

Pfadintegrale in der Quantenmechanik

Bastian Drees

14.11.2007

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|------------------------------|----------|
| 1 | Einleitung | 3 |
| 2 | Motivation | 3 |
| 3 | Herleitung | 4 |
| 4 | Klassischer Grenzfall | 5 |
| 5 | Aharonov-Bohm-Effekt | 6 |
| 6 | Quellen | 7 |

1 Einleitung

Ziel dieser Arbeit soll es sein, eine Einführung in den Formalismus der Pfadintegrale in der Quantenmechanik zu bieten. Bei diesem Formalismus kann auf Operatoren und Hilberträume vollständig verzichtet und lediglich mit gewöhnlichen Zahlen gerechnet werden. Probleme ergeben sich dabei beim Maß der Integrale, denn diese sind unendlich dimensional. Welche Vorteile ergeben sich durch das Studium der Pfadintegrale?

Einerseits ermöglicht der Formalismus einen neuen Blick auf gewisse Phänomene der Quantenmechanik und kann so neue Möglichkeiten der Anschauung eröffnen.

Andererseits können bestimmte Probleme, z.B. in der Quantenfeldtheorie mit Hilfe der Pfadintegrale vorteilhafter gelöst werden.

Dirac schreibt 1933 in einer seiner Arbeiten, dass die quantenmechanische Übergangsamplitude mit dem Faktor $e^{iS/\hbar}$ zusammenhängt. Dieser Gedanke wird von Feynman aufgegriffen, welcher 1948 die Pfadintegral-Methode entwickelt.

2 Motivation

Zur Illustration der zugrunde liegenden Idee, betrachten wir das Doppelspaltexperiment. Bei geöffnetem Spalt 1 ergibt sich eine Intensitätsverteilung P_1 entsprechend (b) in Abb.1 und analog bei geöffnetem Spalt 2 eine Intensitätsverteilung P_2 entsprechend (c). Diese entsprechen dem Betragsquadrat der Übergangsamplituden $P_i = |A_i|^2$ ($i=1,2$). Betrachtet man die Elektronen als klassische Teilchen, so erwartet man bei geöffneten Spalten 1 und 2 eine Verteilung entsprechend (d) das heisst die Summe aus (b) und (c). Man beobachtet allerdings eine Verteilung entsprechend (a). Dies entspricht $P_{12} = |A_1 + A_2|^2$.

Findet man eine Möglichkeit, auch nur prinzipiell zu detektieren, durch welchen Spalt das Elektron geht, so wird das Interferenzmuster unabhängig von der Art der Detektion zerstört und man erhält Verteilung (d). Dass dies so sein muss ist mit Hilfe der Pfadintegral Methode sofort einsichtig.

Hierzu stelle man sich weitere Blenden mit weiteren Spalten vor die, wie in Abb.2 ge-

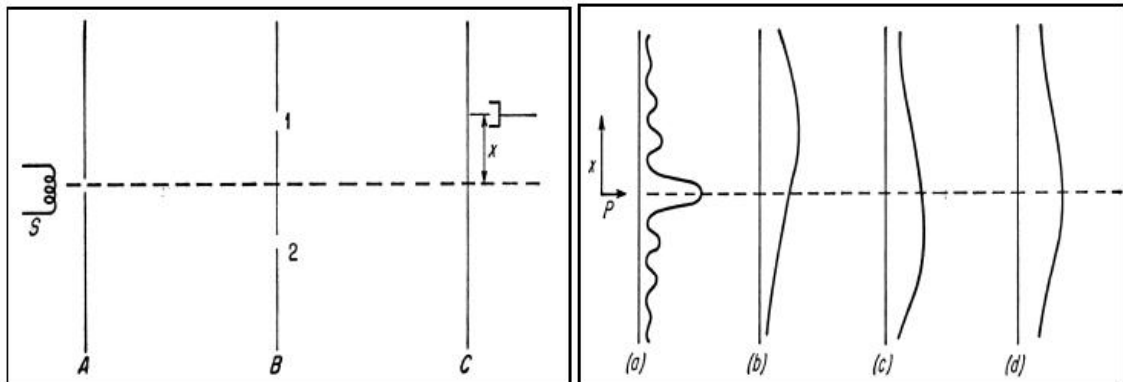
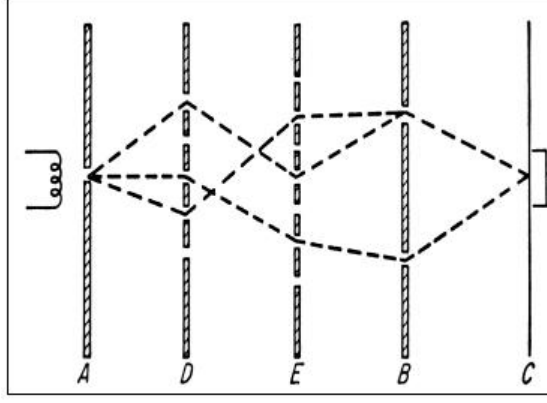


