Westfälische-Wilhelms-Universität Münster

Fachbereich Physik

Pfadintegrale in der Quantenmechanik

Schriftliche Ausarbeitung des Vortrags im Seminar der Teilchen und Felder
WS 2015/16

Nicolai Krybus
11.11.2015

Inhaltsverzeichnis

Das Konzept der Pfadintegrale stellt eine völlig neue Darstellung der Quantenmechanik dar. Das Ziel dabei war es, die Quantenmechanik so nah wie möglich an die klassische Mechanik zu bringen. Auffälligstes Merkmal ist das Fehlen jeglicher Operatoren und Vektoren des Hilbertraums. Stattdessen muss man sich allerdings mit den unendlich vielen Dimensionen eben dieses Hilbertraums zufrieden geben, die nun wieder auftauchen.

1 Geschichte der Pfadintegrale

Erstmals postuliert wurden die Pfadintegrale 1948 von Richard Feynman, der dabei auf Arbeiten von Paul Dirac aufbaute. Zunächst wurde sein Paper von der Zeitschrift *Physical Review* jedoch abgelehnt. Die Redaktion begründete ihre Entscheidung darin, dass diese neue Methode nicht zielführend und zu umständlich sei. Tatsächlich reichte für die damaligen Probleme die Formulierung der Quantenmechanik im Schrödinger- bzw. im Heisenbergbild völlig aus. Probleme wie z.B. der harmonische Oszillator oder das Wasserstoffatom können zwar auch über Pfadintegrale gelöst werden, dies erweist sich aber als sehr aufwändig, insbesondere im Vergleich zu den damals gängigen Lösungsansätzen. Obwohl der Artikel später noch in der *Reviews of Modern Physics* veröffentlicht wurde, dauerte es noch viele Jahre, bis Pfadintegrale eine große Rolle spielten. Erst die modernen Feldtheorien verlangten nach einer Formulierung in Pfadintegralen. Hier stellten sich Pfadintegrale dann als essenziell heraus.

2 Einleitung

Wir betrachten, dass sich zum Zeitpunkt $t = 0$ am Ort y befindet. Dabei sei die Wellenfunktion zu diesem Zeitpunkt bekannt, soll heißen:

$$|\psi(0)\rangle = |y\rangle\,. \tag{1}$$

Das Teilchen kann hier genauso als sehr schmales Wellenpaket in der Umgebung von y interpretiert werden. Nun wollen wir das Teilchen vom Ort y zu einem anderen Ort x bewegen, wie in Abb. 1 dargestellt ist. Dass das Teilchen sich hier von y nach x bewegen soll und nicht umgekehrt, wird die Herleitung später ein kleines bisschen übersichtlicher machen. Die Frage dabei lautet: "Welcher Teil des Wellenpakets geht zum Ort x?", oder auch "Welcher Teil des ausgedehnten Wellenpakets kann später am Ort x lokalisiert werden?". Man kann diese Frage in der Dirac-Notation folgendermaßen formulieren:

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \,? \tag{2}$$
$$\langle x|U(t)|\psi(0)\rangle = \,? \tag{3}$$
$$\langle x|U(t)|y\rangle = \,? \tag{4}$$

