

Das Pfadintegral in der Quantenmechanik

Oleg Buller

Zusammenfassung des Vortrags vom 10. Juni 2009

1 Einleitung

Der Pfadintegralformalismus ist eine zum Schrödinger- und Heisenberg-Bild äquivalente Beschreibung der Quantenmechanik. Er wurde von Richard Philipp Feynman mit Hilfe früherer Arbeiten von Paul A. M. Dirac im Jahre 1948 entwickelt. Die Arbeit von Feynman erhielt zunächst wenig Beachtung, weil zum Einen seine Formulierung ein mathematisch nur schwer fassbares, unendlich dimensionales Integral enthielt und der Umgang damit zunächst unklar war, und zum Anderem die bis dahin bekannten Beschreibungen der Quantenmechanik sich bei den, bis zu dem Zeitpunkt aufkommender Problemen, gut bewährt hatten. Erst die Formulierung von (komplizierten) Feldtheorien zeigte den wertvollen Nutzen des Pfadintegrals. Der von Feynman eingeführte Formalismus stützt sich an die Lagrange'sche Formulierung der klassischen Mechanik und insbesondere an das Hamiltonsche Prinzip, darum folgt zunächst eine kurze Wiederholung aus der Analytischen Mechanik.

2 Lagrange Formalismus

In der Analytischen Mechanik werden generalisierte Koordinaten $q = (q_1, \dots, q_n)$ für ein System mit n Freiheitsgraden eingeführt. Hier soll insbesondere auf das Variationsprinzip (Integralprinzip) eingegangen werden, bei dem Bahnkurven, die zwischen den Zeitpunkten t_1 und t_2 ($t_1 < t_2$) verlaufen, verglichen werden. Ist $L(q, \dot{q}, t) = T - V$ (T : kinetische Energie, V : potenzielle Energie) die Lagrangefunktion des Systems, so zeichnet sich die tatsächlich durchlaufene Kurve dadurch aus, dass das Wirkungsintegral

$$S[q_i(t)] \equiv \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt \quad i = 1, \dots, n \quad (1)$$

extremal wird. S ist ein Funktional, das jeder möglichen Bahnkurve $q(t) = (q_1(t), \dots, q_n(t))$ einen Zahlenwert zuordnet.

Derartige Formulierung enthält die gesamte klassische Mechanik und ist von der Wahl des Koordinatensystems unabhängig. Um aus diesem Prinzip die Bewegungsgleichung abzuleiten, betrachten wir die Variation der Wirkung. Für den realisierten Weg verschwindet sie (S wird extremal)

$$\delta S[q_i] = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt = 0. \quad (2)$$

Mit Betrachtung von infinitesimalen und instantan stattfindenden ($\delta t = 0$) Variationen δx einer beliebigen Bahnkurve $x(q_1, \dots, q_n, t)$ mit der Nebenbedingung $\delta x(t_1) = \delta x(t_2) = 0$, siehe

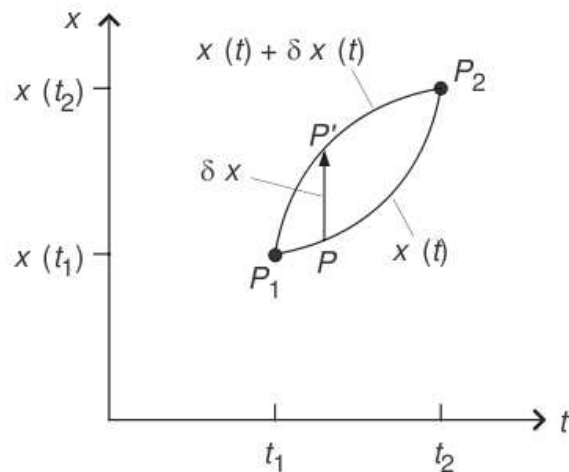


Abbildung 1: Variation des Weges

Abb. 1, ergibt sich für die Variation δS bei der Wahl der Bahnkurve \bar{x} für die die Wirkung extremal wird

$$\delta S = S[\bar{x} + \delta x] - S[\bar{x}] = 0.$$

Bei einer beliebigen Wahl der Kurve gilt mit der Definition der Wirkung (Gl. (1))

$$S[x + \delta x] = \int_{t_1}^{t_2} L(x + \delta x, \dot{x} + \delta \dot{x}, t) dt$$

Die Lagrange-Funktion lässt sich linear um x entwickeln

$$\begin{aligned} S[x + \delta x] &= \int_{t_1}^{t_2} \left\{ L(x, \dot{x}, t) + \frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \right\} dt \\ &= S[x] + \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \right\} dt \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich für die Variation der Wirkung mit Anwendung der partiellen Integration (auf zweiten Summanden) und Berücksichtigung der Nebenbedingung

$$\delta S = \underbrace{\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \right]_{t_1}^{t_2}}_{=0} - \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} \right\} \delta x.$$

