

Einführung in den Pfadintegralformalismus

Zusammenfassung zum Seminarvortrag vom 21.04.2010

1) Pfade in der Quantenmechanik

Es mag zunächst überraschen, dass es einen quantenmechanischen Formalismus gibt, der auf der Betrachtung von Pfaden basiert. Wer sich etwas mit der Quantenmechanik beschäftigt hat, der weiß, dass der Begriff des Pfades bzw. der Bahn in diesem Zusammenhang nicht ganz unproblematisch ist. Vielmehr ist es ein zentraler Aspekt der Quantenmechanik, dass die Bahn eines Teilchens unter bestimmten Umständen nicht angegeben werden kann. Wie ist also hier die Bezugnahme auf Pfade zu verstehen?

Als Motivation des quantenmechanischen Pfadgedankens ist die nachstehende Skizze geeignet:

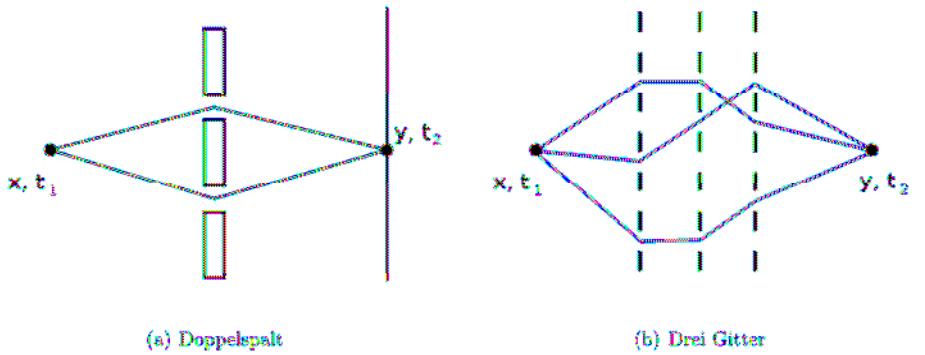


Abb. 1: Entstehung von Interferenz durch Unkenntnis des durchlaufenen Pfads.
 Aus: Oleo Rüller Das Pfadintegral in der Quantenmechanik

Beim Doppelspaltexperiment (1a) ist die Angabe der vom Teilchen durchlaufenen Bahn nicht möglich. Es startet zu einer bestimmten Zeit t_1 am Ort x und wird zur Zeit t_2 am Ort y detektiert. Allerdings kann man unter Vernachlässigung von Tunneleffekten zwei Arten von möglichen Pfaden unterscheiden, nämlich jene, die durch den oberen, und die, die durch den unteren Spalt zum Zielort führen. Will man diese Bahnen genauer charakterisieren, so kann man dies durch eine Erhöhung der Spalte und der Blenden erreichen. Auf diese Weise kann man zwar immer noch nicht angeben, welches die tatsächlich durchlaufene Bahn des Teilchens ist. Aber man kann die Wahrscheinlichkeit betrachten, mit der ein Teilchen auf dem Weg von x nach y einen bestimmten Pfad entlang läuft. Die Übergangswahrscheinlichkeit von x nach y ergibt sich dann aus der Summe der Beiträge aller möglichen Pfade. Das ist die Funktionsweise des Pfadintegrals. In dem eben beschriebenen Gedankengang ist natürlich nur das Prinzip veranschaulicht. Eine genauere Betrachtung schließt sich in Abschnitt 5 an.

2) Zum Hintergrund

Eine erste Idee, die auf Pfadintegrale hätte führen können, wurde 1933 von Dirac vorgestellt. Der Physiker betrachtete die Wirkung ($S(x) = \int dt' L(x(t'), dx(t')/dt')$ mit L als der Lagrange-Funktion) aus der klassischen Mechanik. Diese charakterisiert mögliche Pfade und legt nach dem Hamilton'schen Prinzip auch die tatsächlich durchlaufene Bahn eines Teilchens fest. Dirac fiel auf, dass die zentrale Bedeutung, die der Größe damit in der klassischen Mechanik zukommt, im krassen Gegensatz zu ihrer Rolle in der Quantenmechanik stand, in der sie praktisch bedeutungslos war. Er äußerte daraufhin den Verdacht, dass der Zeitentwicklungsoperator, der den Übergang zwischen zwei Zuständen beschreibt, über $e^{i\hat{S}}$ mit der Wirkung zusammen hängen könne.

