#### Fatos Salihi

# Das quantenmechanische Pfadintegral Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie Wintersemester 2013/14

#### **Inhaltsverzeichnis**

1	Motivation	1
2	Übergangsamplituden	1
3	Das Pfadintegral	2
4	Differentiation auf Banachräumen	5
5	Integration auf Hilberträumen (heuristisch)	7
6	Beispiel: Quantenmechanischer Harmonischer Oszillator	8
7	Referenzen	9

#### 1 Motivation

Das quantenmechanische Pfadintegral wurde im Jahre 1948 von dem US-amerikanischen Physiker R. P. Feynman entdeckt. In dem von ihm und A. R. Hibbs verfassten Buch wird nicht nur das Pfadintegral in einer heuristischen Weise hergeleitet, sondern auch ein alternativer Zugang zur Quantenmechanik geliefert. In diesem neuen Formalismus tauchen Operatoren nicht auf. Auch muss der unendlich dimensionale Hilbertraum  $L^2(\mathbb{R}^3)$  nicht mehr als Spielfeld quantenmechanischer Dynamik herangezogen werden. Die beiden Physiker zeigen, dass die mit Hilfe von Pfadintegralen formulierte Quantenmechanik äquivalent zu der Schrödinger'schen Formulierung ist. Der mathematische Rahmen, in dem sich Pfadintegrale bewegen, ist jedoch bis heute noch nicht vollständig erforscht.

Es soll in dieser Arbeit um Pfadintegrale gehen, jedoch werden wir bekannte Resultate der Quantenmechanik zur Herleitung heranziehen.

## 2 Übergangsamplituden

Im Folgenden seien  $\hbar$  und m (Masse) gleich 1.

Ein Teilchen befinde sich zum Zeitpunkt t=0 an einem Ort  $x\in\mathbb{R}^3$ . Die Dynamik des Teilchens werde durch eine Hamiltonfunktion bzw. einen Hamiltonoperator H beschrieben. Es ist die Wahrscheinlichkeit dafür gesucht, das Teilchen zu einer Zeit t>0 am Ort  $y\in\mathbb{R}^3$  zu finden. Wenn das Teilchen klassischen Regeln gehorcht, ist die Wahrscheinlichkeit nur dann ungleich Null, wenn  $y=\gamma(t)$  auf der eindeutigen Bahnkurve  $\gamma$  liegt. Es trägt also nur eine Bahnkurve zur Übergangsamplitude bei. Quantenmechanisch liegen die Verhältnisse anders. Zu Beginn befindet sich das Teilchen in einem Eigenzustand  $|x\rangle$  des Ortoperators Q. Die zeitliche Entwicklung dieses Zustandes wird durch den Zeitentwicklungsoperator  $U(t)=e^{-iHt}$  beschrieben, d.h.

zu einem späteren Zeitpunkt t > 0 ist das Teilchen im Zustand  $|\psi(t)\rangle = U(t)|x\rangle$ . Dieser Zustand kann nach den Eigenzuständen des Ortsoperators gemäß

$$|\psi(t)\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3q |q\rangle\langle q|\psi(t)\rangle$$

entwickelt werden. Nach der Wahrscheinlichkeitsinterpretation ist die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, bei einer Messung das Teilchen am Ort y zu finden gleich dem Betragsquadrat des entsprechenden Entwicklungskoeffizienten, also

$$P(y) = |\langle \psi(t)|y\rangle|^2 = |\langle x|U(t)|y\rangle|^2$$

Die Übergangsamplitude ist  $\langle x|e^{-iHt}|y\rangle$ . Es gilt jetzt diese Übergangsamplitude zu berechnen. Sie wird uns direkt zum Pfadintegral führen.

