Das Pfadintegral in der Quantenmechanik

Seminarvortrag von Stefan Averkamp am 15.04.1998.

Seminar über Teilchen- und Kerntheorie, SS 1998
G. Münster, M. Stingl, A. Weiguny
Quantenelektrodynamik

Einleitung:

Die zentrale Bewegungsgleichung in der Quantenmechanik ist die Schrödinger-Gleichung. Diese sieht für ein spinloses Teilchen in einer Dimension und nichtrelativistisch folgendermaßen aus:

$$H\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{1}$$

wobei $H = T + V = \frac{1}{2m}P^2 + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$ ist.

Die Aufgabe besteht nun darin, diese Bewegungsgleichung für beliebige Systeme zu lösen. Eine Möglichkeit zum Auffinden der Lösung ist es, einen Separationsansatz ($\psi(x,t) = u(x)v(t)$) zu machen. Unter Berücksichtigung von Normierungs- und Randbedingungen findet man für verschiedene Systeme (z.B. harmonischer Oszillator, Wasserstoffatom) mehr oder weniger einfach die zugehörigen Lösungen.
Bei der Schrödinger-Gleichung ergibt sich ein Zustand zu einer gegebenen Zeit jeweils aus dem Zustand, der zeitlich infinitesimal davor vorlag.
Im Gegensatz hierzu steht der Formalismus der Pfadintegrale. Hier tragen zu einem Zustand die quantenmechanischen Zustände zu allen Zeiten gleichermaßen bei. Außerdem werden hier Manipulationen von Operatoren im Hilbert-Raum durch Manipulationen von unendlichen Produkten von Integralen ersetzt. Hierbei werden Quantenerscheinungen direkt durch Fluktuationen vom Pfad erklärt.
Entwickelt wurde der Pfadintegralformalismus 1942 von R.P. Feynman.

Herleitung der Pfadintegraldarstellung der Zeitentwicklungsamplitude:

Ziel ist es nun die Greensche Funktion (oder Propagator) G zu bestimmen, die folgende Gleichung erfüllt:

$$(H - i\hbar\frac{\partial}{\partial t})G(t,t_0) = -i\hbar\mathbf{1}\delta(t-t_0)\,. \tag{2}$$

Mit Hilfe der Greenschen Funktion löst man inhomogene Differentialgleichungen. Daß man diese Methode bei der hier, auf den ersten Blick, vorliegenden homogenen Dgl trotzdem anwenden kann, liegt daran, daß als Randbedingung die Wellenfunktion zu einem bestimmten Zeitpunkt gegeben ist. Diese Randbedingung macht die Dgl einer inhomogenen Dgl gleichwertig.
Warum man (2) erhält, entnehme man dem Einschub über die Greensche Funktion.

Einschub Greensche Funktion:

Hat man eine Gleichung der Form Ly(x)=f(x) zu lösen, so kann man dies mit Hilfe der Greenschen Funktion erledigen. L ist hierbei allgemein ein Operator, f(x) die Ursache und y(x) die Antwort auf die Ursache. Die Antwort G(x,a) auf die „elementare" Ursache $\delta(x-a)$ nennt man Greensche Funktion.
Löst man nun in einem bestimmten Intervall I das Hilfsproblem
LG(x,a)= $\delta(x-a)$ (a),
so erhält man in diesem Intervall aus der Kenntnis von G auch die Lösung zu der Inhomogenität f(x). Es gilt nämlich:

$$L\int_I da\ f(a)G(x,a) = \int_I da\ f(a)LG(x,a) \underset{(a)}{=} \int_I da\ f(a)\delta(x-a) = f(x)$$

$$\Rightarrow y(x) = \int_I da\ f(a)G(x,a)$$

Die Folgerung ergibt sich durch Koeffizientenvergleich mit der ursprünglichen Gleichung. Der Trick besteht nun darin die Gesamt-Ursache f(x) in elementare Ursachen zu unterteilen ($f(x) = \int_I da\ f(a)\delta(x-a)$) und die hieraus gewonnenen elementaren Antworten G zur Gesamt-Antwort y(x) zu superponieren ($y(x) = \int_I da\ f(a)G(x,a)$). Die Methode mit der Greenschen Funktion dürfte aus der Elektrostatik bzw. Elektrodynamik bekannt sein, wo sie zum Lösen der Maxwell-Gleichungen verwendet wird.

