Quantenmechanisches Pfadintegral

Herleitung und Aharonov Bohm Effekt
Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie

Fenna Stegemerten

26.11.2014

Inhaltsverzeichnis

1 Motivation **3**

2 Herleitung **3**

3 Aharonov- Bohm- Effekt **6**

4 Anhang **9**

5 Literaturverzeichnis **10**

1 Motivation

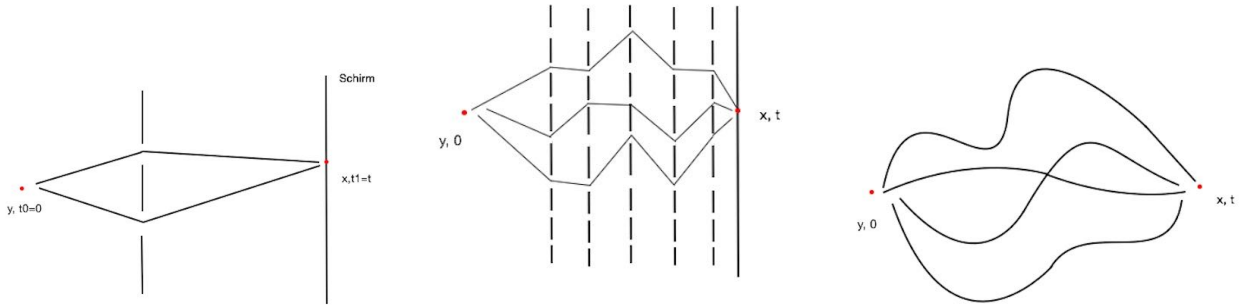

Abbildung 1: Motivation des Pfadintegrals

Der quantenmechanische Pfadintegral- Formalismus wurde 1948 von Feynman entwickelt. Sein Werk beruht auf einer Arbeit von Dirac, die einige Jahre zuvor veröffentlicht wurde. Eine wichtige Eigenschaft dieser alternativen Darstellung der Quantenmechanik ist, dass sie sich nur klassischer Größen bedient, welche eventuell anschaulicher als die Operatoren und Zustände aus dem Hilbertraum sind. Um das Pfadintegral zunächst zu motivieren, wird das Doppelspaltexperiment (siehe obige Abbildung) betrachtet. Ein Teilchen, dass von der Quelle am Ort y zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ startet, hat zwei Möglichkeiten, durch den Spalt zum Ort x (zur Zeit $t_1 = t$) auf dem Schirm zu gelangen. Die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsamplitude setzt sich also aus dem Anteil der Pfade zusammen, die durch den oberen Spalt gehen und der Pfade, die den unteren Spalt passieren. Diese Wahrscheinlichkeitsamplitude geht für sehr vielen Blenden, die dicht hintereinander aufgestellt werden und aus sehr vielen Spalten bestehen, in eine Summe und im Grenzfall für unendlich viele Blenden mit unendlichen vielen Spalten, in ein Integral über. Der Kontinuumsübergang stellt also eine Integration über alle möglichen Pfade $x(t)$ vom Punkt y zum Punkt x dar. Bei der Überlegung wurde der Faktor Zeit völlig außer Acht gelassen. Es soll sich hierbei auch lediglich um eine Motivation handeln, deren Idee in der Herleitung zum besseren Verständnis aufgegriffen wird.

2 Herleitung

Die Herleitung wird der Einfachheit halber zunächst eindimensional erfolgen, ist für den dreidimensionalen Fall jedoch analog. Wie bereits zuvor erwähnt ist es wichtig, die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsamplitude oder Übergangsamplitude zu betrachten. Diese lässt sich mithilfe des Zeitentwicklungsoperators darstellen.

$$< x, t|y, 0 >=< x|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|y > \tag{1}$$

Zunächst wird der Übergang für ein freies Teilchen berechnet, da dieser anschließend,

bei der Betrachtung eines Teilchens in einem Potenzial $V(X)$, erneut auftritt.