Der eigentliche Pfadintegralformalismus wurde 1948 von Feynman hergeleitet. Es stellte sich heraus, dass dieser Formalismus in die bekannte Wellenmechanik überführt werden konnte. Allerdings fanden Feynmans Ideen zunächst wenig Beifall, da sich die wellenmechanische Herangehensweise bei den damals aktuellen Problemen als einfacher herausstellte.

Im Folgenden soll der Pfadintegralformalismus ausgehend von der Wellenmechanik hergeleitet werden.

3) Ausgangssituation und Ansatz

Wie bereits im ersten Abschnitt angedeutet, wird von der Situation ausgegangen, dass ein Teilchen sich am Ort x befindet (nehmen wir an zur Zeit $t = 0$) und von dort irgendwie zum Ort y gelangt, wo es zum Zeitpunkt $t = t_1$ detektiert wird. Zu betrachten ist dementsprechend die Übergangswahrscheinlichkeit für den ersten Zustand in den zweiten, beziehungsweise die Übergangsamplitude, aus der die gesuchte Wahrscheinlichkeit per Betragsquadratsbildung berechnet werden kann. Bezeichnet man die betreffenden Zustände mit Ψ , so kann der Übergang $\Psi(0) \rightarrow \Psi(t)$ ausgedrückt werden durch:

$$|\Psi\rangle_t = U(t) |\Psi\rangle_0 \quad (1)$$

Dabei ist U ein Zeitentwicklungsoperator. Mit ihm muss die zeitabhängige Schrödingergleichung erfüllbar sein, daher bietet sich der Ansatz

$$U(t) = \exp(iHt) \quad (2)$$

mit H als dem Hamiltonoperator an. Dabei fehlt offensichtlich ein $1/\hbar$ im Exponenten. Um die nachfolgenden Ausdrücke übersichtlicher zu gestalten, wurde $\hbar = 1$ gesetzt.

Die Betrachtung in der Ortsbasis erfolgt durch Skalarmultiplikation mit dem Ort:

$$\langle y | \Psi \rangle_t = \langle y | U(t) | \Psi \rangle_0$$

Die rechte Seite dieses Ausdrucks multiplizieren wir außerdem mit der Vollständigkeitsrelation bezüglich des Ausgangspunktes: $\mathbf{1} = \int dx |x\rangle \langle x|$. Man beachte, das es sich hierbei, wie durch die fett gedruckte 1 angedeutet, um einen Operator handelt. Es ergibt sich:

$$\langle y | \Psi \rangle_t = \int dx \langle y | U(t) | x \rangle \langle x | \Psi \rangle_0$$

bzw.

$$\Psi(y, t) = \int dx \langle y | U(t) | x \rangle \Psi(x, 0)$$

Dementsprechend ist

$$G = \langle y | U(t) | x \rangle \quad (3)$$

die Greensche Funktion zur zeitabhängigen Schrödingergleichung und damit die gesuchte Übergangsamplitude.

4) Übergangsamplitude eines freien Teilchens

Im Hinblick auf die mögliche Strategie, die Berechnung komplizierterer Übergangsamplituden durch Näherungen auf einfachere Ergebnisse zurückzuführen, soll nun zunächst der Fall des freien Teilchens diskutiert werden. Wir gehen von Gl.(3) aus, wobei wir den Ansatz für U aus Gl.(2) und den Hamiltonoperator $H = H_0 = p^2/2m$ verwenden. Dementsprechend ist die Gleichung

$$G = \langle y | \exp(-ip^2t/2m) | x \rangle$$

zu lösen. Es erweist sich als hilfreich, das Problem durch Multiplikation mit der Vollständigkeitsrelation $\mathbf{1} = \int dp |p\rangle \langle p|$ in den Impulsraum zu überführen.