## 3 Das Pfadintegral

Das freie Teilchen hat den Hamiltonoperator  $H = \frac{1}{2}P^2 =: T$ .

$$\langle x|e^{-\frac{i}{2}P^{2}t}|y\rangle = \int_{\mathbb{R}^{3}} d^{3}p \ \langle x|e^{-\frac{i}{2}P^{2}t}|p\rangle\langle p|y\rangle, \ \int_{\mathbb{R}^{3}} d^{3}p|p\rangle\langle p| = 1$$

$$= \int_{\mathbb{R}^{3}} d^{3}p \ \langle x|p\rangle e^{-i\frac{1}{2}p^{2}t}\langle p|y\rangle, \ e^{i\frac{1}{2}P^{2}}|p\rangle = e^{i\frac{1}{2}p^{2}t}|p\rangle$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3}} \int_{\mathbb{R}^{3}} d^{3}p e^{-i\frac{1}{2}p^{2}t + ip \cdot (x - y)}, \ \langle x|p\rangle = e^{ipx}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3}} \prod_{j=1}^{3} \int_{\mathbb{R}} dp_{j} e^{-i\frac{1}{2}p_{j}^{2}t + ip_{j}(x_{j} - y_{j})}$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi it}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{2t}|x - y|^{2}}$$

Die letzten drei Integrale sind Gaußintegrale. Ihre Berechnung ist nicht schwierig. Jetzt sei H=T+V(Q) mit einer analytischen Funktion V des Ortsoperators. Wir benötigen folgende

**Trotter-Produktformel:** Seien A, B und C beschränkte Operatoren eines Hilbertraumes  $\mathcal{H}$ . Dann gilt

$$e^{A+B+C} = \lim_{n \to \infty} (e^{A/n} e^{B/n} e^{C/n})^n$$

Die Konvergenz ist bezüglich der Operatornorm  $\|.\|$  erklärt, wobei  $\|T\| = \sup_{\|\psi\|_2=1} \|T\psi\|_2$ . Ein Operator  $T: V \supset D_T \to W$  zwischen normierten Räumen  $(V, \|.\|_V)$  und  $(W, \|.\|_W)$  heißt beschränkt, falls es eine Konstante  $0 \le C < \infty$  gibt, sodass

$$||Tx||_W \le C||x||_V$$
, für alle  $x \in D_T$ 

Dieser Zusatz ist wichtig, damit die Operatornormen endlich bleiben. Beweis: Seien  $C_n := e^{(A+B+C)/n}$  und  $D_n := e^{A/n}e^{B/n}e^{C/n}$ . Zu zeigen ist, dass

$$\lim_{n \to \infty} ||C_n^n - D_n^n|| = 0$$

Es gilt zunächst

$$\sum_{k=1}^{n} D_n^{k-1}(D-C)C_n^{n-k} = D_n(D_n - C_n)C_n^{n-1} + D_n^2(D_n - C_n)C_n^{n-2} + \dots = D_n^n - C_n^n$$

Weiterhin gilt

$$||e^T|| = ||\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} T^n|| \le \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} ||T||^n = e^{||T||}$$

für alle Operatoren T. Für  $C_n$  muss zusätzlich noch  $||A+B+C|| \le ||A|| + ||B|| + ||C||$  und für  $D_n$ 

$$||TS|| = \sup_{\|\psi\|_2 = 1} ||TS\psi||_2 \le \sup_{\|\psi\|_2 = 1} ||T\psi||_2 \cdot \sup_{\|\psi\|_2 = 1} ||S\psi||_2 = ||T|| ||S||$$

also insbesondere  $||e^Ae^Be^C|| \leq ||e^A|| ||e^B|| ||e^C||$  benutzt werden um folgende beiden Formeln zu erhalten

$$||C_n|| \le e^{(||A|| + ||B|| + ||C||)/n}$$
  
 $||D_n|| \le e^{||A||/n} e^{||B||/n} e^{||C||/n} = e^{(||A|| + ||B|| + ||C||)/n}$ 

Insgesamt gilt dann

$$||D_{n}^{n} - C_{n}^{n}|| \leq \sum_{k=1}^{n} e^{(||A|| + ||B|| + ||C||)(k-1)/n} ||D_{n} - C_{n}||e^{(||A|| + ||B|| + ||C||)(n-k)/n}$$

$$= \sum_{k=1}^{n} e^{(||A|| + ||B|| + ||C||)(n-1)/n} ||D_{n} - C_{n}||$$

$$\leq \sum_{k=1}^{n} e^{(||A|| + ||B|| + ||C||)} ||D_{n} - C_{n}|| = ne^{||A|| + ||B|| + ||C||} ||D_{n} - C_{n}||$$

