Das Pfadintegral in der Quantenmechanik

Henning Jürgens
hjuergen@uni-muenster.de

19. November 2002

Inhaltsverzeichnis

1 Vorwort

Gegenstand dieser Ausarbeitung ist das *Feynmansche Pfadintegral* in seiner Form, wie es im wesentlichen von Richard Feynman um das Jahr 1948 nach wesentlicher Vorarbeit von Dirac ausgearbeitet wurde. Der Pfadintegralformalismus hat seitdem in unterschiedlichsten Bereichen der Elementarteilchenphysik eine herausragende Bedeutung gewonnen. So auch für die Gitterformulierung der Quantenfeldtheorie, das übergeordnete Thema des physikalischen Seminars in dessen Rahmen diese Ausarbeitung entstanden ist, und auf welche die nachstehende Formulierung auch zielt.
Im folgen werden natürliche Einheiten zu Grunde gelegt, es gilt also $c \equiv \hbar \equiv 1$.

2 Der Zeitentwicklungsoperator

Einleitent möchte ich hier einige grundlegende Ergebnisse der Quantenmechnik zusammen fassen.
Für den Fall eines nicht explit von der Zeit abhängigen Hamiltonoperators $\hat{H}$ läßt sich aus einer Lösung der Schrödingergleichung $\hat{H}\,|\psi(t)\rangle = i\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle$ zu einem Zeitpunkt t_a die entsprechende Lösung zu einem beliebigen späteren Zeitpunkt t_b in folgender Form entwickeln:

$$|\psi(t_b)\rangle = \hat{U}(t_b, t_a)\;\; |\psi(t_a)\rangle\,. \tag{1}$$

Dabei ist der unitäre Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}$ durch

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \exp\left(-i(t_b - t_a)\hat{H}\right) \tag{2}$$

gegeben. Im allgemeinen Fall eines zeitabhängigen Hamiltonoperators ergibt sich dieser mit Hilfe des Zeitordnungsoperators $\hat{T}$ zu

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{T}\;\exp\left(-i\int_{t_a}^{t_b} \hat{T}(t)\;dt\right). \tag{3}$$

Aus (1) läßt sich noch unmittelbar ablesen, daß sich für beliebige Zeitpunkte t_c aus dem Intervall $[t_a, t_b]$ auch

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{U}(t_b, t_c)\hat{U}(t_c, t_a) \tag{4}$$

schreiben läßt.
Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Übergang zwischen zwei lokalisierten quantenmechanischen Zuständen -im folgenden verkürzt geschrieben- lassen sich mit Hilfe des zugehörigen Zeitentwicklungsoperators als die Matrixelemente

$$P(a, b) = \langle x_a|\,\hat{U}(t_a, t_b)\,|x_b\rangle \tag{5}$$

ausdrücken. Im weiteren wird eben dieser Ausdruck in eine neue Form, eben in die Pfadintegraldartellung, entwickelt.

3 Pfadintegraldarstellung von $P(a, b)$

Ausgehend von einer zeitlichen Gitterung des Intervalls $[t_a, t_b]$ in insgesamt N+1 äquidistante Zeitpunkte t_i, deren jeweiliger Abstand $\epsilon := t_n - t_{n-1} = (t_b - t_a)/(N + 1)$ beträgt, läßt sich der Zeitentwicklungsoperator aufgrund der Eigenschaft (4) als Produkt von N+1 Faktoren schreiben. Mit der vereinfachenden Umbezeichnung von $t_a \to t_1$ und $t_b \to t_{N+1}$ ergibt sich damit die Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude zu

$$\langle x_b|\,\hat{U}(t_N, t_{N-1}) \cdot ... \cdot \hat{U}(t_2, t_1)\,|x_a\rangle\,. \tag{6}$$

Durch das Einfügen von insgesamt N vollständigen Zustandssätzen der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_N\,|x_n\rangle\,\langle x_n| = 1 \quad \text{für n = 1, ... ,N} \tag{7}$$

zwischen den einzelnen Operatoren ergibt sich weiter

$$\int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 ... dx_n \prod_{n=1}^{N+1} \langle x_n | \hat{U}(t_n, t_{n-1}) | x_{n-1} \rangle \,. \tag{8}$$

Für die Fälle, in denen sich der Hamiltonoperator als Summe eines rein ortsabhängien potentiellen und eines nur geschwindigkeitsabhängigen kinetischen Anteils $\hat{H} = \hat{T}(\underline{p}) + \hat{V}(\underline{q})$ darstellen kann, läßt sich für den n'te Faktor aus (8)

$$\begin{aligned} \langle x_n | \hat{U}(t_n, t_{n-1}) | x_{n-1} \rangle &= \langle x_n | \exp \left\{ -i\epsilon \left(\hat{T} + \hat{V} \right)_{t_n} \right\} | x_{n-1} \rangle \\ &\overset{!}{=} \langle x_n | \left(\exp(-i\epsilon\hat{T}) \cdot \exp(-i\epsilon\hat{T}) + O(\epsilon^2) \right) | x_{n-1} \rangle \end{aligned} \tag{9}$$