Nun läßt sich (2) auch schreiben als:

$$(H_x - i\hbar\frac{\partial}{\partial t})G(x,t;y,t_0) = -i\hbar\delta(x-y)\delta(t-t_0)\,. \tag{3}$$

Als Ergebnis für die Greensche Funktion $G(x,t;y,t_0)$ ergibt sich die Übergangswahrscheinlichkeit des Zeitentwicklungsoperators zwischen zwei lokalisierten Zuständen:

$$G(x,t;y,t_0) = \langle x|G(t,t_0)|y\rangle\,. \tag{4}$$

Der Zeitentwicklungsoperator ist die folgende Exponentialfunktion, falls der Hamiltonoperator zeitunabhängig ist:

$$G(t,t_0) = \theta(t-t_0)\exp(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H)\,. \tag{5}$$

Um zu überprüfen, ob (5) die Gleichung (2) erfüllt, setzen wir einmal ein:

$$HG(t,t_0) - i\hbar\delta(t-t_0)\exp(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H) - i\hbar\theta(t-t_0)(-\frac{i}{\hbar}H)\exp(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H)$$

$$= HG(t,t_0) - i\hbar\delta(t-t_0)\exp(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H) - HG(t,t_0)$$

$$= -i\hbar\delta(t-t_0)\exp(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H)$$

$= -i\hbar\delta(t-t_0)$ für $t = t_0$ und 0 sonst.

Nun wird das Zeitintervall $t - t_0$ in N äquidistante Schritte unterteilt. Später wird dann der Grenzübergang $N \to \infty$ durchgeführt, um einen kontinuierlichen Verlauf zu haben. Für die Unterteilung definiert man nun Folgendes:

$$\Delta t \equiv \frac{t-t_0}{N}$$

$$\varepsilon \equiv \frac{\Delta t}{\hbar}\,. \tag{6}$$

Hiermit kann die Übergangswahrscheinlichkeit aus (4) geschrieben werden als:

$$\boxed{\langle x|G(t,t_0)|y\rangle = \langle x|\exp(-i\varepsilon NH)|y\rangle = \langle x|(1-i\varepsilon H)^N|y\rangle} \ \textbf{Ia}. \tag{7}$$

Das zweite Gleichheitszeichen kommt aufgrund der Reihenentwicklung der Exponentialfunktion zustande. Zunächst gilt, daß $\exp(-i\varepsilon NH) = (\exp(-i\varepsilon H))^N$ ist. Nun entwickelt man $\exp(-i\varepsilon H)$:

$$\exp(-i\varepsilon H) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-i\varepsilon H)^n\,. \tag{8}$$

Da ε klein sein soll, kann die Reihenentwicklung nach der ersten Ordnung abgebrochen werden. Das Ziel soll nun sein, aus dem Hamiltonoperator die klassische Hamiltonfunktion zu machen. Dazu fügt man (N-1)-mal eine Identität in der Form $\int_{-\infty}^{\infty} dx_n |x_n\rangle\langle x_n| = 1$, n=1...N-1 in (7) ein. Die Identität stellt einen vollständigen Satz von Zuständen dar. Man erhält:

$$\boxed{\langle x|(1-i\varepsilon H)^N|y\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ldots dx_{N-1}\langle x|(1-i\varepsilon H)|x_{N-1}\rangle \ldots \langle x_1|(1-i\varepsilon H)|y\rangle} \ \textbf{Ib}. \tag{9}$$