$$H = H_0 = \frac{P^2}{2m} \tag{2}$$

$$< x|e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{P^2}{2m}t}|y >= \int dp < x|e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{P^2}{2m}t}|p >< p|y >= \int dp\ e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} < x|p >< p|y > \tag{3}$$

$$= \int \frac{dp}{2\pi}\ e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t+\frac{i}{\hbar}p(x-y)}$$

Bei der Berechnung wurde eine **1** in der Impulsbasis eingefügt und ausgenutzt, dass die Zustände $|p >$ Eigenzustände zum Impulsoperator P mit Eigenwert p sind. Außerdem wurden die Fourierkomponenten $< x|p >$ ausgewertet. Dieses Integral stellt nun einen Ausdruck dar, der mithilfe von quadratischer Ergänzung in ein Gaußintegral überführt werden kann. Die Lösung eines Gaußintegrals ist bekannt als:

$$\int_{\infty}^{\infty} dx\, e^{-a\frac{x^2}{2}} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \qquad a \in \mathbb{C}. \tag{4}$$

Damit lässt sich (3) schreiben als:

$$< x|e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}|y >= \sqrt{\frac{m\hbar}{2\pi i t}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2t}(x-y)^2}. \tag{5}$$

Mathematisch korrekt müsste in diesem Fall der rein imaginäre Exponent um einen negativen Realteil erweitert werden, der im Anschluss im Limes gegen Null läuft. Im nächsten Schritt wird nun die Übergangsamplitude für ein Teilchen in einem beliebigen Potenzial $V(X)$ betrachtet. Da H_0 und $V(X)$ nicht kommutieren, ist die Berechnung der Übergangsamplitude nicht ohne Weiteres möglich. Mit einer Taylorentwicklung für kleine Zeiten ϵ, kann der entsprechende Zeitentwicklungsoperator U_ϵ jedoch dargestellt werden.

$$U_\epsilon := e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0+V(x))\epsilon} = e^{-\frac{i}{\hbar}V\frac{\epsilon}{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\epsilon}e^{-\frac{i}{\hbar}V\frac{\epsilon}{2}} + \mathcal{O}(\epsilon^3) := W_\epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^3) \tag{6}$$

Diese Approximation wird durchgeführt, da die Übergangsamplitude für W_ϵ berechnet werden kann.

$$< x|W_\epsilon|y >=< x|e^{-\frac{i}{\hbar}V\frac{\epsilon}{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\epsilon}e^{-\frac{i}{\hbar}V\frac{\epsilon}{2}}|y >= e^{-\frac{i}{\hbar}V(x)\frac{\epsilon}{2}} < x|e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\epsilon}|y > e^{-\frac{i}{\hbar}V(y)\frac{\epsilon}{2}} \tag{7}$$

$$= \sqrt{\frac{m\hbar}{2\pi i t}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2t}(x-y)^2-\frac{i}{\hbar}(V(x)+V(y))}$$

Dabei wirken die Potenziale jeweils auf eine Ortsbasis und können aus dem dyadischen Produkt herausgezogen werden, sodass nur noch die Übergangsamplitude für das freie Teilchen zurückbleibt.
Um dieses Ergebnis nutzen zu können, wird das Zeitintervall t in N Stücke der Breite ϵ unterteilt. Damit gilt für den Zeitentwicklungsoperator, der in der ursprünglichen

Wahrscheinlichkeitsamplitude betrachtet wird:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = (e^{-\frac{i}{\hbar}H\epsilon})^N = (W_\epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^3))^N = W_\epsilon^N + N \cdot \mathcal{O}(\epsilon^3) \cdot W_\epsilon^{N-1} + ... = W_\epsilon^N + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (8)$$

Aufgrund der Antiproportionalität von N und ϵ, geht die zuvor kubische Ordnung in ϵ in eine quadratische über. Um nun noch den Term $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ „loszuwerden“, wird der Grenzfall $N \to \infty$ betrachtet.

