Das Pfadintegral in der Quantenmechanik

Thomas Vöcking

19.04.2000

1 Rückblick: Die kanonische Darstellung der Quantenmechanik

Der Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik vollzieht sich in erster Linie dadurch, daß die Koordinaten (des Phasenraums) durch lineare Operatoren ersetzt werden. Zu diesen Operatoren werden Eigenzustände eingeführt:

$$\begin{aligned} \widehat{q}_s \left|q\right\rangle &= q \left|q\right\rangle \\ \widehat{p}_s \left|p\right\rangle &= p \left|p\right\rangle \end{aligned}$$

Diese Eigenzustände bilden jeweils ein vollständiges Orthonormalsystem.
Der Impulseigenzustand in Ortsdarstellung liefert eine ebene Welle:

$$\left\langle q \right|p\rangle = \exp\left(\frac{ipq}{\hbar}\right)$$

Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion folgt aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung zu $\left|\psi\left(t\right)\right\rangle_s = \exp\left(-\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}\right)\left|\psi\left(0\right)\right\rangle_s$.

Im Heisenbergbild (das für die Übertragung zum Pfadintegral wichtiger ist) werden die Operatoren zeitabhängig, während jetzt die Wellenfunktion zeitlich konstant ist.

Dementsprechend wird eine neue Bewegungsgleichung benötigt:

$$-i\hbar\,\dot{\widehat{q}}_H = \left[\widehat{H}, \widehat{q}_H\right]$$

Außerdem werden neue Eigenzustände eingeführt:

$$\widehat{q}_H\left(t\right)\left|q,t\right\rangle = q\left|q,t\right\rangle \text{mit} \left|q,t\right\rangle = \exp\left(\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}\right)\left|q\right\rangle$$

2 Das Pfadintegral

2.1 Die Idee des Pfadintegrals

Die Schrödingergleichung unterliegt einem Differentialprinzip, d. h. der Wert der Wellenfunktion an einem Punkt in Raum und Zeit wird durch die Werte an den Nachbarpunkten bestimmt. Ein Integralprinzip zeichnet sich dadurch aus, daß es alle Werte der gesuchten Funktion gleichzeitig ausrechnet. Im Prinzip kann man diese Prinzipien ineinander umwandeln, denn ein Integralprinzip gilt für jeden endlichen Abschnitt, so daß durch

Grenzwertbildung ein Differentialprinzip entsteht. Durch die Methode der Greenschen Funktionen kann man wiederum ein Differentialprinzip in ein Integralprinzip umwandeln. Da das gewünschte Differentialprinzip bereits mit der Schrödingergleichung vorliegt, kann die letztere Methode angewandt werden. Zunächst soll jedoch das Prinzip selbst erklärt werden.

Der Aufbau der Quantenmechanik erfordert die Gewöhnung an völlig neue Grundprinzipien und ist hierbei eine stärkere Umwälzung als die Relativitätstheorie. Alleine schon die Unschärferelation bricht mit der gesamten bisherigen Physik seit Galilei. Das Prinzip, dem das Pfadintegral zugrunde liegt, ist wiederum ein völlig anderes, an das man sich vielleicht sogar einfacher gewöhnen kann. Die Idee ist folgende: Wenn die zeitliche Entwicklung eines Systems untersucht werden soll,

d. h. der Propagator berechnet werden muß, wird zunächst Anfangs- und Endpunkt in Ort und Zeit festgehalten. Dann werden alle Wege zwischen den Punkten, die dabei nicht differenzierbar zu sein brauchen, auf eine bestimmte Weise "addiert", und heraus kommt der Propagator. Entscheidend ist hierbei, daß "mögliche" oder "wahrscheinliche" Wege a priori überhaupt nicht ausgezeichnet sind. Sollten sie eine Vorrangstellung haben, wird diese also nicht mehr postuliert, sondern kann berechnet werden.