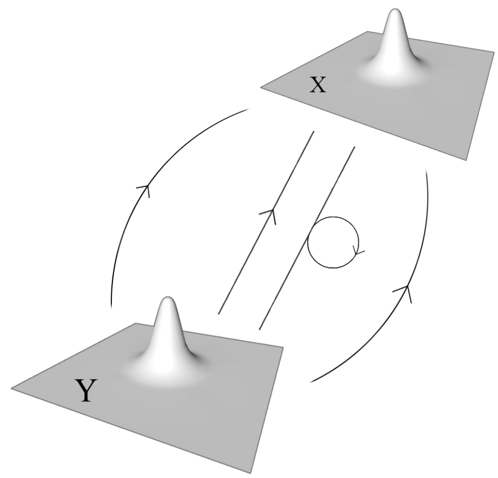


Abbildung 1: Ein Teilchen im Zustand y soll nach x bewegt werden

Hierbei verwenden wir den Zeitentwicklungsoperator $U(t) = e^{-iHt}$. Gleichung (4) stellt dabei die Übergangsamplitude unseres Teilchens dar, die wir im Folgenden durch das Pfadintegral ausdrücken wollen. An dieser Stelle soll noch ausdrücklich angemerkt werden, dass sich das Teilchen **nicht** direkt von einem Zustand in den anderen bewegt. In der Vorstellung der Quantenmechanik breitet es sich viel mehr aus, es zerfließt in alle Richtungen. Man kann aber dennoch einen Teil des Wellenpakets später am Ort x feststellen und dies ist eben genau das, was hier dargestellt werden soll. Die Frage, die sich nun stellen mag ist: "Wie gelangt das Teilchen in den anderen Zustand?". Wie grade schon dargestellt wurde, folgt das Teilchen nicht einer simplen Trajektorie von y nach x. Dies würde im Sinne der Quantenmechanik auch keinen Sinn machen. Man bedenke zum Beispiel, dass die Schrödingergleichung völlig unabhängig von jeder Trajektorie funktioniert. Das Teilchen nimmt vielmehr alle Wege gleichzeitig. Man kann sich dies veranschaulichen, wenn man nochmal an den Doppelspaltversuch zurückdenkt. Beim Doppelspalt entsteht das Interferenzmuster durch die Berücksichtigung **beider** Wege, die das Teilchen beim Durchschreiten nehmen könnte (siehe Abb. 2). Man kann dieses Experiment nun dahingehend erweitern, dass man statt nur einer Blende mit zwei Spalten mehrere Blenden mit mehreren Spalten benutzt. Dadurch ergeben sich noch mehr Wege, die für das Teilchen möglich wären. In Abb. 3 soll dieses Vorgehen modellhaft dargestellt werden.

Mit jedem weiteren Spalt und mit jeder weiteren Blende ergeben sich neue Wege, bis zu dem Punkt, an dem durch unendlich viele Spalte und Blenden **alle** Wege möglich sind. In diesem Grenzfall kann sich eine Verallgemeinerung treffen lassen:

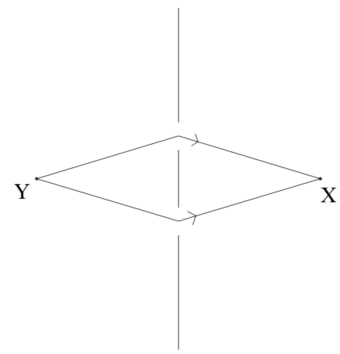


Abbildung 2: Schematische Darstellung eines Doppelspalts

Die quantenmechanische Amplitude um ein Teilchen vom Zustand y in den Zustand x zu bewegen, entsteht durch Aufsummation aller Beiträge von allen möglichen Pfaden.

Wir schreiben dafür symbolisch:

$$\langle x, t_1 | y, t_0 \rangle = \int \mathcal{D}[x(t)]\ A[x(t)] \tag{5}$$

Es ergibt sich ein Integral, das über alle Wege einzeln integriert wird. Dabei tritt für jeden Weg ein eigener Integrant A auf, der vom Weg anhängig ist. Dies ist natürlich keine vollwertige Herleitung des Pfadintegrals. Aber es zeigt schon vor der eigentlichen Rechnung, wo es in etwa hingehen soll. Im Folgenden soll nun der Term $A[x(t)]$ bestimmt werden.

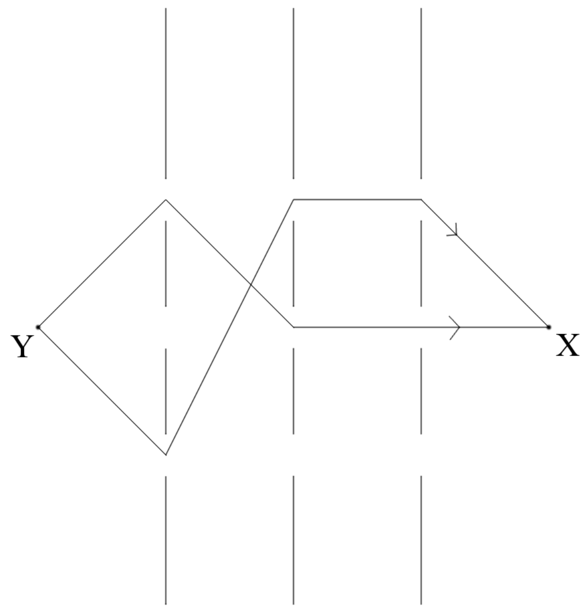


Abbildung 3: Das Doppelspaltexperiment, erweitert um mehrere Spalte und Blenden

3 Mathematische Herleitung

Kurze Wiederholung: Wir haben ein Teilchen gegeben, dass sich zum Zeitpunkt $t = 0$ am Ort y befindet. Gesucht wird die Übergangsamplitude in den Zustand x (siehe Gleichung (4)). Im Folgenden ist außerdem um Schreibarbeit zu sparen $\hbar = 1$ gesetzt.