schreiben, wie ein Vergleich der Taylorentwicklungen der Exponentialfuntionen auf linker, bzw. rechter Seite bei Ordnung nach Potenzen von ϵ beweist:

$$\begin{aligned} \exp\left(-i\epsilon(\hat{T} + \hat{V}) \right) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-i\epsilon(\hat{T} + \hat{V}) \right)^n}{n!} \\ &= 1 - i\epsilon(\hat{T} + \hat{V}) - \frac{\epsilon^2}{2} \cdot \left(\hat{T}^2 + \hat{V}^2 + \hat{T}\hat{V} + \hat{V}\hat{T} \right) + ... \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \exp(-i\epsilon\hat{T}) \cdot \exp(-i\epsilon\hat{V}) &= \left(1 - i\epsilon\hat{T} - \frac{\epsilon^2}{2} \cdot \hat{T}^2 + ... \right) \cdot \left(1 - i\epsilon\hat{V} - \frac{\epsilon^2}{2} \cdot \hat{V}^2 + ... \right) \\ &= 1 - i\epsilon(\hat{T} + \hat{V}) - \epsilon^2 \cdot \left(\frac{\hat{T}^2}{2} + \frac{\hat{V}^2}{2} + \hat{T}\hat{V} + ... \right) \\ &= \exp\left(-i\epsilon(\hat{T} + \hat{V}) \right) \;+\; \frac{\epsilon^2}{2} \cdot \left[\hat{V}, \hat{T} \right] \;+\; O(\epsilon^3) \end{aligned}$$

Die Korrekturterme in (9) von der Ordnung ϵ^2 und höher können im Grenzfall einer infinitesimal feinen Zeitgitterung, dem sogenannten Kontinuumslimes, natürlich vernachlässigt werden, weil $N \to \infty$ gleichzeitig $\epsilon \to 0$ bedeutet. Das Einsetzen in den Ausdruck für $P(a, b)$ in (8) bedarf aber einer gesonderten Bedrachtung, weil hier ja ein Produkt aus N+1 dieser Faktoren auftritt. Es zeigt sich aber, daß auch hier die dieselben Korrekturterme in jedem der einzelnen Faktoren vernachlässigt werden kann, daß also

$$\lim_{N\to\infty} \left(\exp\left(-i\epsilon\hat{T} \right) \cdot \exp\left(-i\epsilon\hat{V} \right) \right)^N = \lim_{N\to\infty} \exp\left(-i\epsilon(\hat{T} + \hat{V}) \right)^N$$

gilt. Die linke Seite läßt sich nämlich (für diskretes N) umschreiben zu

$$\sum_{k=0}^{N} \left[\exp(-i\epsilon\hat{T}) \cdot \exp(-i\epsilon\hat{V}) \right]^k \cdot \left[\exp(-i\epsilon\hat{T}) \cdot \exp(-i\epsilon\hat{V}) \right] \cdot \left[\exp(-i\epsilon(\hat{T} + \hat{V})) \right]^{N-k}$$

Der Anfang der Taylorreihenentwicklung des zweiten Faktors ist oben angegeben. Der erste Korrekturterm ist von der Ordnung $O(\epsilon^2)$, oder $O(\frac{1}{N^2}$, auch nach Aufführen der n-fachen Summe bleibt so noch eine Ordnung von $O(\frac{1}{N}$ erhalten.

Der Kontinuumslimes in (4) läßt sich also unter Einsetzen von (8) bei Vernachlässigung der Korrekturterme ausführen. Für den Fall des Standardhamiltonoperators $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\underline{q})$ ergibt sich dann

$$\begin{aligned} P(a,b) &= \lim_{N\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 ... dx_N \prod_{k=1}^{N+1} \langle x_k | \exp(-i\epsilon \frac{\hat{p}^2}{2m}) \exp(-i\epsilon \hat{V}) | x_{k-1} \rangle \\ &= \lim_{N\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 ... dx_N \prod_{k=1}^{N+1} \langle x_k | \exp(-i\epsilon \frac{\hat{p}^2}{2m}) | x_{k-1} \rangle \exp(-i\epsilon \hat{V}) \end{aligned}$$

Durch Einfügen der N+1 vollständen Impulseigenzustandssätzen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp_N \, |p_n\rangle \langle p_n| = 1 \quad \text{für n = 1, ... ,N+1} \tag{10}$$

folgt für $P(a, b)$ weiter:

$$\lim_{N\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 ... dx_N \prod_{k=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{\infty} dp_k \, \langle x_k | \exp(-i\epsilon \frac{\hat{p}^2}{2m}) | p_k \rangle \langle p_k | \, x_{k-1} \rangle \exp(-i\epsilon \hat{V})$$