2.2 Die Herleitung des Pfadintegrals

Ausgegangen wird vom Heisenbergbild: Der Anfangszustand sei $|q,t\rangle$, der Endzustand $|q',t'\rangle$. Wie sieht jetzt der Propagator zwischen ihnen aus? Man betrachte

$$\psi\left(q',t'\right) = \left\langle q',t'\left|\psi\right\rangle_H \stackrel{1\text{ einschieben}}{=} \int dq\left\langle q',t'\left|q,t\right\rangle\left\langle q,t\left|\psi\right\rangle_H$$

Also hat der Propagator die Gestalt

$$\left\langle q',t'\left|q,t\right\rangle = \left\langle q'\right|\exp\left(-\frac{i\widehat{H}\left(t'-t\right)}{\hbar}\right)\left|q\right\rangle$$

Hierbei ist $\widehat{H}$ der Hamiltonoperator. Das ist zwar jetzt eine vollständige Antwort, aber keine schöne, weil ein Operator im Exponentialausdruck vorkommt. Man versucht also, die Definition eines solchen Ausdruckes, daß heißt die Taylorentwicklung, anzuwenden. Wenn man nach der ersten oder zweiten Ordnung abbrechen will, muß man nach einer Größe entwickeln, die auf jeden Fall klein bleibt. Ein guter Ansatzpunkt ist die Zeitdifferenz, wofür aber noch eine gewisse Vorarbeit erforderlich ist.

Als erstes wird das Zeitintervall in N Teile zerlegt, also $t' - t = N\varepsilon$. Man führt Stützstellen ein mit der Definition $t_n := t + n\varepsilon; n = 1, \ldots, N-1$

Jetzt wird $(N-1)$-mal eine 1 eingeschoben:

$$\begin{aligned} \langle q', t' \,| q, t\rangle &= \int dq_{N-1} \ldots \int dq_2 \int dq_1 \langle q', t' \,| q_{N-1}, t_{N-1}\rangle \ldots \langle q_2, t_2 \,| q_1, t_1\rangle \langle q_1, t_1 \,| q, t\rangle \\ \text{mit}\, \langle q_{n+1}, t_{n+1} \,| q_n, t_n\rangle &= \langle q_{n+1}| \exp\left(-\frac{i\widehat{H}\varepsilon}{\hbar}\right) |q_n\rangle \end{aligned}$$

Die Idee ist hierbei die gleiche wie bei der Bogenlänge (Polygonzug-Approximation).

Als nächstes soll ε klein sein, so daß eine abbrechende Taylorentwicklung möglich wird:

$$\langle q_{n+1}, t_{n+1} \,| q_n, t_n\rangle = \langle q_{n+1}| 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\widehat{H}\, |q_n\rangle + O\left(\varepsilon^2\right)$$

Der einzige störende Teil ist der Hamiltonoperator. Ziel ist jetzt, den dazu gehörigen Ausdruck zu vereinfachen. Dazu wird jetzt eine 1 mit Impulseigenzuständen eingeschoben:

$$\langle q_{n+1}| \widehat{H}\left(\widehat{p}, \widehat{q}\right) |q_n\rangle = \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \langle q_{n+1} \,| p_n\rangle \langle p_n| \widehat{H}\left(\widehat{p}, \widehat{q}\right) |q_n\rangle$$

Wenn $\widehat{H}$ keine gemischten $\widehat{p}, \widehat{q}$-Produkte enthält, oder $\widehat{p}$ immer links von $\widehat{q}$ steht, folgt

$$\langle p_n| \widehat{H}\left(\widehat{p}, \widehat{q}\right) |q_n\rangle = \langle p_n \,| q_n\rangle\, H\left(p_n, q_n\right)$$

mit der Hamilton**funktion** H, bezogen auf Ort und Impuls der Stützstelle (Eigenzustände!). Die beiden ebenen Wellen lassen sich kombinieren (komplexe Konjugation!), und es folgt

$$\langle q_{n+1}, t_{n+1} \,| q_n, t_n\rangle = \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{ip_n\left(q_{n+1} - q_n\right)}{\hbar}\right) \left(1 - iH\left(p_n, q_n\right)\frac{\varepsilon}{\hbar}\right) + O\left(\varepsilon^2\right)$$