Die letzte Abschätzung ist

$$D_{n} - C_{n} = e^{A/n} e^{B/n} - e^{(A+B)/n} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{A}{n}\right)^{k} \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{B}{n}\right)^{k} \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{C}{n}\right)^{k}$$

$$- \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{A+B+C}{n}\right)^{k}$$

$$= \left(1 + \frac{A}{n} + \frac{A^{2}}{2n^{2}} + O(1/n^{3})\right)$$

$$\cdot \left(1 + \frac{B}{n} + \frac{B^{2}}{2n^{2}} + O(1/n^{3})\right)$$

$$\cdot \left(1 + \frac{C}{n} + \frac{C^{2}}{2n^{2}} + O(1/n^{3})\right)$$

$$- \left(1 + \frac{A+B+C}{n} + \frac{(A+B+C)^{2}}{2n^{2}} + O(1/n^{3})\right)$$

$$= \frac{1}{n^{2}} \left(\frac{1}{2}([A,B] + [A,C] + [B,C]) + O(1/n)\right)$$

$$=: \frac{1}{n^{2}}R$$

Letztendlich

$$||D_n^n - C_n^n|| \le \frac{e^{||A|| + ||B|| + ||C||} ||R||}{n} \to 0$$

Beachten Sie, dass im letzten Schritt ||A||, ||B||, ||C||,  $||R|| < \infty$  sind, we shalb die letzte Folgerung richtig ist.

Die obige Formel lässt sich auf den Fall verallgemeinern, indem A, B und C unbeschränkt sind. Der Beweis ist aber schwieriger  $^1$ . In der Quantenmechanik können nämlich unbeschränkte Operatoren auftauchen. Z.B. ist der Hamiltonoperator des Harmonischen Oszillators unbeschränkt.

Wir benutzen die Trotter-Produktformel für folgende Rechnung. Seien dazu s:=t/n und  $W_s:=e^{-\frac{i}{2}sV(Q)}e^{-isT}e^{-\frac{i}{2}sV(Q)}$ .

$$\lim_{n\to\infty}W^n_s = \lim_{n\to\infty} (e^{-\frac{\mathrm{i}}{2}sV(Q)}e^{-\mathrm{i}sT}e^{-\frac{\mathrm{i}}{2}sV(Q)})^n$$
$$= e^{-\mathrm{i}t(T+V(Q))} = e^{-\mathrm{i}tH}$$

Wir können nun mit der Berechnung der Übergangsamplitude  $\langle x|e^{-iHt}|y\rangle$  weitermachen. Zunächst ist

$$\langle x|W_s|y\rangle = e^{-\frac{\mathrm{i}}{2}sV(x)}\langle x|e^{-\mathrm{i}sT}|y\rangle e^{-\frac{\mathrm{i}}{2}sV(y)}$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi\mathrm{i}t}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{2s}|x-y|^2 - \frac{\mathrm{i}s}{2}(V(x) + V(y))\right)$$

Jetzt kommt der entscheidende Schritt!

$$\langle x|e^{-\mathrm{i}tH}|y\rangle = \langle x|(e^{-\mathrm{i}sH})^n|y\rangle$$

$$= \int_{X^n} \mathrm{d}x_1...\mathrm{d}x_{n-1}\langle x|e^{-\mathrm{i}sH}|x_1\rangle\langle x_1|e^{-\mathrm{i}sH}|x_2\rangle...\langle x_{n-1}|e^{-\mathrm{i}sH}|y\rangle, \ X := \mathbb{R}^3$$

$$\stackrel{*}{=} \lim_{n\to\infty} \int_{X^n} \mathrm{d}x_1...\mathrm{d}x_{n-1}\langle x|W_s|x_1\rangle\langle x_1|W_s|x_2\rangle...\langle x_{n-1}|W_s|y\rangle$$

$$= \lim_{n\to\infty} \left(\frac{1}{2\pi\mathrm{i}t}\right)^{\frac{3n}{2}} \int_{X^n} \mathrm{d}x_1...\mathrm{d}x_{n-1}$$

$$\cdot \exp\left(\mathrm{i}\sum_{k=1}^n s\left(\frac{1}{2}\left|\frac{x_k-x_{k-1}}{s}\right|^2 - \frac{V(x_k)+V(x_{k-1})}{2}\right)\right)$$

Dabei sind  $x_0 := x$  und  $x_n := y$ .