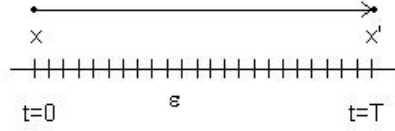
Abbildung 1: Doppelspaltexperiment

zeigt zwischen Schirm und Quelle gebracht werden. Indem man die Anzahl der Blenden und Spalte weiter erhöht, kann so jeder mögliche Weg den das Elektron nehmen kann approximiert werden. Analog zur Verteilung (a) gilt nun also $P_{AC} = \left| \sum_{\text{„alle Pfade“}} A \right|^2$. Man erkennt hieran, dass im Falle einer Detektion des Spaltdurchgangs die Hälfte aller Summanden (nämlich diejenigen Pfade die durch den jeweils anderen Spalt führen) verschwinden und sich somit Verteilung (d) als Summe von (b) und (c) ergibt.



3 Herleitung

Betrachten wir nun die Übergangsamplitude eines Teilchens, das sich zur Zeit $t=0$ am Ort x befindet und zur Zeit $t=T$ am Ort x' . Ferner teilen wir das Zeitintervall in N äquidistante Stücke der Länge $\epsilon = T/N$ (s. Abb).



In der folgenden Rechnung sei $\hbar=1$. Wir erhalten also für die Übergangsamplitude:

$$A = \langle x' | e^{-iHT} | x \rangle = \langle x' | (e^{-iH\epsilon})^N | x \rangle$$

mit $x' = x_N$, $x=x_0$ und $(N-1)$ mal $1 = \int dx_j |x_j\rangle \langle x_j|$; ($j=1, \dots, N-1$) eingeschoben, ergibt sich

$$A = \int dx_1 \dots dx_{N-1} \langle x_N | e^{-iH\epsilon} | x_{N-1} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-iH\epsilon} | x_0 \rangle \quad (1)$$

Dies entspricht dem Übergang von x_0 zu x_N über die einzelnen x_j zu den Zeitpunkten $t_j = j \cdot \epsilon$. Für kleine ϵ entwickelt man nun die einzelnen Faktoren:

$$\langle x_{j+1} | e^{-iH\epsilon} | x_j \rangle = \langle x_{j+1} | 1 - iH\epsilon + O(\epsilon^2) | x_j \rangle = \delta(x_{j+1} - x_j) - i\epsilon \langle x_{j+1} | H | x_j \rangle + O(\epsilon^2)$$

Die Deltafunktion lässt sich schreiben als:

$$\delta(x_{j+1} - x_j) = \int \frac{dp_j}{2\pi} e^{ip_j(x_{j+1}-x_j)}$$

Mit $H=T+V$, $1 = \int dp_j |p_j\rangle \langle p_j|$ und einem symmetrischen Ausdruck von V in x_j und x_{j+1} wird der zweite Term

$$\begin{aligned} \langle x_{j+1} | H | x_j \rangle &= \int dp_j \left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{V(x_{j+1}) + V(x_j)}{2} \right) \langle x_{j+1} | p_j \rangle \langle p_j | x_j \rangle = \\ &= \int \frac{dp_j}{2\pi} e^{ip_j(x_{j+1}-x_j)} \left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{V(x_{j+1}) + V(x_j)}{2} \right) \end{aligned}$$