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = \lim_{N\to\infty} W_\epsilon^N \quad (9)$$

Dies wird als die Lie- Kato- Trotter- Produktformel bezeichnet. Ein genauerer Beweis ist dem Anhang beigefügt.
Mit dem Ergebnis lässt sich die Übergangsamplitude für ein Teilchen in einem Potenzial ermitteln.

$$< x|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|y >=< x|(e^{-\frac{i}{\hbar}H\epsilon})^N|y > \quad (10)$$

$$= \lim_{N\to\infty} \int dx_1\, dx_2 ... dx_{N-1}\ < x|W_\epsilon|x_1 >< x_1|W_\epsilon|x_2 > ... < x_{N-1}|W_\epsilon|y >$$

$$= \lim_{N\to\infty} (\frac{m\hbar}{2\pi i\epsilon})^{\frac{N}{2}} \int dx_1\, dx_2 ... dx_{N-1}\ exp\{\frac{i}{\hbar}[\frac{m}{2\epsilon}[(x-x_1)^2 + (x_1-x_2)^2 + ... + (x_{N-1}-y)^2]$$
$$-\frac{\epsilon}{2}[\frac{V(x)}{2} + V(x_1) + ... + V(x_{N-1}) + \frac{V(y)}{2}]]\}$$

Im zweiten Schritt ist bereits die Analogie zur Motivation zu erkennen. Das gesamte Intervall wird in N Wegstücke unterteilt, die dann in ein Kontinuum übergehen. Der jetzt noch „unhandliche“ Exponent, lässt sich zusammenfassen zu einer Summe.

$$S_\epsilon = \sum_{k=1}^{N} \epsilon[\frac{m}{2}(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon}) - (\frac{V(x_k) + V(x_{k-1})}{2})] \text{ mit } x_0 = x,\ \ x_N = y$$

Dabei wird $x_k = x(t'_k)$ identifiziert. Der erste Term der Summe ist ein Differenzenquotient, der im Kontinuum in eine Ableitug übergeht. Der zweite Term geht in $V(x(t'))$ über.

$$S = \int_0^t (\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x(t')))\, dt' \quad (11)$$

S ist aus der klassischen Physik bekannt als die Wirkung. Der Integrand ist die Lagrangefunktion $L = T - V$. S ist dabei ein Funktional von $x(t)$, also die Wirkung aller möglichen Pfade.

Damit ergibt sich Gleichung (1) zu:

$$< x|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|y >= \int \mathcal{D}[x(t)]e^{\frac{i}{\hbar}S[x]} \quad (12)$$

$$\mathcal{D}[x(t)] = \lim_{N\to\infty} (\frac{m\hbar}{2\pi i\epsilon})^{\frac{N}{2}}\, dx(t_1)\, dx(t_2) ... dx(t_{N-1})\,. \quad (13)$$

Wobei der Limes in (13) erst nach der Integration durchzuführen ist.
Dieses Ergebnis zeigt den deutlichen Unterschied zwischen der klassichen Physik und der

Quantenmechanik: In der klassischen Physik wird der Weg gewählt, für den die Wirkung stationär ist ($\delta S = 0$). In der Quantenmechanik hingegen wird über alle möglichen Pfade integriert.