Nun wird in jeden Faktor in (9) eine weitere Identität in der Form $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2\pi\hbar}dp_n |p_n\rangle\langle p_n| = 1$ eingefügt. Somit erhält man für einen einzelnen Faktor:

$$\langle x_n|(1-i\varepsilon H)|x_{n-1}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_{n-1}}{2\pi\hbar}\langle x_n|p_{n-1}\rangle\langle p_{n-1}|(1-i\varepsilon H)|x_{n-1}\rangle\,. \tag{10}$$

Nun erhält man die klassische Hamiltonfunktion H(p,x), denn :

$$\boxed{\langle p|\hat{P}^2 + V(\hat{X})|x\rangle = \langle p|p^2 + V(x)|x\rangle = (p^2 + V(x))\langle p|x\rangle} \ \textbf{IIa}$$

Wichtig hierbei ist, daß in Operatorschreibweise alle P-Operatoren links von den X-Operatoren stehen.

Mit Hilfe dieser Definition läßt sich (10) weiter umformen:

$$\boxed{\langle x_n |(1-i\varepsilon H)| x_{n-1}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_{n-1}}{2\pi\hbar}\langle x_n | p_{n-1}\rangle\langle p_{n-1} | x_{n-1}\rangle(1-i\varepsilon H(p_{n-1},x_{n-1}))}$$

$$\boxed{= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_{n-1}}{2\pi\hbar}\exp(\frac{i}{\hbar}p_{n-1}(x_n - x_{n-1}))(1-i\varepsilon H(p_{n-1},x_{n-1}))}\ \textbf{IIb}. \qquad (11)$$

Die Exponentialfunktion ergibt sich aus den Skalarprodukten $\langle x_n | p_{n-1}\rangle$ und $\langle p_{n-1} | x_{n-1}\rangle$, denn es ist

$\langle x_n | p_{n-1}\rangle = \exp(\frac{i}{\hbar}p_{n-1}x_n)$ und $\langle p_{n-1} | x_{n-1}\rangle = \exp(-\frac{i}{\hbar}p_{n-1}x_{n-1})$.

Diese Skalarprodukte lassen sich als Wellenfunktionen in verschiedenen Darstellungen interpretieren.
Beispielhaft wird dies nun für $\langle x|p\rangle$ verdeutlicht. Es gilt die folgende Eigenwertgleichung:

$$P|p\rangle = p|p\rangle .$$

Diese wird von links mit $\langle x|$ multipliziert:

$$\langle x|P|p\rangle = p\langle x|p\rangle .$$

In der Ortsdarstellung gilt für P:

$$P = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} .$$

Faßt man nun $\langle x|p\rangle$ als Wellenfunktion zum Impuls p in Ortsdarstellung auf, so erhält man:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_p(x) = p\psi_p(x)$$

$$\Rightarrow \psi_p(x) = \alpha\exp(\frac{i}{\hbar}px)$$

α ist eine Normierungskonstante, die bei meiner Normierung auf eins gesetzt wird.
Für die Wellenfunktion am Ort x in Impulsdarstellung ($\langle p|x\rangle$) verfährt man ähnlich. Man startet mit der Eigenwertgleichung $X|x\rangle = x|x\rangle$ und benutzt den Ortsoperator in Impulsdarstellung ($X = -\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dp}$).

An dieser Stelle sollte man kurz etwas über den Faktor $\frac{1}{2\pi\hbar}$ sagen. Dieser ergibt sich, wenn man durch Fouriertransformation von der Orts- in die Impulsdarstellung wechselt. Wo und wie man diesen Faktor einbringt ist Konvention. Man hätte z.B. anstatt $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2\pi\hbar}dp_n\,|p_n\rangle\langle p_n| = 1$ auch $\int_{-\infty}^{\infty}dp_n\,|p_n\rangle\langle p_n| = 1$ setzen können und müßte dann die Skalarprodukte jeweils mit dem Faktor $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ versehen.