Damit wird

$$\begin{aligned} \langle x_{j+1} | e^{-iH\epsilon} | x_j \rangle &= \int \frac{dp_j}{2\pi} e^{ip_j(x_{j+1}-x_j)} \left(1 - i\epsilon \left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{V(x_{j+1}) + V(x_j)}{2} \right) + O(\epsilon^2) \right) = \\ &= \int \frac{dp_j}{2\pi} e^{ip_j(x_{j+1}-x_j)} e^{-i\epsilon \left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{V(x_{j+1}) + V(x_j)}{2} \right)} (1 + O(\epsilon)) \quad (2) \end{aligned}$$

Mit dem gaußschen Integral

$$\int dp e^{-i\frac{a}{2}p^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{ia}}$$

lässt sich die Integration durchführen und Gleichung (2) wird zu

$$\langle x_{j+1} | e^{-iH\epsilon} | x_j \rangle = \sqrt{\frac{2\pi m}{i\epsilon}} \exp \left\{ i\epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 - \frac{V(x_{j+1}) + V(x_j)}{2} \right] \right\} \cdot (1 + O(\epsilon^2))$$

Setzt man dieses Ergebnis in (1) ein und bildet den Limes $N \rightarrow \infty$ und $\epsilon = T/N \rightarrow 0$ so erhält man

$$A = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{N/2} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \exp \left\{ i \sum_{j=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 - \frac{V(x_{j+1}) + V(x_j)}{2} \right] \right\} \quad (3)$$

Im Limes $N \rightarrow \infty$ und $\epsilon = T/N \rightarrow 0$ gilt

$$\sum_{j=0}^{N-1} \epsilon \rightarrow \int_0^T dt; \quad \frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \rightarrow \dot{x}(t); \quad \frac{V(x_{j+1}) + V(x_j)}{2} \rightarrow V(x(t)).$$

Und (3) wird zu

$$A = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{N/2} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \exp \left\{ i \int_0^T dt \left[\frac{m}{2} (\dot{x}(t))^2 - V(x(t)) \right] \right\} \quad (4)$$

Führt man nun die Abkürzung

$$Dx := \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{N/2} dx_1 \dots dx_{N-1}$$

ein und schreibt analog zur klassischen Wirkung

$$S[x] = \int_0^T dt \left[\frac{m}{2} (\dot{x}(t))^2 - V(x(t)) \right]$$

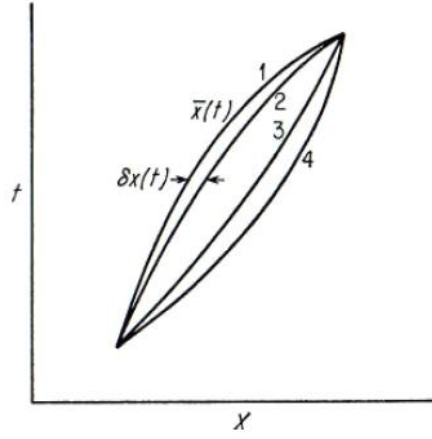
so erhält man in kurzer Schreibweise für die Übergangsamplitude

$$A = \int Dx e^{iS[x]}$$

4 Klassischer Grenzfall

Im klassischen Grenzfall scheint es nun einen Widerspruch zu geben, da klassisch nur eine Bahn existiert, und zwar diejenige welche das hamiltonsche Prinzip erfüllt. Das heißt nur die Bahn, für die $\delta S = 0$ gilt spielt im klassischen Fall eine Rolle. Im Pfadintegral tragen aber alle möglichen Wege zur Übergangsamplitude gleich stark bei und unterscheiden sich lediglich in der Phase.

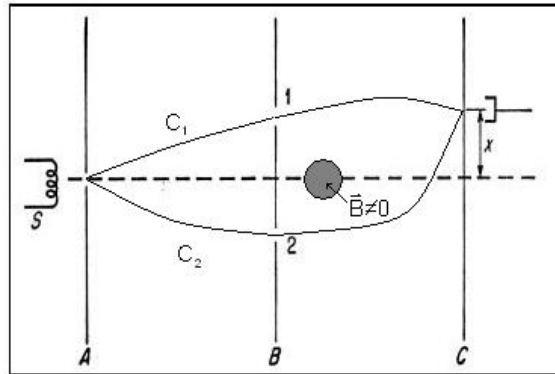
Auf der klassischen Skala gilt jedoch $\delta S \gg \hbar$, deshalb hat der Faktor $e^{iS/\hbar}$ selbst für unmittelbar benachbarte Pfade (δx sehr klein) im klassischen Grenzfall sehr unterschiedliche Phasen. Daher mitteln sich die Beiträge aller Bahnen die entfernt von der klassischen (in der Abbildung: \bar{x}) verlaufen zu null (s. Abb.). Nur für die klassische Bahn ist $\delta S = 0$ und es kommt hier zu konstruktiver Interferenz.