Wir müssen die letzten Schritte nun interpretieren. Diese Interpretation testet man an quantenmechanischen Problemen, von denen man die Lösung kennt. Die in den letzten Schritten gemachten Behauptungen rechtfertigt man dann dadurch.

Das letzte Integral erstreckt sich offenbar nicht mehr über eine Teilmenge eines endlich-dimensionalen Vektorraums. Wir interpretieren die  $x_0, ..., x_n$  als Punkte  $\gamma(0), ..., \gamma(t)$  einer differenzierbaren Kurve  $\gamma: [0, t] \to \mathbb{R}^3$  des unendlich-dimensionalen Vektorraums  $C^1([0, t], \mathbb{R}^3)$ , in der die Randbedingungen  $\gamma(0) = x$  und  $\gamma(t) = y$  (die 'Variablen'  $\gamma(0)$  und  $\gamma(t)$  sind fest) erfüllt sind. Mit diesen Identifikationen ist

$$S_s := \sum_{k=1}^n s \left( \frac{1}{2} \left| \frac{x_k - x_{k-1}}{s} \right|^2 - \frac{V(x_k) + V(x_{k-1})}{2} \right)$$

 $<sup>^1{\</sup>rm Siehe}$ dazu: E. Nelson, Math. Phys. 5, 332 (1963).

eine Riemann'sche Summe. Für  $n \to \infty$  konvergiert sie gegen

$$S(\gamma) = \int_0^t ds \left( \frac{1}{2} |\dot{\gamma}(s)|^2 - V(\gamma(s)) \right)$$

 $S(\gamma)$  ist die Wirkung des Pfades  $\gamma$ . Es liegt nahe, die komplette obige Integration, als eine Integration über alle Pfade von  $C^1([0,t],\mathbb{R}^3)$  mit obigen Randbedingungen aufzufassen. Wir schreiben dafür symbolisch

$$\langle x|e^{-itH}|y\rangle = \int_{V} \mathcal{D}\gamma \ e^{iS(\gamma)}$$

mit 
$$Y := \{ \gamma \in C^1([0, t], \mathbb{R}^3) : \gamma(0) = x, \ \gamma(t) = y \}.$$

Die letzten Schritte sind nur formal zu verstehen. Es ist schwierig, den Grenzwert bei \* zu deuten bzw. zu zeigen, dass er überhaupt sinnvoll ist. Jeder Grenzwertbildung muss eine Metrik zugrunde liegen, um die Konvergenz überprüfen zu können. Außerdem geht aus dem Ausdruck nicht hervor, wie die Integration durchzuführen ist. Es wird sich jedoch zeigen, dass in manchen Fällen die Integration tatsächlich (heuristisch) durchgeführt werden kann und dass das Pfadintegral auch sinnvolle Ergebnisse liefert.

#### 4 Differentiation auf Banachräumen

Wir haben gesehen, dass Pfadintegrale Integrale auf unendlich-dimensionalen Vektorräumen sind. Es ist zweckmäßig sich vorher auch mit der fundierten Theorie der Differentiation auf sog. Banachräumen zu beschäftigen. Wir werden dadurch Hilfsmittel erhalten, die uns erlaubten, die Wirkung von Pfaden besser zu charakterisieren.

**Fréchet-Ableitung:** Seien  $(X, \|.\|_X)$  und  $(Y, \|.\|_Y)$  Banachräume und  $U \subset X$  offen. Eine Abbildung  $f: U \to Y$  heißt differenzierbare im Punkt  $x \in U$ , falls es einen linearen und beschränkten Operator  $A(x): X \to Y$  gibt, sodass

$$f(x + \xi) = f(x) + A(x) \circ \xi + o(\|\xi\|_X)$$

Der Operator A(x) =: (Df)(x) heißt Fréchet-Ableitung von f an der Stelle x.