Für den realisierten Weg gilt mit der Umschrift auf generalisierte Koordinaten $\delta x = \sum_{i=1}^n \frac{\partial x}{\partial q_i} \delta q_i$

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} \right\} \delta q_i = 0.$$

Dies soll für beliebige voneinander unabhängige Variationen δq_i gelten, damit erhalten wir die Euler-Lagrange Gleichung 2. Art:

$$\boxed{\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0} \quad i = 1, \dots, n \quad (3)$$

3 Pfadintegral

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik ist in der Quantenmechanik kein Weg ausgezeichnet, vielmehr tragen hier "alle" möglichen Wege bei. Betrachtet man zum Beispiel Elektronen die auf einen geeigneten Doppelspalt geschossen werden (siehe Abb. 2 a), so kann ein Interferenzmuster auf dem Schirm beobachtet werden. Würde man irgendwie herausfinden welchen Spalt das Elektron passiert, so würden das Interferenzmuster verschwinden und durch die klassisch zu erwartende Verteilung ersetzt werden.

Tauscht man den Spalt durch ein bzw. mehrere Gitter aus, so müssten nun mehr Wege be-

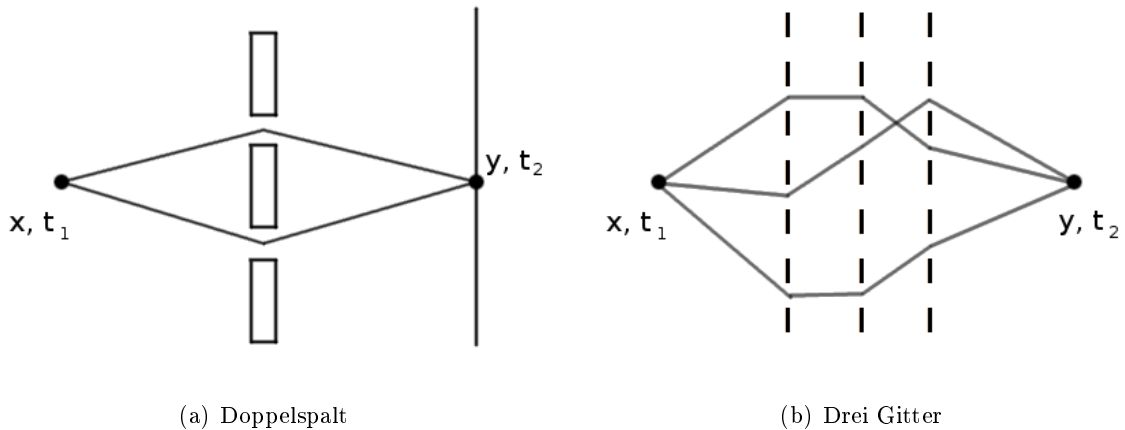


Abbildung 2: Entstehung von Interferenz durch Unkenntnis des durchlaufenen Pfads

rücksichtigt werden, vgl. Abb. 2 b. Um für den allgemeinen Fall eine Übergangsamplitude von x nach y zu berechnen, müssen alle Wege für den Grenzfall von unendlich vielen Gittern mit unendlich vielen Spalten berücksichtigt werden, dies entspricht weitestgehend dem Prinzip des Pfadintegrals. Es bleibt noch die Frage in welchem Maße die einzelnen Wege zur Übergangsamplitude beitragen. Vorab sei hier bereits erwähnt, dass die klassische Wirkung dabei eine nicht unwesentliche Rolle spielt. Im nächsten Abschnitt möchten wir uns der mathematischen Herleitung des Pfadintegrals aus dem Schrödinger-Bild widmen.

3.1 Herleitung

Die Übergangsamplitude vom Ort x zur Zeit $t_1 = 0$ zum Ort y zur Zeit $t_2 = t$ ist im Schrödinger-Bild über den Erwartungswert des Zeitentwicklungsoperators $U(t)$ gegeben durch

$$\langle y|U(t)|x\rangle. \quad (4)$$

Der Einfachheit halber betrachten wir hierbei einen zeitunabhängigen Hamilton-Operator und setzen für die Rechnung $\hbar = 1$. Im Fall eines zeitabhängigen Hamilton-Operators ist die Rechnung etwas aufwendiger, sie erfolgt aber nach dem gleichen Prinzip und man gelangt zu einem ähnlichen Ergebnis. Damit gilt für die Übergangsamplitude

$$\langle y|U(t)|x\rangle = \langle y|e^{-iHt}|x\rangle \quad (5)$$

3.1.1 Freies Teilchen

Die Übergangsamplitude für ein freies Teilchen $H = H_0 = \frac{p^2}{2m}$ ist exakt berechenbar und wird sich für den allgemeinen Fall als nützlich erweisen. Mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation

$\int dp |p\rangle\langle p| = 1$ wird das Problem in den Impulsraum überführt

$$\langle y|e^{-iHt}|x\rangle = \int dp \langle y|p\rangle e^{-iHt} \langle p|x\rangle = \frac{1}{2\pi} \int dp e^{-i\frac{p^2}{2m}t} e^{ip(y-x)} \quad (6)$$

wobei für das Skalarprodukt $\langle y|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipy}$ eingesetzt wurde. Dieses Integral kann analytisch berechnet werden, mit

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a}{2}x^2+bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}}$$

erhält man als Lösung für die Übergangsamplitude eines freien Teilchens

$$\boxed{\langle y|e^{-iH_0t}|x\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar it}} e^{i\frac{m}{2\hbar t}(y-x)^2}} \quad (7)$$

3.1.2 Teilchen im Potential

Nun betrachten wir ein Teilchen im Potential V , der Hamilton-Operator lautet dann

$$H = \frac{p^2}{2m} + V = H_0 + V. \quad (8)$$

Die Übergangsamplitude kann für diesen Fall nicht allgemein gelöst werden, da H_0 und V keine kommutierenden Größen sind, gilt $e^{-i(H_0+V)t} \neq e^{-iH_0t}e^{-iVt}$. Für kleine Zeiten $t = \varepsilon$ kann dieser Term jedoch entwickelt

$$U_\varepsilon \equiv e^{-i(H_0+V)\varepsilon} = e^{-iV\frac{\varepsilon}{2}} e^{-iH_0\varepsilon} e^{-iV\frac{\varepsilon}{2}} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \equiv W_\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^3). \quad (9)$$

und die Übergangsamplitude für W_ε berechnet werden:

$$\begin{aligned} \langle y|W_\varepsilon|x\rangle &= e^{-iV(y)\frac{\varepsilon}{2}} \langle y|e^{-iH_0\varepsilon}|x\rangle e^{-iV(x)\frac{\varepsilon}{2}} \\ &\stackrel{\text{mit Gl. (7)}}{=} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\varepsilon}} \exp\left\{i m \frac{(y-x)^2}{2\varepsilon} - i\varepsilon \frac{V(y)+V(x)}{2}\right\} \end{aligned} \quad (10)$$

Wenn wir jetzt das ursprüngliche t -Intervall in N Teilstücke der Dauer ε aufteilen, also $t = N \cdot \varepsilon$,

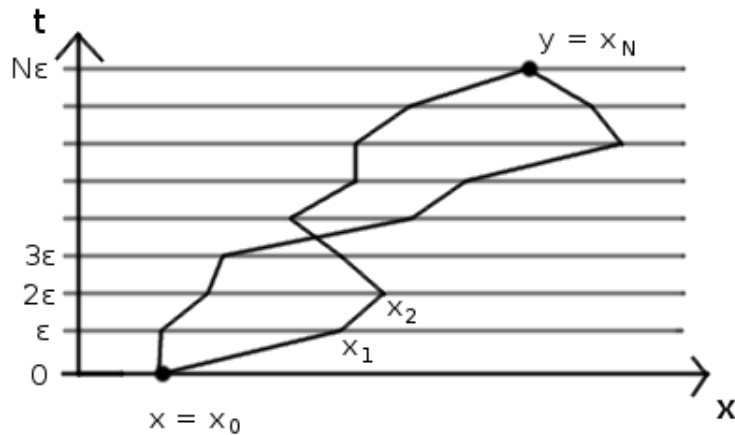


Abbildung 3: Aufteilung des Weges in kleine Schritte

so können wir jeweils die Übergangsamplituden der Teilschritte

$$\langle x_i | U(\varepsilon) | x_{i+1} \rangle \quad i = 0, \dots, N-1$$

berechnen, vgl. Abb. 3. Mit Ausnutzung von

$$e^{-iHt} = (e^{-iH\varepsilon})^N = \lim_{N \rightarrow \infty} (W_\varepsilon)^N \quad (\text{Lie-Kato-Trotter-Produktformel}) \quad (11)$$

und $N-1$ maligen Einfügen der Vollständigkeitsrelation $\int dx |x\rangle\langle x|$ lassen sich folgende Umformungen durchführen:

$$\begin{aligned} \langle y | e^{-iHt} | x \rangle &= \langle y | (e^{-iH\varepsilon})^N | x \rangle \\ &= \int \cdots \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \langle x_N | e^{-iH\varepsilon} | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | e^{-iH\varepsilon} | x_{N-2} \rangle \cdots \langle x_1 | e^{-iH\varepsilon} | x_0 \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \cdots \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \langle x_N | W_\varepsilon | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | W_\varepsilon | x_{N-2} \rangle \cdots \langle x_1 | W_\varepsilon | x_0 \rangle \\ &\stackrel{\text{mit Gl. (10)}}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int \cdots \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \exp \left\{ i \frac{m}{2\varepsilon} [(x_1 - x_0)^2 + (x_2 - x_1)^2 + \cdots \right. \\ &\quad \left. + (x_N - x_{N-1})^2] - i \varepsilon \left[\frac{V(x_0) + V(x_1)}{2} + \frac{V(x_1) + V(x_2)}{2} + \cdots + \frac{V(x_{N-1}) + V(x_N)}{2} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Der Ausdruck im Exponenten lässt zusammenfassen zu

$$S_\varepsilon \equiv \sum_{k=1}^N \varepsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right)^2 - \frac{V(x_k) + V(x_{k+1})}{2} \right].$$

Für den Grenzwert $N \rightarrow \infty$ (bzw. $\varepsilon \rightarrow 0$) geht die Summe in ein Integral über

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

Im Exponenten taucht die aus dem Lagrange-Formalismus bekannte klassische Wirkung auf. Mit $\mathcal{D}x \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} dx_1 \cdots dx_{N-1}$ lässt sich das Ergebnis der Rechnung durch

$$\boxed{\langle y | e^{-i\frac{H}{\hbar}t} | x \rangle = \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}} \quad (12)$$

zusammenfassen. Wir erhalten ein unendlich dimensionales Integral über alle möglichen Wege, die das Teilchen zurücklegen kann. Jedem Pfad wird eine Phase zugewiesen ($e^{\frac{i}{\hbar}S}$ oszillierende Funktion;)¹.

3.2 Eigenschaften

Diese Formulierung der Quantenmechanik weist folgende Merkmale auf:

- Im Allgemeinen wird der Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ erst nach der Integralbildung durchgeführt

¹vgl. auch Zeigerdarstellung der Quantenmechanik z. B. bei Erklärung von Interferenzerscheinungen beim Doppelspalt oder Gitter

- Die so formulierte Quantenmechanik enthält keine Operatoren und keine Vektoren des Hilbert-Raums mehr
- Es kommen nur noch kommutierende Größen vor
- Die hier hergeleitete Form des Pfadintegrals gilt nur für Bosonen, für Fermi-Teilchen müssen weitere Annahmen gemacht werden (Grassmann-Variablen)
- Keine Konvergenz, da über eine oszillierende Funktion integriert wird;
Abhilfe: Einführung der euklidischen Zeit $t = -i\tau$, so werden stark oszillierende (lange) Wege gedämpft (siehe auch Kap. 3.3)

3.3 Klassischer Grenzfall

Für klassische und damit makroskopische Teilchen kann in guter Näherung für die Variation zwischen zwei Pfaden $\delta S \gg \hbar$ angenommen werden. Damit unterscheiden sich die Phasen benachbarter Wege ($e^{\frac{i}{\hbar}S_0}$ und $e^{\frac{i}{\hbar}(S_0+\delta S)}$) im Allgemeinen stark von einander, beim Summieren über die Pfade heben sie sich auf, es kommt zur destruktiven Interferenz. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens in diesem Bereich geht gegen Null. Ist ein Pfad gegeben für den $\delta S = 0$ gilt, so haben die benachbarten Wege die gleiche Phase, es kommt zur konstruktiven Interferenz. Im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ existiert nur ein Weg mit einer Aufenthaltswahrscheinlichkeit ungleich Null, für diesen gilt $\delta S = 0$ und dies entspricht geradewegs dem Hamiltonschen Prinzip.

4 Quellen

- G. Münster, Quantentheorie, de Gruyter 2006
- R. P. Feynman, A. R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill, 1965
- Reineker, Peter/ Schulz, Michael / Schulz, Beatrix Mercedes, Theoretische Physik IV Quantenmechanik 2, Wiley-VCH, 2008
- T. Kuhn, Vorlesung Physik I WS06/07 Kap. 5 Analytische Mechanik
- C. Falter, Vorlesung Mechanik und dynamische Systeme WS07/08, Kap. 6.3: Hamilton'sches Wirkungsprinzip und Quantenmechanik