Jetzt läßt sich der Grenzübergang $\varepsilon \to 0, N \to \infty$ $(N\varepsilon = t' - t)$ mit der Abkürzung $\overset{(N,\varepsilon)}{\lim}$ durchführen:

$$\langle q', t' \,| q, t\rangle = \overset{(N,\varepsilon)}{\lim} \int \prod_{n=1}^{N-1} dq_n \prod_{n=0}^{N-1} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_{n=0}^{N-1} p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\varepsilon}\right) \prod_{n=0}^{N-1}\left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H\left(p_n, q_n\right)\right)$$

und mit $\overset{N\to\infty}{\lim} \prod_{n=0}^{N-1}\left(1 + \frac{x_n}{N}\right) = \exp\left(\overset{N\to\infty}{\lim} \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} x_n\right)$ folgt:

$$\langle q', t' \,| q, t\rangle = \overset{(N,\varepsilon)}{\lim} \int \prod_{n=1}^{N-1} dq_n \prod_{n=0}^{N-1} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_{n=0}^{N-1}\left(p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\varepsilon} - H\left(p_n, q_n\right)\right)\right]$$

Hier steht jetzt ein unendliches Integral, daß einen "Polygonzug" beschreibt mit ∞ vielen, über den gesamten (Phasen-)Raum verteilten Eckpunkten. Es wird also über alle Pfade integriert $\rightarrow$ "Pfadintegral". Hierfür wird eine besondere Schreibweise eingeführt:

$$\int \prod_{n=1}^{N-1} dq_n \rightarrow \int Dq; \int \prod_{n=0}^{N-1} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \rightarrow \int Dp$$

Darüber hinaus gilt:

$$\lim^{(N,\varepsilon)} \frac{q_{n+1} - q_n}{\varepsilon} = \dot{q}\,(t)\,; \lim^{(N,\varepsilon)} \varepsilon \sum_{n=0}^{N-1} f\,(t_n) = \int_t^{t'} d\tau f\,(\tau)$$

Damit ergibt sich:

$$\langle q', t' \,| q, t \rangle = \int Dq \int Dp \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} d\tau \left(p\,\dot{q} - H\,(p, q) \right) \right)$$

womit ein vorläufiges Ergebnis erreicht ist. Zu beachten ist, daß in diesem Ergebnis keine Operatoren mehr vorkommen, aber trotzdem dieses Ergebnis im Prinzip die gesamte (nicht-relativistische) Quantenmechanik enthält. Um zu weiterführenden Ergebnissen zu kommen, müssen jetzt Annahmen über die Struktur der Hamiltonfunktion, also über den Systemaufbau, gemacht werden.

3 Feynmans Interpretation des Pfadintegrals

In den meisten üblichen Systemen hat die Hamiltonfunktion die Struktur $H = \frac{1}{2m} p^2 + V\,(q)$. In diesem Fall kann die p-Integration ausgeführt werden, da keine gemischten Terme auftreten, p quadratisch in die kinetische und überhaupt nicht in die potentielle Energie eingeht. Zweckmäßigerweise wird das an dem Propagator eines einzelnen Zeitschrittes ausgeführt, da hier bereits die gesamte p-Abhängigkeit vorliegt. In erster Ordnung gilt

$$\begin{aligned} \langle q_{n+1}, t_{n+1} \,| q_n, t_n \rangle &\simeq \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\varepsilon} - H\,(p_n, q_n) \right) \right) \\ &= \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(p_n\, \dot{q}_n - \frac{1}{2m} p_n^2 - V\,(q_n) \right) \right) \end{aligned}$$