Ein Banachraum ist ein vollständiger, normierter Vektorraum. Das Landau-Symbol 'o' heißt

$$\phi(\xi) = o(\|\xi\|_X) \text{ für } \|\xi\|_X \to 0 \Leftrightarrow \lim_{\xi \to 0} \frac{\phi(\xi)}{\|\xi\|_X} = 0 \in Y$$

Für den Fall, dass X und Y euklidische Räume  $\mathbb{R}^n$ ,  $\mathbb{R}^k$  sind entspricht der Operator  $A(x): \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k$  dem wohlbekannten Differential.

Beispiele: Sei  $X = C^2([a, b], \mathbb{R})$  der Vektorraum der zweimal-stetig differenzierbaren Funktion vom Intervall [a, b] nach  $\mathbb{R}$ ,  $Y = \mathbb{R}$  und

$$S: X \to Y; \ x \mapsto \int_a^b \mathrm{d}t \left(\frac{1}{2}\dot{x}(t)^2 - \frac{1}{2}x(t)^2\right)$$

Die Fréchet-Ableitung ermittelt man aus der Beziehung

$$S(x+\xi) = \frac{1}{2} \int_{a}^{b} dt ((\dot{x}(t) + \dot{\xi}(t))^{2} - (x(t) + \xi(t))^{2})$$

$$= \frac{1}{2} \int_{a}^{b} dt (\dot{x}(t)^{2} + x(t)^{2}) + 2 \cdot (\dot{x}(t)\dot{\xi}(t) - x(t)\xi(t)) + (\dot{\xi}(t)^{2} + \xi(t)^{2})$$

$$= S(x) + \int_{a}^{b} (\dot{x}(t)\dot{\xi}(t) - x(t)\xi(t)) + \underbrace{S(\xi)}_{o(||\xi||_{X})}$$

Die Fréchet-Ableitung der Wirkung S an der Stelle x ist daher der lineare Integraloperator DS(x) definiert durch

$$DS(x) \circ \xi = \int_a^b dt (\dot{x}(t)\dot{\xi}(t) - x(t)\xi(t))$$

Sie haben vermutlich schon erkannt, dass es sich bei S um die Wirkung des harmonischen Oszillators handelt. Mathematisch kann über DS(x) nichts weiter gesagt werden. Wir haben aber bei der Herleitung des Pfadintegrales nur Kurven zugelassen, die feste Randpunkte besitzen. Deshalb müssen wir uns bei der Addition eines Pfades  $\xi$  auf solche beschränken, für die  $\xi(a) = \xi(b) = 0$  ist. Das Differential kann dann weiter umgeformt werden, in dem man den ersten Teil des Integranden  $\dot{x} \cdot \dot{\xi}$  partiell integriert. Dann ist

$$DS(x) \circ \xi = -\int_a^b dt (\ddot{x}(t) + x(t))\xi(t) = 0$$

Der harmonische Oszillator erfüllt nämlich  $\ddot{x}(t) + x(t) = 0$ . Für den klassisch realisierten Weg x, ist S stationär, d.h. DS(x) = 0 (Nulloperator). Etwas allgemeiner sei nun

$$S(x) = \int_{a}^{b} dt \ \mathcal{L}(t, x(t), \dot{x}(t))$$

mit einer differenzierbaren Lagrangefunktion  $\mathcal{L}:U\to\mathbb{R}\ (U\subset\mathbb{R}^3\ \text{offen})$ . Das übliche Vorgehen liefert

$$S(x+\xi) = \int_{a}^{b} dt \, \mathcal{L}(t,x(t)+\xi(t),\dot{x}(t)+\dot{\xi}(t))$$

$$= \int_{a}^{b} dt \, (\mathcal{L}(t,x(t),\dot{x}(t))+(\partial_{2}\mathcal{L})(t,x(t),\dot{x}(t))\xi(t)+(\partial_{3}\mathcal{L})(t,x(t),\dot{x}(t))\dot{\xi}(t)$$

$$+ o(|\xi(t)|) + o(|\dot{\xi}(t)|))$$

$$= S(x) + \int_{a}^{b} dt \, \Big((\partial_{2}\mathcal{L})(t,x(t),\dot{x}(t))\xi(t) + (\partial_{3}\mathcal{L})(t,x(t),\dot{x}(t))\dot{\xi}(t)\Big) + o(||\xi||_{X})$$