Mit (11) läßt sich die Übergangswahrscheinlichkeit des Zeitentwicklungsoperators folgendermaßen schreiben:

$$\langle x|G(t,t_0)|y\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx_1dp_1}{2\pi\hbar}\ldots\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx_{N-1}dp_{N-1}}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_0}{2\pi\hbar}\exp(\frac{i}{\hbar}\sum_{n=0}^{N-1}p_n(x_{n+1}-x_n))\prod_{n=0}^{N-1}(1-i\varepsilon H(p_n,x_n)) .\qquad (12)$$

Hierbei sind die Ränder definiert als $x_0 \equiv y$ und $x_N \equiv x$.

Als nächstes soll nun der Ausdruck $\prod_{n=0}^{N-1}(1-i\varepsilon H(p_n,x_n))$ in eine Exponentialfunktion $\exp(\sum_{n=0}^{N-1}-i\varepsilon H(p_n,x_n))$ umgeschrieben werden. Betrachtet man nun eine Exponentialfunktion der Form exp(X) mit $X = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_n z_n$, wobei der Grenzwert endlich ist, so läßt sich mit Hilfe der Funktionalgleichung der Exponentialfunktion Folgendes erreichen:

$$\exp(X) = \lim_{N\to\infty}\prod_{n=1}^{N}\exp(\frac{z_n}{N}). \tag{13}$$

Macht man nun für jede der N Exponentialfunktionen eine Reihenentwicklung bis zur ersten Ordnung, so erhält man die gewünschte Beziehung:

$$\boxed{\exp(\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_n z_n) = \lim_{N\to\infty}\prod_{n=1}^{N}(1+\frac{z_n}{N})}\ \textbf{IIIa}. \tag{14}$$

Läßt man die Grenzwertbildung zunächst wieder weg (wird später am gesamten Ausdruck vorgenommen), so kann man folgende Ersetzung vornehmen:

$$\prod_{n=0}^{N-1}(1-i\varepsilon H(p_n,x_n)) = \exp(\sum_{n=0}^{N-1}-i\varepsilon H(p_n,x_n)) = \exp(i\varepsilon\sum_{n=0}^{N-1}-H(p_n,x_n)).$$

Nimmt man nun diese Ersetzung in (12) vor, so erhält man:

$$\langle x|G(t,t_0)|y\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx_1dp_1}{2\pi\hbar}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx_{N-1}dp_{N-1}}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_0}{2\pi\hbar}\exp(\frac{i}{\hbar}\Delta t\sum_{n=0}^{N-1}(\frac{p_n(x_{n+1}-x_n)}{\Delta t}-H(p_n,x_n))). \tag{15}$$

Gleichung (15) ist die sogenannte Feynmansche Pfadintegralformel.

Nun soll der früher angekündigte Grenzübergang $N\to\infty$ bzw. $\Delta t\to 0$ durchgeführt werden. Dies bedeutet, daß man von diskreten Schritten zum Kontinuum übergeht. Hierzu werden folgende Definitionen vorgenommen:

$$t_n = t_0 + n\Delta t$$

$$x_n = x(t_n)$$

$$p_n = p(t_n). \tag{16}$$

Aufgrund des Grenzwertprozesses müssen in (15) noch folgende Übergänge berücksichtigt werden:

$$\frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t}\xrightarrow[\Delta t\to 0]{}\dot{x}(t_n)$$

$$\sum_{n=0}^{N-1}f(t_n)\Delta t\xrightarrow[\Delta t\to 0]{}\int_{t_0}^{t}dt\ f(t). \tag{17}$$

Der Übergang von der Summe zum Integral betrifft beide Summanden in (15). Mit diesen Ersetzungen ergibt sich nun Folgendes:

$$\langle x|G(t,t_0)|y\rangle = \lim_{N\to\infty}(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx_1dp_1}{2\pi\hbar}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx_{N-1}dp_{N-1}}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_0}{2\pi\hbar})\exp(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt\,(p(t)\,\dot{x}(t)-H(p(t),x(t)))),$$

$$x(t_0)=y,\ x(t)=x. \tag{18}$$

Für die Integrationsmaße schreibt man im Limes auch:

$$\lim_{N\to\infty}(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx_1dp_1}{2\pi\hbar}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx_{N-1}dp_{N-1}}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_0}{2\pi\hbar}) \equiv \int_{(y,t_0)\to(x,t)}D'x\int\frac{Dp}{2\pi\hbar}. \tag{19}$$