Die obige Beschränkung auf den Standardhamiltonoperator erlaubt es hier, Teile des Ausdrucks explizit auszurechnen. Mit Hilfe von

$$\langle p_k | \, x_{k-1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \exp(-ip_k x_{k-1}) \tag{11}$$

ergibt sich nämlich weiter

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dp_k \quad \langle x_k | \quad & \exp(-i\epsilon \frac{\hat{p}^2}{2m}) | p_k \rangle \langle p_k | \, x_{k-1} \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp_k \exp(-i\epsilon \frac{\hat{p}^2}{2m}) \cdot \exp(ip_k(x_k - x_{k-1})) \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\epsilon}} \exp\left(\frac{i \cdot m}{2\epsilon} (x_k - x_{k-1})^2 \right). \end{aligned} \tag{12}$$

Einsetzen in den Ausdruck für $P(a, b)$ liefert schließlich

$$\begin{aligned} P(a,b) &= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 ... dx_N \; ... \\ & ... \; \exp\left\{ i\epsilon \sum_{k=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_k, t_k) \right] \right\}. \end{aligned} \tag{13}$$

Oder in abkürzender Schreibweise

$$P(a,b) =: \int Dx \exp(iS_\epsilon). \tag{14}$$

Das so definierte S_ϵ entspricht im Kontinuumslimes gerade dem klassischen Wirkungsintegral auf der Bahn $x_a \to x_b$:

$$\lim_{N\to\infty} S_\epsilon = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x,t) \right] = S \tag{15}$$

Der Ausdruck (13) ist die Feynmansche Pfadintegralformelfür die quantenmechanische Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude. Das Integral übestreicht alle Pfade im Konfiguaritions raum, dieses werden aufsummiert, über den Faktor $\exp(iS)$ mit den jeweiligen Wirkungsintegralen gewichtet. Es werden also gewissermaßen alle möglichen Pfade getestet.
Das Pfadintegral erlaubt die Beschreibung einer für die Quantenmechanik so zentralen Größe wie die Übergangswahrscheinlichkeit ohne den Operatorformalismus - dafür allerdings mit einem unendlichdimensionalen Integral. Dessen Konvergenz ist in der Form von (13) allerdings keinesfalls ersichtlich, der Integrand ist komplex, das Integral oszilliert. Eine mathematische Wohldefiniertheit liefert erst der Übergang zum euklidschen Pfadintegral durch die Substitution $t \to -i\tau$, welches an dieser Stelle aber nicht weiter ausgeführt wird. Stattdessen soll das Pfadintegral für den einfachsten denkbaren Fall, ein freies Teilchen, als Beispiel explizit berechnet werden:

4 Das freie Teilchen

Im Falle eines freien Teilchens

$$V \equiv 0; \qquad \hat{H} = \frac{p^2}{2m}$$

vereinfacht sich der Ausdruck für das Pfadintegral (13) zu

$$\lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 ... dx_N \exp\left[\frac{im}{2\epsilon}\sum_{k=1}^{N+1}(x_k - x_{k-1})^2\right]. \qquad (16)$$

Dabei ist

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \exp\left[\frac{im}{2\epsilon}(x_1 - x_0)^2 + \frac{im}{1\epsilon}(x_2 - x_1)^2\right] \\
= & \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon}\right) \exp\left[\frac{im}{2\epsilon}(x_0^2 + x_2^2)\right] \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \exp\left[\frac{im}{\epsilon}(x_1^2 - 2(x_0 + x_2)x_1)\right] \\
= & \left(\frac{m}{2\pi i(2\epsilon)}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \exp\left[\frac{im}{2(2\epsilon)}(x_2 - x_0)^2\right]. \qquad (17)
\end{aligned}$$

unter Ausnutzung der Gaußschen Integralformel. Damit und mit $(N+1)\cdot\epsilon = t_b - t_a$ folgt iterativ für die Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude

$$P(a,b) = \left(\frac{m}{2\pi i(t_b - t_a)}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \exp\left[\frac{im}{2(t_b - t_a)}(x_b - x_a)^2\right], \qquad (18)$$

das Ausführen des Kontinuumslimes ist hier gar nicht erst nötig, weil der Ausdruck bereits zuvor unabhängig von N war. Das Ergebnis (18) stimmt natürlich mit dem aus der Quantenmechanik bereits bekannten Ergebnis überein, welches sich mit Hilfe des Operatorkalküls ergibt:

$$\begin{aligned}
P(a,b) &= \langle x_a | \exp\left[-i\frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)\right] | x_b \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \langle x_a | \, p \rangle \exp\left[-i\frac{p^2}{2m}(t_b - t_a)\right] \langle x_a | \, p \rangle
\end{aligned}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \exp\left[ip(x_b - x_a)\right] \cdot \exp\left[\frac{-ip^2}{2m}(t_b - t_a)\right]$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi i(2\epsilon)}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \exp\left[\frac{im}{2(2\epsilon)}(x_2 - x_0)^2\right]. \qquad (19)$$

5 Literatur

- H.J. Rothe, Lattice Gauge Theories, An Introduction, World Scientific, Singapore, 1992

- I. Montvay, G. Münster, Quantum Fields on a Lattice, Cambridge University Press, Cambridge, 1994

- Hagen Kleinert, Pfadintegrale, BI, 1993