3.1 Freies Teilchen

Zunächst betrachten wir das Teilchen als freies Teilchen, das heißt $V(x) = 0$ und der Hamilton-Operator reduziert sich auf $H \equiv H_0 = \frac{p^2}{2m}$. Wir erhalten als Übergangsamplitude

$$\langle x|U(t)|y\rangle = \langle x|e^{-i\frac{p^2}{2m}t}|y\rangle \,.$$

Nun wenden wir einen Trick an: Wir ergänzen eine so genannte vollständige Eins $\int |p\rangle \langle p|\, dp = 1$ so, dass sich zweimal die Eigenfunktion des Impulsoperators bildet. Mit $\langle p|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipy}$ ergibt sich dann:

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

Um dieses Integral zu lösen, wird eine kleine Nebenrechnung durchgeführt: Das Gauß'sche Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{a}{2}x^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \tag{7}$$

sei bekannt. In diesem Fall liegt allerdings noch ein weiterer in x linearer Term im Exponenten vor (in Gleichung (8) als bx dargestellt). Dieser kann jedoch mit Hilfe einer Quadratischen Ergänzung so umgeformt werden, dass das Integral direkt ablesbar wird:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{a}{2}x^2+bx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{a}{2}(x-\frac{b}{a}^2+\frac{b^2}{2a})} = \int_{-\infty}^{\infty} dy\ e^{-\frac{a}{2}y^2} e^{\frac{b^2}{2a}} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}}\ e^{\frac{b^2}{2a}}. \tag{8}$$

Wenn wir Gleichung (8) nun auf (6) anwenden, erhalten wir:

$$\int \frac{dp}{2\pi} e^{-i\frac{p^2}{2m}t} e^{ip(x-y)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi it}}\ e^{i\frac{m}{wt}(x-y)^2}. \tag{9}$$

Dies ist eine Lösung unserer Übergangsamplitude, in der keine Operatoren oder Vektoren des Hilbert-Raums mehr auftreten. Mit Hilfe dieser Lösung können wir nun ein Teilchen im Potential betrachten.

3.2 Teilchen im Potential

Nun wird $V(x) \neq 0$ betrachtet. Das Integral ist nun leider nicht mehr geschlossen lösbar. Darum müssen wir wieder ein wenig tricksen und betrachten zunächst nur sehr kleine (infinitesimale) Zeitintervalle $t = \epsilon$. Wir erhalten:

$$U_\epsilon \doteq e^{-i(H_0)\epsilon} \approx e^{-iV\frac{\epsilon}{2}} e^{-iH_0\epsilon} e^{-iV\frac{\epsilon}{2}} := W_\epsilon \tag{10}$$

Hier wurde die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel für Operatoren angewandt, so dass wir U_ϵ in einen Term W_ϵ umschreiben konnten, in dem die Operatoren in eigenen e-Funktionen stehen. Dies ist bis hierhin jedoch nur eine Näherung, da bei Anwenden der Formel auch noch Terme höherer Ordnung hinzukommen. Mit Hilfe von W_ϵ und Gleichung (9) können wir nun jedoch die Übergangsamplitude in ϵ-Näherung berechnen:

$$\langle x|W_\epsilon|y\rangle = e^{-iV(x)\frac{\epsilon}{2}}\ \langle x|e^{-iH_0\epsilon}|y\rangle\ e^{-iV(y)\frac{\epsilon}{2}} \tag{11}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi it}}\ e^{i\frac{m}{wt}(x-y)^2 - i[V(x)+V(y)]} \tag{12}$$

Anschließend wird die so genannte Salamitaktik angewandt: Wir teilen unser großes Zeitintervall t in unendlich viele ϵ-Scheibchen auf, die zusammengesetzt wieder das gesamte Intervall bilden.

$$t = \epsilon \cdot N \quad \Leftrightarrow \quad \epsilon = \frac{t}{N} \tag{13}$$