5 Aharonov-Bohm-Effekt

Zum Abschluss nun eine mögliche Anwendung der Pfadintegrale, den Aharonov-Bohm-Effekt. Hierbei handelt es sich um eine Variation des Doppelspaltexperiments. Wie in der Abbildung gezeigt wird ein Magnetfeld zwischen Quelle und Schirm gebracht. Dieses ist jedoch für die Elektronen abgeschirmt, so dass diese sich nur im feldfreien Raum bewegen. Trotz dieser Tatsache verschiebt sich das Interferenzmuster. Dieser verblüffende Effekt lässt sich wie folgt erklären.

Zwar gilt im Bereich in dem sich die Elektronen bewegen $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = 0$, aber das



Vektorpotential \vec{A} kann ungleich null sein. Allerdings ist das Vektorpotential aufgrund der Eichfreiheit eine unphysikalische Größe. Betrachtet man also die Lagrangefunktion

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 + e \dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}(\vec{r}) = L_0 + e \dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}(\vec{r})$$

so ergibt sich für die Wirkung:

$$\Rightarrow S = S_0 + e \int_0^T dt \quad \dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}(\vec{r}) = S_0 + e \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r})$$

Wir unterscheiden nun Wege die links am Magnetfeld vorbei gehen (C_1 in der Abb.) und Wege die rechts vom Magnetfeld verlaufen (C_2 in der Abb.). Für zwei Wege C_1 und C'_1 vom Typ C_1 gilt nun

$$\begin{aligned} \int_{C_1} d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}) - \int_{C'_1} d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}) &= \oint d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}) = \\ &= \int_{F'} (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot d\vec{f} = \int_{F'} \vec{B} \cdot d\vec{f} = 0 \\ \Rightarrow \int_{C_1} d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}) &= \int_{C'_1} d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}) = k_1 \end{aligned} \tag{5}$$

Dabei ist F' die von den beiden Wegen eingeschlossene Fläche, die feldfrei ist. Analog gilt für zwei Wege vom Typ C_2

$$\Rightarrow \int_{C_2} d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}) = \int_{C_2'} d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}) = k_2$$

Betrachten wir nun also die Übergangsamplitude und teilen sie auf in Wege vom Typ C_1 und solche vom Typ C_2

$$\begin{aligned} A &= \int Dx e^{iS} = \int_{Typ C_1} Dx e^{iS} + \int_{Typ C_2} Dx e^{iS} = \\ &= \int_{Typ C_1} Dx e^{iS_0} e^{iek_1} + \int_{Typ C_2} Dx e^{iS_0} e^{iek_2} = \\ &= e^{iek_1} (A_1 + A_2 e^{ie(k_2-k_1)}) \end{aligned}$$

Analog zu Gleichung (5) erhält man für

$$\begin{aligned} k_2 - k_1 &= \int_{C_1} d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}) - \int_{C_2} d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}) = \\ &= \int_F \vec{B} \cdot d\vec{f} = \Phi \end{aligned}$$

und somit eine physikalische Größe, nämlich den magnetischen Fluß Φ . Für den Betrag der Übergangsamplitude erhält man nun

$$|A| = |A_1 + A_2 e^{ie\Phi}| \quad (6)$$

Man erkennt dass trotz der Tatsache, dass sich die Elektronen nur im feldfreien Raum bewegen der magnetische Fluß einen Einfluß auf die Übergangsamplitude hat.

6 Quellen

- R. Feynman, C. Hibbs: „Quantum Mechanics and Path Integrals“
- L.S. Schulman: „Techniques and Applications of Path Integration“
- G. Münster: „Quantentheorie“
- R. MacKenzie: „Path Integral Methods and Applications“