3 Aharonov- Bohm- Effekt

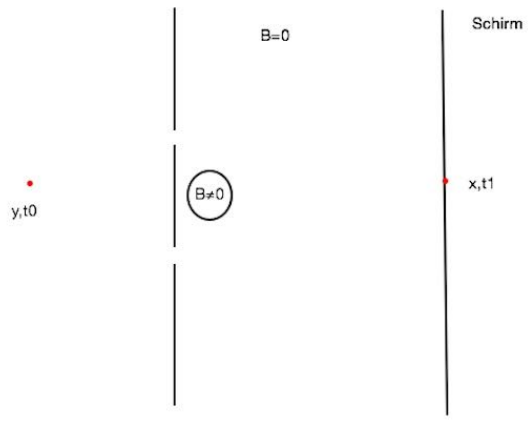

Abbildung 2: Aufbau des Aharonov- Bohm- Effekts

David Bohm und Yakir Aharonov diskutierten 1959 folgendes Experiment: Dicht hinter einem Doppelspalt befinde sich eine zylindrische Spule, in der ein Magnetfeld $\vec{B}$ vorliegt. Im Außenraum sei das Magnetfeld null. Klassisch ist zu erwarten, dass das Interferenzmuster durch diesen Aufbau nicht beeinflusst wird, da $m\ddot{\vec{r}} = e\dot{\vec{r}} \times \vec{B}$. Das Experiment hingegen zeigt eine Verschiebung des Interferenzmusters. Da $\vec{B} = rot(\vec{A})$ und $\vec{A}$ im Außenraum durchaus von null verschieden sein kann, liegt die Vermutung nahe, dass dieses einen Einfluss auf die Teilchen haben könnte. Allerdings ist das Vektorpotenzial, aufgrund der Eichinvarianz, eine physikalisch nicht messbare Größe. Deshalb wird sich des Pfadintegralformalismus bedient, um die Übergangsamplitude eines Teilchens, dass zum Zeitpunkt t_0 am Ort y startet und zur Zeit t_1 den Schirm im Punkt x erreicht, zu berechnen.
Die Lagrangefunktion lautet:

$$L = \frac{m}{2}\dot{\vec{r}}^{\,2} + e\dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}(\vec{r}). \tag{14}$$

Dabei lässt sich der zweite Term aus dem verallgemeinerten Potenzial bestimmen. Damit ergibt sich die Wirkung (S_0 sei die Wirkung eines freien Teilchens) durch Parametrisierung des Kurvenintegrals.

$$S = S_0 + e\int_{t_0}^{t_1} \dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}(\vec{r})\, dt = S_0 + e\int_{\vec{y}}^{\vec{x}} \vec{A}(\vec{r}) \cdot\, d\vec{r} \tag{15}$$

In einem weiteren Schritt werden zwei unterschiedliche Wegtypen betrachtet. Zum einen die Wege, die links, zum anderen solche, die rechts an der Spule vorbeilaufen. Die Differenz zweier Wege C_a und C_b eines gleichen Typs ergibt sich damit zu null, da in der eingeschlossenen Fläche F_1 des Linienintegrals kein Magnetfeld vorliegt und mit dem Satz von Stokes, das Linienintegral gleich dem Flächenintegral der Rotation ist.

$$\int_{C_a} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \ d\vec{r} - \int_{C_b} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \ d\vec{r} = \oint_{C_a - C_b} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \ d\vec{r} = \int_{F_1} rot(\vec{A}) \cdot \ d\vec{f} = 0 \tag{16}$$

Dies gilt analog für Wege des anderen Typs. Da beliebige Wege C_a und C_b gewählt wurden, ist das Wegintegral über den Weg eines Typs C_1 oder C_2 konstant.

$$\int_{C_1} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \ d\vec{r} = \alpha_1 \tag{17}$$

$$\int_{C_2} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \ d\vec{r} = \alpha_2 \tag{18}$$

Die Übergangsamplitude setzt sich aus den beiden Weganteilen zusammen.

$$\begin{aligned} < x, t_1 | y, t_0 > &= \int^{(1)} \mathcal{D}[x(t)] \ e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} + \int^{(2)} \mathcal{D}[x(t)] \ e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} = K_1 \, e^{e \frac{i}{\hbar} \alpha_1} + K_2 \, e^{e \frac{i}{\hbar} \alpha_2} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} \alpha_1} (K_1 + K_2 \, e^{e \frac{i}{\hbar} (\alpha_2 - \alpha_1)}) \end{aligned} \tag{19}$$

K_1 und K_2 sind dabei die Anteile des freien Teilchens. Das Interferenzmuster, welches proportional zum Betragsquadrat der Übergangsamplitude ist, hängt nur von $\alpha_2 - \alpha_1$ ab. Dieser Term lässt sich aus dem Flächenintegral der eingeschlossenen Fläche F der beiden Wegtypen C_1 und C_2 berechnen und entspricht dem magnetischen Fluss Φ.