Der zweite Schritt folgt aus der Differenzierbarkeit von  $\mathcal{L}$  und der linearen Approximation in den letzten beiden Variablen, also im Grunde das gleiche Vorgehen wie bei der Fréchet-Ableitung. Unter Verwendung von partieller Integration und  $\xi(a) = \xi(b) = 0$  ist dann

$$DS(x) \circ \xi = \int_{a}^{b} dt \left( (\partial_{2} \mathcal{L})(t, x(t), \dot{x}(t)) \xi(t) + (\partial_{3} \mathcal{L})(t, x(t), \dot{x}(t)) \dot{\xi}(t) \right)$$
$$= \int_{a}^{b} dt \left( (\partial_{2} \mathcal{L})(t, x(t), \dot{x}(t)) \xi(t) - \frac{d}{dt} (\partial_{3} \mathcal{L})(t, x(t), \dot{x}(t)) \right) \xi(t)$$

Wir fragen auch hier nach Pfaden x für die DS(x) = 0 ist. Dazu muss das obige Integral für alle  $\xi$  mit Randbedingungen  $\xi(a) = \xi(b) = 0$  verschwinden. Das sog. Fundamentallemma der Variationsrechung besagt, dass dafür

$$(\partial_2 \mathcal{L})(t, x(t), \dot{x}(t)) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\partial_3 \mathcal{L})(t, x(t), \dot{x}(t)) = 0$$

gelten muss. Diese Gleichung ist bekannt als Euler-Lagrange-Gleichung. Aus der klassischen Mechanik ist bekannt, dass sie äquivalent zur Newton'schen Bewegungsgleichung ist. Das Ergebnis bedeutet, dass für eine Funktion x die Wirkung genau dann stationär ist, wenn x die Euler-Lagrange-Gleichungen erfüllt. Das Resultat lässt sich auf Kurven  $x:[a,b] \to \mathbb{R}^n$  verallgemeinern.

## 5 Integration auf Hilberträumen (heuristisch)

Wir versuchen nun das Pfadintegral mathematisch zu begründen, indem wir die Definitionen der Lebesgue-Integration verallgemeinern, um uns dadurch ein Integrationsverfahren zu verschaffen.

Sei  $\mathcal{H}$  ein separabler Hilbertraum mit einer Orthonormalbasis  $\mathcal{B} = (e_i)_{i \in I}$ , wobei  $I \subseteq \mathbb{N}$ .

Seien  $(a_i)_{i \in I}$  und  $(b_i)_{i \in I}$  zwei beliebige Folgen reeller Zahlen mit  $a_i < b_i$  für alle  $i \in I$ . Unter einem offenen  $\mathcal{H}$ -Quader verstehe man eine Teilmenge  $Q \subset \mathcal{H}$  der Form

$$Q = \left\{ \sum_{i \in I} \lambda_i e_i : \lambda_i \in ]a_i, b_i[ \right\}$$

Unter diesen Quadern sei eine Teilmenge  $\mathcal{Q}$  von Quadern, für die  $\prod_{i\in I}(b_i-a_i)<\infty$  ist. Quader  $Q\in\mathcal{Q}$  sollen  $\mathcal{H}$ -messbar heißen und  $v(Q):=\prod_{i\in I}(b_i-a_i)$  heiße das Volumen von Q.

