{i}{\hbar}\frac{\delta S[x,J]}{\delta J(t_1)} e^{\frac{i}{\hbar}S[x,J]}\\ &= \mathcal{N} \int dx_f\ dx_i\ \psi_i^*(x_f,t_f)\psi_i(x_i,t_i) \int \mathcal{D}x\ \frac{i}{\hbar} x(t_1) e^{\frac{i}{\hbar}S[x,J]} \qquad (36)\end{aligned}$$

Mit (29) folgt

$$\left(\frac{\delta\langle\psi_i|\psi_i\rangle_J}{\delta J(t_1)}\right)_{J=0} = \frac{i}{\hbar}\langle\psi_i|X(t_1)|\psi_i\rangle \tag{37}$$

Analog zu den Überlegungen zu (26) kann man das Ergebnis auch hier auf zeitgeordnete Produkte erweitern:

$$\left(\frac{\delta^n\langle\psi_i|\psi_i\rangle_J}{\delta J(t_1)\cdots\delta J(t_n)}\right)_{J=0} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \langle\psi_i|T\left(X(t_1)\cdots X(t_n)\right)|\psi_i\rangle \tag{38}$$

und nach Normierung

$$\langle T\left(X(t_1)\cdots X(t_n)\right)\rangle = \left(\frac{(-i\hbar)^n}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle_J}\frac{\delta^n\langle\psi_i|\psi_i\rangle_J}{\delta J(t_1)\cdots\delta J(t_n)}\right)_{J=0} \tag{39}$$

Mit der Definition

$$\begin{aligned} Z[J(t)] &:= \langle\psi_i|\psi_i\rangle_J \\ &= \mathcal{N}\int dx_f\, dx_i\, \psi_i^*(x_f,t_f)\psi_i(x_i,t_i)\int \mathcal{D}x\; e^{\frac{i}{\hbar}S[x,J]} \end{aligned} \tag{40}$$

und

$$\langle T\left(X(t_1)\cdots X(t_n)\right)\rangle = \left(\frac{(-i\hbar)^n}{Z[J]}\frac{\delta^n Z[J]}{\delta J(t_1)\cdots\delta J(t_n)}\right)_{J=0} \tag{41}$$

ist somit ein erzeugendes Funktional für quantenmechanische Erwartungswerte gefunden worden, welches nur noch von klassischen Größen abhängt.

5 Zusammenfassung

Die im Pfadintegral-Formalismus auftretenden Integral haben die Form eines komplexen Gauß-Integrales. Aufgrund ihres oszillierenden Integranden ist eine Konvergenz nicht immer garantiert. Mit Hilfe der Wick-Rotation können die Integrale aus dem Minkowski-Raum in den euklidischen Raum analytisch fortgesetzt werden. Hier nehmen sie die Form eines gewöhnlichen Gauß-Integrals an und konvergieren. Die Gauß-Integrale erinnern an die Berechnung von statistischen Erwartungswerten, und es gelingt, über das Einführen einer zusätzlichen Quelle im Wirkungsfunktional ein erzeugendes Funktional für die Erwartungswerte zeitgeordneter Produkte von quantenmechanischen Operatoren aufzustellen. Für die Anwendung dieser erzeugenden Funktionale müssen nur noch klassische Größen betrachtet werden.

Literatur

[1] Beck, C. und Schlögl, F., **Thermodynamics of Chaotic Systems**, Cambridge University Press, 1993

[2] DAS, A., **Field Theory**, World Scientific, 1993

[3] Greiner, R., **Feldquantisierung**, Theor. Physik Bd. 7A, Verlag Harri Deutsch