$$\begin{aligned} \alpha_2 - \alpha_1 &= \int_{C_2} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \ d\vec{r} - \int_{C_2} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \ d\vec{r} = \oint_{C_2 - C_1} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \ d\vec{r} \\ &= \int_F rot(\vec{A}) \cdot \ d\vec{f} = \int_F \vec{B} \cdot \ d\vec{f} = \Phi \end{aligned} \tag{20}$$

Der magnetische Fluss ist eichinvariant und die gesuchte Größe, die das Interferenzmuster beeinflusst.

$$| < x, t_1 | y, t_0 > | = |(K_1 + K_2 \, e^{e \frac{i}{\hbar} \Phi})| \tag{21}$$

Gleichung(21) zeigt, dass für $\frac{e}{\hbar}\Phi = 2k\pi$, $k \in \mathbb{Z}$ das Interferenzmuster dem ursprünglichen Bild, also bei ausgeschaltetem Magnetfeld, entspricht.
Bei der Herleitung wurden die Wege vernachlässigt, bei denen sich das Teilchen mehrfach um die Spule windet. Zwar ist dies nur ein geringer Anteil, wird er jedoch berücksichtigt, verändert sich das Ergebnis zu:

$$| < x, t_1 | y, t_0 > | = | \sum_n K_n e^{e \frac{i}{\hbar} n \Phi} |. \tag{22}$$

Zusammenfassend lässt sich also sagen, dass das Interferenzmuster nicht direkt durch das Vektorpotenzial $\vec{A}$ beeinflusst wird, sondern vom eichinvarianten magnetischen Fluss Φ.

Die Verwendung des quantenmechanischen Pfadintegrals erwies sich in diesem Fall als sehr nützlich.

4 Anhang

Lie- Kato- Trotter- Produktformel[1]
Aufgrund der Taylorentwicklung gilt:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0+V(x))\epsilon} = e^{-\frac{i}{\hbar}V\frac{\epsilon}{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\epsilon}e^{-\frac{i}{\hbar}V\frac{\epsilon}{2}} + \mathcal{O}(\epsilon^3) \tag{23}$$

Weiterhin gilt:

$$\begin{aligned}(e^{-\frac{i}{\hbar}V\frac{\epsilon}{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\epsilon}e^{-\frac{i}{\hbar}V\frac{\epsilon}{2}})^N - (e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0+V(x))\epsilon})^N &= [W_\epsilon - e^{-iH\epsilon}]e^{-iH\epsilon(N-1)} + W_\epsilon[W_\epsilon - e^{-iH\epsilon}]e^{-iH\epsilon(N-2)} \\ &+ ... + W_\epsilon^{N-2}[W_\epsilon - e^{-iH\epsilon}]e^{-iH\epsilon} + W_\epsilon^{N-1}[W_\epsilon - e^{-iH\epsilon}]\end{aligned} \tag{24}$$

Der Ausdruck in den eckigen Klammern [..] kann mithilfe von Gleichung (23) ausgedrückt werden. Die Terme enstsprechen $-\mathcal{O}(\epsilon^3)$. Wird nun der Grenzfall $N \to \infty$ betrachtet, so folgt:

$$(e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0+V(x))\epsilon})^N = \lim_{N\to\infty}(e^{-\frac{i}{\hbar}V\frac{\epsilon}{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\epsilon}e^{-\frac{i}{\hbar}V\frac{\epsilon}{2}})^N \tag{25}$$

[1] entnommen aus [2] S.5

5 Literaturverzeichnis

[1]Gernot Münster: Quantentheorie, 2te Auflage, de Gruyter (2010)
[2]L. S. Schulman: Techniques and Applications of Path Integration, John Wiley (1981)
[3]Richard MacKenzie: Path Integral Methods and Applications, Lectures given in (2000)
http://arxiv.org/abs/quant-ph/0004090