$$G = \int dp \langle y | p \rangle \exp(-ip^2t/2m) \langle p | x \rangle$$

Es ist bekannt, dass $\langle y | p \rangle = (2\pi\hbar)^{1/2} \cdot e^{-ipy}$ ($\langle p | x \rangle$ entsprechend). Also gilt:

$$G = 1/(2\pi) \cdot \int dp \exp(-ip^2t/2m) \cdot e^{ip(y-x)} \quad (4)$$

Dies ist ein Integral Gauß'scher Form. Erweitert man die klassische Form

$$\int dx e^{-x^2/2} = (2\pi)^{1/2}$$

durch Variablentransformation um einen Vorfaktor a und durch quadratische Ergänzung um einen zusätzlichen linearen Term bx , so gilt

$$\int dx e^{-ax^2/2 + bx} = (2\pi/a)^{1/2} \cdot e^{b^2/2a}$$

Gleicht man die verwendeten Parameter an die Größen in Gl.4 an, so erhält man

$$G = \langle y | e^{-iH_0 t} | x \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\epsilon}} e^{i\frac{m}{2\epsilon}(y-x)^2} \quad (5)$$

5) Das Teilchen im Potential

Erwartungsgemäß erweist sich die Behandlung des Teilchens im Potential mit $H = H_0 + V(x)$ als komplizierter. H_0 und $V(x)$ kommutieren nicht, daher gilt:

$$e^{-i(H_0+V)t} \neq e^{-iH_0 t} \cdot e^{-iVt}$$

Berücksichtigt man die mathematische Definition der e-Funktion $e^{\alpha} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \alpha^m$, ist dies leicht einsehbar. Deshalb muss eine Approximation für kleine Zeiten $t = \epsilon$ verwendet werden.

$$U_\epsilon = \exp[-i(H_0+V)\epsilon] = e^{-iV\epsilon/2} \cdot \exp(-iH_0\epsilon) \cdot e^{-iV\epsilon/2} + O(\epsilon^3) = W_\epsilon + O(\epsilon^3)$$

Dabei ist O der mit ϵ^3 verschwindende Restterm und W_ϵ eine aus praktischen Gründen eingeführte Abkürzung für das Produkt aus den e-Funktionen. Die Übergangsamplitude für W_ϵ kann nun leicht berechnet werden:

$$\langle y | W_\epsilon | x \rangle = \langle y | e^{-iV\epsilon/2} \cdot \exp(-iH_0\epsilon) \cdot e^{-iV\epsilon/2} | x \rangle = e^{-iV(y)\epsilon/2} \cdot \langle y | \exp(-iH_0\epsilon) | x \rangle \cdot e^{-iV(x)\epsilon/2}$$

Darin finden wir die bereits berechnete Übergangsamplitude des freien Teilchens (Gl.5) wieder. Insgesamt ist also:

$$\langle y | W_\epsilon | x \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\epsilon}} \exp\left\{i\frac{m}{2\epsilon}(y-x)^2 - i\frac{\epsilon}{2}[V(y) + V(x)]\right\} \quad (6)$$

Nun ist aber für beliebige Anfangs- und Endpunkte nicht gewährleistet, dass ϵ tatsächlich klein ist. Dementsprechend müssen wir das Zeitintervall in kleine Stücke einteilen. Wir setzen $\epsilon = t/N$. An dieser Stelle erkennt man übrigens eine Analogie zu den in Abschnitt 1 angestellten Überlegungen erkennen: Durch die Einteilung der Zeit in kleine Stücke wird automatisch auch der zurückgelegte Weg in Abschnitte eingeteilt, analog zu einer Erhöhung der Spalt- bzw. Blendenzahl. Für die Berechnung der Übergangsamplitude ergeben sich die folgenden Modifikationen:

$$e^{-iHt} = (e^{-iH\epsilon})^N = W_\epsilon^N + O(\epsilon^2)$$

(Durch $[W_\epsilon + O(\epsilon^3)]^N$ geht der vernachlässigbare Restterm O nur noch proportional ϵ^2 gegen 0)

$$e^{-iHt} = \lim_{N \rightarrow \infty} W_\epsilon^N$$

Daraus folgt:

$$\langle y | e^{-iHt} | x \rangle = \langle y | (e^{-iH\epsilon})^N | x \rangle$$