(19) wird nun als Pfadintegral bezeichnet. Man erhält also als Übergangswahrscheinlichkeit des Zeitentwicklungsoperators zwischen zwei lokalisierten Zuständen:

$$\boxed{\langle x|G(t,t_0)|y\rangle = \int_{(y,t_0)\to(x,t)}D'x\int\frac{Dp}{2\pi\hbar}\exp(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt\,(p(t)\,\dot{x}(t)-H(p(t),x(t))))}\ \textbf{IIIb}. \tag{20}$$

Der Strich am Integrationsmaß D'x soll symbolisieren, daß die Anzahl der Ortsintegrationen um eins geringer ist als die Anzahl der Impulsintegrationen. Diese Asymmetrie rührt daher, daß man Anfangs- und Endpunkt ja bei jeder Integration über einen Weg festhält. Sie ist aber nicht darauf festgelegt, daß die Impulsintegrationen immer in der Überzahl sind. Wäre man das ganze Problem in der Impulsdarstellung angegangen, hätte man Anfangs- und Endimpulse festzuhalten. Dadurch würde dann ein zusätzliches Ortsintegral notwendig werden:

$$\langle p_b|G(t,t_0)|p_a\rangle = \int_{(p_a,t_0)\to(p_b,t)}\frac{D'p}{2\pi\hbar}\int Dx\exp(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt\,(-x(t)\,\dot{p}(t)-H(p(t),x(t)))). \tag{21}$$

Die Gleichungen (20) und (21) stellen in sehr allgemeiner Weise das Pfadintegral dar. Als Feynman den Formalismus entwickelte, machte er die Annahme, daß die Hamiltonfunktion in der Regel wie folgt aussieht:

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)\,. \tag{22}$$

Geht man mit dieser Annahme noch einmal in (15) zurück, so lassen sich die p-Integrationen explizit ausführen. Die Exponentialfunktion läßt sich dann folgendermaßen zerlegen:

$$\begin{aligned}&\exp(\frac{i}{\hbar}\Delta t\sum_{n=0}^{N-1}(\frac{p_n(x_{n+1}-x_n)}{\Delta t}-H(p_n,x_n)))\\&=\exp(\frac{i}{\hbar}\Delta t\sum_{n=0}^{N-1}(\frac{p_n(x_{n+1}-x_n)}{\Delta t}-\frac{p_n^2}{2m}))\exp(\frac{i}{\hbar}\Delta t\sum_{n=0}^{N-1}-V(x_n))\,.\end{aligned} \tag{23}$$

Hiermit wird aus (15):

$$\langle x|G(t,t_0)|y\rangle=\prod_{n=1}^{N-1}\left[\int_{-\infty}^{\infty}dx_n\right]\exp(\frac{i}{\hbar}\Delta t\sum_{n=0}^{N-1}-V(x_n))\prod_{n=0}^{N-1}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_n}{2\pi\hbar}\right]\exp(\frac{i}{\hbar}\Delta t\sum_{n=0}^{N-1}(-\frac{1}{2m}p_n^2+\frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t}p_n)) \tag{24}$$

Die Integrale über p sind Gaußintegrale und lassen sich exakt lösen. Hierzu dient folgende Formel:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty}dy\exp(-ay^2+by)=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\exp(\frac{b^2}{4a})}\ \textbf{IVa}. \tag{25}$$

Beweis von (25):

Um das Integral in (25) zu berechnen, macht man eine quadratische Ergänzung und kann den Exponenten folgendermaßen schreiben:

$$-ay^2+by=-ay^2+by-\frac{b^2}{4a}+\frac{b^2}{4a}=-a(y-\frac{b}{2a})^2+\frac{b^2}{4a}$$

Hiermit ergibt sich:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dy\exp(-ay^2+by)=\exp(\frac{b^2}{4a})\int_{-\infty}^{\infty}dy\exp(-a(y-\frac{b}{2a})^2)$$

Nun führt man folgende Variablentransformation durch: $x=y-\frac{b}{2a}$.