Dies ist ein Gauß-Integral, daß mit $p_n^2 - 2m\, \dot{q}_n\, p_n = \left(p_n - m\, \dot{q}_n\right)^2 - m^2\, \dot{q}_n^{\,2}$ und $p'_n := p_n - m\, \dot{q}_n$ auf Standardform gebracht wird:

$$\langle q_{n+1}, t_{n+1} \,| q_n, t_n \rangle \simeq \exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{m}{2}\, \dot{q}_n^{\,2} - V\,(q_n) \right) \right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'_n}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \frac{p_n'^2}{2m} \right)$$

Die allgemeine Lösung des Gauß-Integrals lautet $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-zx^2\right) = \sqrt{\frac{\pi}{z}}$. Obwohl hier z imaginär ist, gilt diese Formel trotzdem. Der Integrand fällt gerade noch schnell genug ab, damit dieses Integral konvergiert. Diese spezielle Form heißt auch Fresnel-Integral. Will man dieses Problem vermeiden, muß man ε anders definieren. Es folgt

$$\langle q_{n+1}, t_{n+1} \,| q_n, t_n \rangle = \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left(\frac{m}{2}\,\dot{q_n}^{\,2} - V\left(q_n\right)\right)\right)$$

Damit bleibt nur ein Pfadintegral im Ortsraum übrig:

$$\begin{aligned}
\langle q', t' \,| q, t \rangle \quad &= \quad \lim_{(N,\varepsilon)} \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-\frac{N}{2}} \int \prod_{n=1}^{N-1} dq_n \exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_{n=0}^{N-1}\left(\frac{m}{2}\,\dot{q_n}^{\,2} - V\left(q_n\right)\right)\right] \\
&\Longrightarrow \quad \langle q', t' \,| q, t \rangle = \mathcal{N} \int Dq \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'} d\tau \left(\frac{m}{2}\,\dot{q}^{\,2} - V\left(q\right)\right)\right] \\
&\Longrightarrow \quad \langle q', t' \,| q, t \rangle = \mathcal{N} \int Dq \exp\left[\frac{i}{\hbar} W\left(q, \dot{q}\right)\right]
\end{aligned}$$

wobei W die klassische Wirkung und $\mathcal{N}$ einen Normierungsfaktor beschreibt.

Das Problem hierbei ist, daß $\mathcal{N}$ eigentlich divergent ist. Das braucht aber in diesem Fall nicht weiter zu interessieren, da bei dieser Betrachtung vor allem die Gestalt des Integrales wichtig ist. In konkreten Problemen kann sich die Divergenz wegheben. Zwei Dinge sind hier noch besonders interessant: Erstens hat der Integrand die Gestalt $e^{i\varphi}$, daß heißt es wird über eine komplexe Phase integriert. Zweitens lohnt sich die Betrachtung des klassischen Limes, d.h. $W \gg \hbar$. In diesem Fall ist das Argument unter dem Exponenten sehr groß, und in den meisten Fällen wird es auch zwischen zwei benachbarten Bahnen stark variieren. Da der Gesamtausdruck immer den gleichen Betrag hat (komplexe Phase!), werden sich also die Argumente bei in der Nähe befindlichen Bahnen gegenseitig wegheben. Nur an den Stellen, wo die Wirkung sich langsam genug verändert, daß heißt $dW = 0$, wird es statt dessen konstruktive Interferenz geben und im klassischen Limes werden nur diese Bahnen übrig bleiben. Das ist aber genau die Aussage des Prinzips der kleinsten Wirkung, das damit als klassischer Grenzfall des Pfadintegral-Formalismus plausibel gemacht worden ist.

4 Literatur

Greiner, Reinhardt, "Feldquantisierung", Theor. Physik Bd. 7A, Verl. Harri Deutsch (hauptsächlich)

Schulman, "Techniques and Applications of Path Integration", Wiley (v. a. Kap. 2.1)