Wir können nun Treppenfunktionen erklären. Eine  $\mathcal{H}$ -Treppenfunktion ist eine Abbildung  $\phi: \mathcal{H} \to \mathbb{C}$  mit

$$\phi(x) = \sum_{k=1}^{N} c_k \mathbf{1}_{Q_k}(x), \ c_k \in \mathbb{C}, \ Q_k \in \mathcal{Q}$$

wobei  $\mathbf{1}_{Q_k}$  die charateristische Funktion des Quaders  $Q_k$  ist. Das  $\mathcal{H}$ -Integral einer Treppenfunktion  $\phi$  sei

$$\int_{\mathcal{H}} \mathcal{D}x \ \phi(x) := \sum_{k=1}^{N} c_k v(Q_k)$$

Zu einer Funktion  $f: \mathcal{H} \to \mathbb{C}$  heiße eine Reihe  $\Phi = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \mathbf{1}_{Q_k}, \ c_k \geq 0, \ Q_k \in \mathcal{Q}$  $\mathcal{H}$ -Hüllreihe zu f, falls

$$|f(x)| \le \Phi(x)$$
, für alle  $x \in \mathcal{H}$ 

Die Zahl  $I(\Phi) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k v(Q_k) \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  heiße Inhalt von  $\Phi$ . Mit ihr können wir die  $L^1$ - $\mathcal{H}$ -Halbnorm durch

$$||f||_{\mathcal{H},1} = \inf\{I(\Phi) : \Phi \text{ ist Hüllreihe zu } f\}$$

erklären. Die  $L^1$ - $\mathcal{H}$ -Halbnorm erfüllt die gleichen Rechenregeln wie die  $L^1$ -Halbnorm. Wenn die obigen Ausdrücke zweckmäßig definiert worden sind, sollte unbedingt

$$\|\phi\|_{\mathcal{H},1} = \int_{\mathcal{H}} \mathcal{D}x \ |\phi(x)|$$

für jede Treppenfunktion  $\phi$  gelten. Dann heiße eine Funktion  $f: \mathcal{H} \to \mathbb{C}$   $\mathcal{H}$ integrierbar, falls es eine Folge von Treppenfunktionen  $(\phi_n)_{n\in\mathbb{N}}$  gibt, sodass

$$\lim_{n \to \infty} ||f - \phi_n||_{\mathcal{H}, 1} = 0$$

Die komplexe Zahl

$$\int_{\mathcal{H}} \mathcal{D}x \ f(x) := \lim_{n \to \infty} \int_{\mathcal{H}} \mathcal{D}x \ \phi_n(x)$$

heißt in dem Fall das  $\mathcal{H}$ -Integral von f.

Das  $\mathcal{H}$ -Integral erfüllt Linearität und Monotonie durch Zurückführen auf das Integral für Treppenfunktionen, falls diese dafür schon bewiesen worden sind. Ein Rechenverfahren würde ein entsprechender Satz von Fubini für separable Hilberträume liefern. Die Orthonormalbasis  $\mathcal{B}$  zerlege in zwei disjunkte Teilmengen  $\mathcal{B}_1$  und  $\mathcal{B}_2$  und die entsprechenden linearen Hüllen seien mit X und Y bezeichnet. Die Behauptung ist, dass für eine integrierbare Funktion  $f: X \times Y \to \mathbb{C}$  ebenfalls der Satz von Fubini gilt. Dann kann nämlich Y eindimensional gewählt werden. In diesem Fall sind  $\mathcal{H}$ - und Lebesgue-Integral identisch und die Integration über Y kann sofort vorgenommen werden. Wenn man die Definitionen im Satz von Fubini benutzt, bedeutet das

$$\int_{X\times Y} \mathcal{D}(x,y) \ f(x,y) = \int_X \mathcal{D}x \ \int_Y \mathrm{d}y \ f(x,y)$$

Für eine Zerlegung  $\mathcal{B} = \bigcup_{i \in I} \mathcal{B}_i$  in einelementige Teilmengen  $(\mathcal{B}_i)_{i \in I}$  und entsprechenden eindimensionalen, linearen Hüllen  $(X_i)_{i \in I}$  gilt für den Spezialfall  $f: x \mapsto \prod_{i \in I} f_i(x_i)$ , wobei  $f_i: X_i \to \mathbb{C}$ , wegen der Linearität

$$\int_{\mathcal{H}} \mathcal{D}x \ f(x) = \prod_{i \in I} \int_{X_i} \mathrm{d}x_i \ f_i(x_i)$$