Für die Integrationsmaße gilt, daß dx=dy. Die Integrationsgrenzen bleiben unverändert, da man lediglich eine Verschiebung auf der reellen Achse vornimmt. Somit erhält man:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dy\exp(-ay^2+by)=\exp(\frac{b^2}{4a})\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-ax^2)$$

Um das verbleibende Integral auszurechnen, bedient man sich nun eines Tricks, man berechnet das Quadrat des Integrals:

$$(\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-ax^2))^2=\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-ax^2)\int_{-\infty}^{\infty}dy\exp(-ay^2)=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\exp(-a(x^2+y^2))$$

Nun macht man eine Variablentransformation auf ebene Polarkoordinaten:

$$x=r\cos(\varphi),\ y=r\sin(\varphi),\ dxdy=rdrd\varphi$$

Hiermit läßt sich nun weiterrechnen:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\exp(-a(x^2+y^2))=\int_{-\infty}^{\infty}dr\,r\int_{-\infty}^{\infty}d\varphi\exp(-ar^2)=-\frac{\pi}{a}\int_{-\infty}^{\infty}dr\,(-2ar)\exp(-ar^2)=\frac{\pi}{a}$$

Somit erhält man für das zu berechnende Integral die Wurzel aus diesem Ergebnis. Hiermit ist die Formel (25) bewiesen.

Exemplarisch wird nun ein Integral berechnet:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_0}{2\pi\hbar}\exp(-\frac{i\Delta t}{2m\hbar}p_0^2+\frac{i(x_1-x_0)}{\hbar}p_0)\underset{(25)}{=}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\Delta t}}\exp(-\frac{m(x_1-x_0)^2}{2i\hbar\Delta t})\,. \tag{26}$$

Führt man alle p-Integrationen aus, so erhält man N-mal den Faktor vor der Exponentialfunktion. Faßt man schließlich noch die Exponentialfunktionen wieder zusammen, so wird aus (24):

$$\boxed{\langle x|G(t,t_0)|y\rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\Delta t}\right)^{\frac{N}{2}} \prod_{n=1}^{N-1}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n\right] \exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta t\sum_{n=0}^{N-1}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t}\right)^2 - V(x_n)\right)\right)} \quad \textbf{IVb}. \tag{27}$$

Nun wird der Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$ durchgeführt. Dabei geht die Summe

$\sum_{n=0}^{N-1}\Delta t\left(\frac{m}{2}\left(\frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t}\right)^2 - V(x_n)\right)$ über in das Integral $\int_{t_0}^{t} dt\,\left(\frac{m}{2}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x)\right)$.

Die Darstellung einer quantenmechanischen Amplitude durch ein Pfadintegral wie in (27) hat eine anschauliche Interpretation, wenn man sie mit der statistischen Mechanik vergleicht. Mit Hilfe des Pfadintegrals werden alle möglichen Bahnen vom vorgegebenen Anfangs- zum Endpunkt durchlaufen. Dabei wird jedem möglichen Weg eine reine Phase ($\exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta t\sum_{n=0}^{N-1}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t}\right)^2 - V(x_n)\right)\right)$) zugeordnet. Die Summe all dieser Phasen ergibt dann die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, daß das Teilchen auch tatsächlich vom Anfangs- zum Endpunkt gelangt. In der statistischen Mechanik gehört zu jeder Bahn ein reeller Boltzmannfaktor ($\exp\left(-\frac{E}{b_B T}\right)$), der direkt, in Abhängigkeit der aufzubringender Energie und der vorherrschenden Temperatur, die Wahrscheinlichkeit angibt, daß dieser Weg vom Teilchen durchlaufen wird. In der Summe aller möglichen Bahnen ergibt sich dann die Gesamtwahrscheinlichkeit, daß das Teilchen von A nach B gelangt.
Im Grenzübergang wird aus der Summe über die Phasen die Lagrangesche Form der Wirkung, das sogenannte Wirkungsfunktional S. In der klassischen Mechanik wird dieses Funktional für die physikalisch tatsächlich durchlaufene Bahn extremal (δ S=0).
Die bisherigen Rechnungen wurden alle in einer Dimension durchgeführt. Die Verallgemeinerung auf drei Dimensionen ist relativ einfach. Dabei wird aus jeder x-Integration eine räumliche Integration und man erhält den Vorfaktor entsprechend öfter. Als Propagator erhält man:

$$G(\vec{x},t;\vec{y},t_0) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\Delta t}\right)^{\frac{3N}{2}} \prod_{n=1}^{N-1}\left[\int_{-\infty}^{\infty} d^3x_n\right] \exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta t\sum_{n=0}^{N-1}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t}\right)^2 - V(x_n)\right)\right). \tag{28}$$

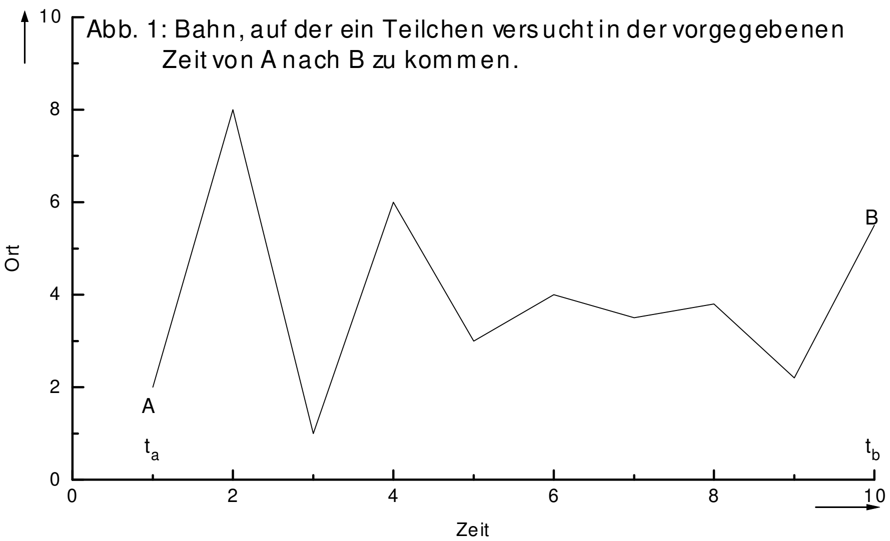

Abb. 1: Bahn, auf der ein Teilchen versucht in der vorgegebenen Zeit von A nach B zu kommen.

Wenn die Ausdrücke auch recht kompliziert aussehen, so lassen sich doch einige Beispiele (freies Teilchen, linearer harmonischer Oszillator) exakt berechnen.

<u>Beispiel:</u> Propagator eines freien Teilchens

Für das freie Teilchen gilt, daß kein Potential vorhanden ist, also V=0 ist. Somit nimmt der Propagator folgende Gestalt an:

$$G(x,t;y,t_0)=\lim_{N\to\infty}(\frac{m}{2\pi\hbar i\Delta t})^{\frac{N}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\left[\int_{-\infty}^{\infty}dx_n\right]\exp(\frac{im}{2\hbar\Delta t}\sum_{n=0}^{N-1}(x_{n+1}-x_n)^2)\,, \tag{29}$$

wobei gilt, daß $x_N = x$ und $x_0 = y$.
Nun gilt folgende Identität:

$$\int_{-\infty}^{\infty}du\,\sqrt{\frac{a}{\pi}}\exp(-a(x-u)^2)\sqrt{\frac{b}{\pi}}\exp(-b(u-y)^2)=\sqrt{\frac{ab}{\pi(a+b)}}\exp(-\frac{ab}{a+b}(x-y)^2)\,. \tag{30}$$