Um diesen Ausdruck auszuwerten, verwenden wir wiederum die Vollständigkeitsrelation $\mathbf{1} = \int dy_i | y_i \rangle < y_i |$. Allerdings muss diesmal die bereits erwähnte Einteilung der Strecke in kleine, den Zeitintervallen der Länge ϵ entsprechende Stücke berücksichtigt werden. Man multipliziert dementsprechend für jeden der Faktoren des Zeitentwicklungsoperators mit einer Vollständigkeitsrelation, wobei die Indizes i von 1 bis $N-1$ laufen. Das Ergebnis sieht dann so aus:

$$\langle y | e^{-iHt} | x \rangle = \int dy_1 \dots dy_{N-1} \langle y | e^{-iH\epsilon} | y_1 \rangle \cdot \langle y_1 | e^{-iH\epsilon} | y_2 \rangle \cdot \dots \cdot \langle y_{N-1} | e^{-iH\epsilon} | x \rangle$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \int dy_1 \dots dy_{N-1} \langle y | W_\varepsilon | y_1 \rangle \cdot \langle y_1 | W_\varepsilon | y_2 \rangle \cdot \dots \cdot \langle y_{N-1} | W_\varepsilon | x \rangle$$

Die Ergebnisse für die einzelnen Faktoren folgen aus Gl. 6, sodass

$$\langle y | e^{-iHt} | x \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int dy_1 \dots dy_{N-1} \exp \left[i \frac{m}{2\varepsilon} [(y-y_1)^2 + \dots + (y_{N-1}-x)^2] - i\varepsilon \left[\frac{1}{2} V(y) + V(y_1) + \dots + V(y_{N-1}) + \frac{1}{2} V(y) \right] \right]$$

Der Ausdruck im Exponenten lässt sich umformulieren:

$$S_\varepsilon = \sum_{k=1}^N \varepsilon \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{y_k - y_{k-1}}{\varepsilon} \right)^2 - \frac{V(y_k) + V(y_{k-1})}{2} \right\}$$

Lässt man nun $N \rightarrow \infty$ gehen, so wird daraus

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

Wir erkennen darin die klassische Wirkung mit dem Lagrange-Operator für das Teilchen im Potential! Wie bereits in Abschnitt 2 angedeutet, charakterisiert sie mögliche Pfade, und wir sehen, dass sie im Exponenten der verschiedenen e-Funktionen auftritt, womit sich Diracs Vermutung bestätigt.

Verkürzend schreibt man für die Übergangsamplitude:

$$\langle y | e^{-iHt} | x \rangle = \int Dy e^{iS(y)} \quad (7)$$

wobei die Anfangs- und Endkoordinaten (x, y) vorgegeben sind und

$$Dy = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} dy_1(t_1) \dots dy_{N-1}(t_{N-1})$$

ist. Der Limes wird nach der Integration ausgeführt. Der Ausdruck in Gl. 7 ist das gesuchte Pfadintegral. Wichtig ist in diesem Zusammenhang, sich klar zu machen, dass es die quantenmechanische Übergangsamplitude ohne Rückgriff auf Wellenfunktionen oder Operatoren beschreibt. Es gehen nur „klassische“ Rechenoperationen ein, in der Hauptsache Integralrechnung. Die Komplexität des Sachverhalts kann jedoch insofern nicht umgangen werden, als dass das Pfadintegral unendlichdimensional ist, wie an der Definition von Dy abzulesen.

6) Das Pfadintegral im klassischen Grenzfall

Beschäftigt man sich in der klassischen Mechanik mit der Wirkung (zur Erinnerung: $S(x) = \int dt' L(x(t')), dx(t')/dt'$) mit L als der Lagrange-Funktion), so wird man ihren primären Nutzen darin finden, dass über das Hamiltonsche Prinzip festgestellt werden kann, welche von allen möglichen Bahnen ein Teilchen durchlaufen wird. Das entscheidende Kriterium dabei ist, dass für den klassischen Pfad die Wirkung extremal (bzw., genauer formuliert, stationär) wird. Eine Variation der Wirkung müsste also verschwinden: $\delta S(x) = 0$. Diskutiert man diesen Fall für eine Variation des Weges $x(t') \rightarrow x(t') + \lambda(t')$, so findet man, dass die Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0$$

erfüllt sein muss. Wie passt das jedoch mit dem Pfadintegralformalismus zusammen? Wie in Gl. 7 abzulesen, geht die Wirkung als Exponent einer komplexen e-Funktion ein. Es liegt dementsprechend eine Oszillation der Übergangswahrscheinlichkeit vor, in der die Wirkung die Phase, nicht aber die Amplitude beeinflusst. Die