## 6 Beispiel: Quantenmechanischer Harmonischer Oszillator

Bei der Behandlung der Fréchet-Ableitung haben wir gesehen, dass für die Wirkung des harmonischen Oszillators  $S(x+\xi)=S(x)+S(\xi)$  gilt, wobei x der klassische Weg und  $\xi$  eine Kurve mit geeigneten Randbedingungen war. Unter der Annahme, dass alle obigen Definitionen sinnvoll und alle dabei gemachten Behauptungen bewiesen worden sind, versuchen wir nun explizit ein Pfadintegral zu berechnen. Aus der Linearität des Pfadintegrals folgt dann

$$\int_{Y} \mathcal{D}\gamma \ e^{\mathrm{i}S(\gamma)} = e^{\mathrm{i}S(x)} \cdot \int_{Z} \mathcal{D}\xi \ e^{\mathrm{i}S(\xi)}$$

mit  $Z:=\{\xi\in C^1([0,t],\mathbb{R}):\xi(0)=\xi(t)=0\}$ . Z ist ein Hilbertraum mit einer Orthonormalbasis  $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$  definiert durch  $u_n(s)=\sqrt{2/t}\sin\frac{n\pi s}{t}$  und üblichem Skalarprodukt  $\langle a,b\rangle=\int_0^t\mathrm{d}s\;a(s)b(s)$ . Mit partieller Integration formt man die Wirkung

zunächst um zu

$$S(\xi) = -\frac{1}{2} \int_0^t ds \ \xi(s) \left(\frac{d^2}{ds^2} + 1\right) \xi(s) = \frac{1}{2} \langle \xi, A\xi \rangle$$

Überzeugen Sie sich davon, dass  $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$  eine Orthonormalbasis aus Eigenfunktionen des Operators  $A=-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2}-1$  mit den Eigenwerten  $\lambda_n=(\frac{n\pi}{t})^2-1$  ist. Die Funktion  $\xi$  entwickle man nun nach den  $(u_n)_n$  gemäß  $\xi(s)=\sum_{n\in\mathbb{N}}x_nu_n(s)$ . Die Wirkung ist dann  $S(\xi)=\frac{1}{2}\langle\sum_{n\in\mathbb{N}}x_nu_n,\sum_{n\in\mathbb{N}}\lambda_nx_nu_n\rangle=\frac{1}{2}\sum_{n\in\mathbb{N}}\lambda_nx_n^2$ . Nun gilt

$$e^{\frac{\mathbf{i}}{2}\sum_{n\in\mathbb{N}}\lambda_n x_n^2} = \prod_{n\in\mathbb{N}} e^{\frac{\mathbf{i}}{2}\lambda_n x_n^2}$$

Wir können daher auf unser Integrationsverfahren zurückgreifen:

$$\int_{Z} \mathcal{D}\xi \ e^{iS(\xi)} = \prod_{n \in \mathbb{N}} \int_{\mathbb{R}} dx_{n} \ e^{\frac{i}{2}\lambda_{n}x_{n}^{2}}$$
$$= \prod_{n \in \mathbb{N}} \left(\frac{\lambda_{n}}{2\pi i}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

Wir haben dadurch gezeigt, dass manche Pfadintegrale berechenbar sind. Das Ergebnis kann weiter umgeformt werden. Es lässt sich zeigen, dass daraus tatsächlich die bekannten Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators folgen.

### 7 Referenzen

- G. Münster: Quantentheorie, De Gruyter, 2010.
- F. Strocchi: An Introduction to the Mathematical Structure of Quantum Mechanics, World Scientific Publishing, 2005. (Einige Seiten sind hier verfügbar.)
- R. Wulkenhaar: Integrationstheorie, Wintersemester 2012/13.
- H. W. Alt: Lineare Funktionalanalysis, Springer, 2006
- R. P. Feynman, A. R. Hibbs: Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill Inc., 1965