Das heißt, dass wir uns aus N U_ϵ auch wieder ein $U(t)$ bauen können:

$$e^{-iHt} = (e^{-iH\epsilon})^N \approx W_\epsilon^N \tag{14}$$

Hier lässt sich nun die Lie-Kato-Trotter-Produktformel anwenden, welche besagt, dass die Gleichung für unendlich große N exakt erfüllt ist:

$$e^{-iHt} = \lim_{N\to\infty} W_\epsilon^N \tag{15}$$

Nun können wir unsere Übergangsamplitude berechnen:

$$\langle x|e^{-iHt}|y\rangle = \langle x|(e^{-iH\epsilon})^N|y\rangle \tag{16}$$

Wir führen an dieser Stelle, nach dem gleichen Prinzip wie schon in Gleichung (6) in ähnlicher Form geschehen, vollständige Einsen ein. Nur diesmal nicht nur eine, sondern unendlich viele. Im Folgenden sei $x = x_0$ und $y = x_N$. Das Prinzip der Anordnung wird schnell klar wenn man nachfolgende Gleichung (17) betrachtet:

$$\begin{aligned}
\langle x|(e^{-iH\epsilon})^N|y\rangle &= \int dx_1...dx_{N-1}\,\langle x|e^{-iH\epsilon}|x_1\rangle\,\langle x_1|e^{-iH\epsilon}|x_2\rangle\,...\,\langle x_{N-1}|e^{-iH\epsilon}|y\rangle && (17)\\
&= \int dx_1...dx_{N-1}\,\langle x|W_\epsilon|x_1\rangle\,\langle x_1|W_\epsilon|x_2\rangle\,...\,\langle x_{N-1}|W_\epsilon|y\rangle && (18)\\
&= \lim_{N\to\infty}\left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\epsilon}}\right)^N \int dx_1...dx_{N-1}\exp\Big\{i\frac{m}{2\epsilon}[(x-x_1)^2+(x_1-x_2)^2 && (19)\\
&+\ ...+(x_{N-1}-y)^2] - i\frac{\epsilon}{2}[V(x)+2V(x)+...+2V(x_{N-1})+V(y)]\Big\}. && (20)
\end{aligned}$$

Der Exponent lässt sich als Summe folgendermaßen vereinfachen:

$$S_\epsilon \doteq \sum_{k=1}^{N}\epsilon\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{x_{k-1}-x_k}{\epsilon}\right)^2 - \frac{V(x_{k-1})+V(x_k)}{2}\right\}. \tag{21}$$

Wenn wir nun den Limes ausführen, N gegen unendlich und damit ϵ gegen Null gehen lassen, stellen wir fest, dass die Summe zu einem Integral wird und dass der erste Summand grade die zeitliche Ableitung von x ist. Wir schreiben:

$$S = \int_0^t dt'\ \Big\{\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V[x[t']]\Big\}. \tag{22}$$

Hier steht im Integral offensichtlich die Lagrange-Funktion. Das Integral über die Lagrange-Funktion ist ebenfalls bekannt, es stellt die **klassische Wirkung** über den Weg x dar.

$$S[x(t)] = \int_0^t dt'\ \mathcal{L}(x(t'),\dot{x}(t'),t'). \tag{23}$$

Damit ist unsere Übergangsamplitude vollständig bestimmt. Das Pfadintegral ergibt sich zu

$$\langle x|e^{-iHt}|y\rangle = \int \mathcal{D}x \; e^{iS[x(t)]}. \tag{24}$$

Das Symbol $\mathcal{D}x$ steht dabei für die unendlich vielen Dimensionen des Integrals.

$$\mathcal{D}x \equiv \mathcal{D}[x(t)] = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} dx(t_1)...dx(t_{N-1}), \tag{25}$$

wobei der Limes immer erst nach jeder einzelnen Iteration gebildet werden soll.

Zu Anfang wurde $\hbar = 1$ gesetzt. Hier nochmal das Endergebnis mit korrektem $\hbar$:

$$\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|y\rangle = \int \mathcal{D}x \; e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}. \tag{26}$$

4 Klassischer Grenzfall

An dieser Stelle soll noch abschließend wieder die Brücke zur klassischen Physik geschlagen werden. Das Hamiltonische Prinzip besagt, dass sich das Teilchen über den Weg der geringsten Wirkung von y nach x bewegen würde. Wie passt das mit der quantenmechanischen Vorstellung zusammen? Wir betrachten zwei mögliche Wege, die sehr nach beieinander liegen:

$$x'(t) = x(t) + \eta(t), \tag{27}$$

wobei $\eta(t)$ eine sehr, sehr kleine Änderung darstellen soll. Wir betrachten die Wirkung des Weges $x(t)$, welche wir direkt durch eine Taylor-Entwicklung darstellen können:

$$S[x'(t)] = S[x(t) + \eta(t)] \tag{28}$$

$$\approx S[x(t)] + \int dt' \; \eta(t')\frac{\delta S[x(t')]}{\delta x(t')} \tag{29}$$