Lösung dieses Problems liegt in den auftretenden Interferenzerscheinungen. Variiert man wie oben beschrieben den Weg um $\lambda(t')$, wobei λ klein ist, so kann man die resultierende Wirkung durch Taylorentwicklung untersuchen:

$$S(x') = S(x+\lambda) = S(x) + \int dt' \lambda [\delta S(x)/dx(t')] + O(\lambda^2)$$

Der kombinierte Beitrag von $S(x)$ und $S(x')$ zur e-Funktion wäre also:

$$A \approx e^{iS/\hbar} (1 + \exp [(i/\hbar) \cdot \int dt' \lambda [\delta S(x)/dx(t')]]),$$

wobei $\int dt' \lambda [\delta S(x)/dx(t')]/\hbar$ die Phasenverschiebung beschreibt. Wenn \hbar groß gegen den durch die klassische Wirkung bestimmten Zähler dieses Ausdrucks ist, ist die Phasenverschiebung in jedem Fall klein und keine Gruppe von Pfaden ist ausgezeichnet. Nimmt die Wirkung hingegen makroskopische Größenordnungen an, treten in der Regel größere Phasenverschiebungen und damit *destruktive Interferenz* zwischen den betrachteten Pfaden auf. Die Ausnahme bilden hier Pfade, für die das Hamiltonsche Prinzip erfüllt ist. Ist $\delta S(x) = 0$, verschwindet die Phasenverschiebung und man erhält *konstruktive Interferenz* für den klassischen Pfad und seine direkten Nachbarn.

7) Fazit und Ausblick

Es ist also festzuhalten, dass es sich beim Pfadintegralformalismus um eine alternative Formulierung der Quantenmechanik handelt, die zwar äquivalent zur Wellenmechanik ist, aber auf aus der klassischen Mechanik bekannte Größen und Rechenanwendungen zurück greift. Anstatt mit Wellenfunktionen und Operatoren zu arbeiten, wird hauptsächlich auf Integralrechnung zurück gegriffen, um die Übergangswahrscheinlichkeit eines Teilchens zwischen zwei vorgegebenen Orten darzustellen. Die grundsätzliche Komplexität des Problems bleibt dabei jedoch durch die unendlich vielen Dimensionen des zu lösenden Integrals $\langle y | e^{-iHt} | x \rangle = \int dy e^{iS(y)}$ erhalten.

Wo liegen also die Vorteile dieser alternativen Formulierung?

Dazu ist zu sagen, dass der Nutzen des Pfadintegrals stark mit der zu lösenden Problemstellung korreliert. Bereiche, in denen sich die Arbeit mit Pfadintegralen als nützlich beziehungsweise unerlässlich erwiesen hat, sind vor allem die Folgenden, wie von Gernot Münster zusammengefasst:

- Tunnelprozesse (systematischere Behandlung möglich)
- Feld- und Eichtheorien:
 - manifest lorentzkovariante Quantisierungen
 - Feynmanregeln
 - halbklassische Approximation
 - nicht-störungstheoretische Methoden

Quellen

Gernot Münster. Quantentheorie. Berlin: deGruyter, 2006

Richard McKenzie. Path Integral Methods and Applications. 24.04.2000.
http://xxx.lanl.gov/PS_cache/quant-ph/pdf/0004/0004090v1.pdf

Thomas Kintscher. Der Pfadintegralformalismus. Ein alternativer Ansatz in der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Humboldt-Universität Berlin 20.01.2010. <http://pha.physik.hu-berlin.de/lehre/SemTP910/kintscher.pdf>

Oleg Buller. Das Pfadintegral in der Quantenmechanik 10.06.2009. <http://pauli.uni-muenster.de/tp/fileadmin/lehre/teilchen/ss09/PfadintegralQM.pdf>