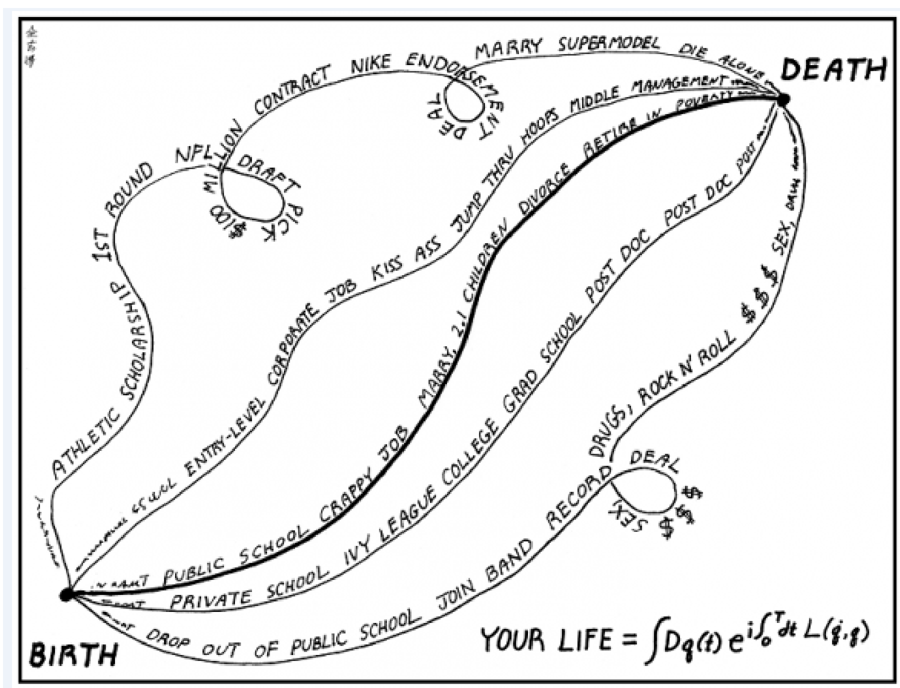
Wir können nun betrachten, welche Beiträge die Wirkungen zu unserem Pfadintegral (siehe Gleichung (26)) liefern:

$$e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]} + e^{\frac{i}{\hbar}S[x'(t)]} \approx e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}\left(1 + exp\frac{i}{\hbar}\int dt'\eta(t')\frac{\delta S[x(t')]}{\delta x(t')}\right) \tag{30}$$

Nun mag im ersten Moment der Gedanke kommen, dass die Änderung η sehr klein ist und folglich das Integral gegen 0 geht. Dann würden sich die Wege simpel addieren. Jedoch muss hier beachtet werden, dass auf einer makroskopischen Skala selbst eine sehr kleine Änderung eines Weges immer noch mehrere Größenordnungen über dem reduzierten Planck'schen Wirkungsquantum liegt. Damit liefert das Integral immer eine Phasenverschiebung, für fast beliebig kleine Änderungen η. Wenn man nun statt nur zwei Wegen unendlich viele Wege betrachtet, so kann man davon ausgehen, dass sich diese Phasenverschiebungen der komplexen e-Funktionen im Mittel wegkürzen, d.h. destruktiv mit einander interferieren. Es gibt jedoch einen ausgezeichneten Weg, nämlich grade der für den

$$\frac{\delta S[x(t')]}{\delta x(t')} = 0 \tag{31}$$

gilt. Dies ist der Weg mit der minimalen Wirkung, also genau der durch das Hamiltonsche Prinzip ausgezeichnete Weg. Wege für die die Wirkung minimal ist, interferieren konstruktiv miteinander, sie liefern gewissermaßen im Ganzen betrachtet den Löwenanteil aller Wege. So passen am Ende klassische und Quantenphysik doch wieder zusammen.



5 Quellen

- Gernot Münster: Quantentheorie, 2te Auflage, de Gruyter (2010)
- Richard MacKenzie: Path Integral Methods and Applications, Lectures given in (2000)
- R. Feynmann, A. Hibbs: Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill (1965)
- L. S. Schulman: Techniques and Applications of Path Integration, John Wiley (1981)