Dies läßt sich leicht mit (25) überprüfen. Führt man nämlich die Quadrate in den Exponentialfunktionen aus, so erhält man:

$$\sqrt{\frac{a}{\pi}}\sqrt{\frac{b}{\pi}}\exp(-ax^2-by^2)\int_{-\infty}^{\infty}du\,\exp(-u^2(a+b)+u(2ax+2by))\,. \tag{31}$$

Das Integral läßt sich mit (25) lösen. Durch ein paar Zusammenfassungen in den Exponentialfunktionen erhält man dann (30). Nun soll mit Hilfe dieser Formel die x_1-Integration ausgeführt werden. Hierzu sind in (29) die ersten beiden Summanden in der Exponentialfunktion zu berücksichtigen, so daß folgendes Integral berechnet werden muß:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\,\exp(\frac{im}{2\hbar\Delta t}(x_1-x_0)^2+\frac{im}{2\hbar\Delta t}(x_2-x_1)^2)\,. \tag{32}$$

Um exakt ein Integral der Form (30) zu bekommen sind noch drei Dinge zu berücksichtigen:

1.) Die quadratischen Ausdrücke in den Exponentialfunktionen sind symmetrisch, d.h. $(x_1-x_0)^2=(x_0-x_1)^2$.

2.) Das Minuszeichen erhält man, in dem man mit $\frac{i}{i}$ erweitert, d.h. $\frac{im}{2\hbar\Delta t}\frac{i}{i}=-\frac{m}{2\hbar i\Delta t}$.

3.) Um die Faktoren $\sqrt{\frac{a}{\pi}}$ bzw. $\sqrt{\frac{b}{\pi}}$ zu erhalten, erinnere man sich daran, daß in (29) noch N-mal der Ausdruck $\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\Delta t}}$ steht. Hiervon werden zwei Stück genommen, um die obigen Faktoren zu erhalten.

Führt man die drei genannten Dinge durch, so erhält man:

$$\frac{m}{2\pi\hbar i\Delta t}\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\,\exp(-\frac{m}{2\hbar i\Delta t}(x_0-x_1)^2)\exp(-\frac{m}{2\hbar i\Delta t}(x_1-x_2)^2)\,. \tag{33}$$

Mit (30) ergibt sich die Lösung nun sofort zu:

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(2\Delta t)}}\exp(\frac{im}{2\hbar(2\Delta t)}(x_2-x_0)^2)\,. \tag{34}$$

Als nächstes würde man auf die gleiche Weise Folgendes ausrechnen:

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(2\Delta t)}}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\Delta t}}\int_{-\infty}^{\infty}dx_2\,\exp(-\frac{m}{2\hbar i(2\Delta t)}(x_0-x_2)^2)\exp(-\frac{m}{2\hbar i\Delta t}(x_2-x_3)^2)\,. \tag{35}$$

Um ein Ausdruck der Form (30) zu erhalten, wurde u.a. wieder ein Faktor $\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\Delta t}}$ dazugenommen. Als Ergebnis ergibt sich:

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(3\Delta t)}}\exp(\frac{im}{2\hbar(3\Delta t)}(x_3-x_0)^2)\,. \tag{36}$$

Anhand der Ausdrücke (34) und (36) erkennt man nun, was bei jeder neuen Integration passiert. Sowohl im Vorfaktor als auch in der Exponentialfunktion wird bei jeder Integration die Anzahl der Δt um eins erhöht. Außerdem wird bei der n-ten Integration x_n in der Exponentialfunktion durch x_{n+1} ersetzt. Somit erhält man nach (N-1) Integrationen mit der Definition von Δt (6) und der Festlegung der Randpunkte:

$$G(x,t;y,t_0)=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t-t_0)}}\exp(\frac{im}{2\hbar(t-t_0)}(x-y)^2)\,. \tag{37}$$

Dies ist die Zeitentwicklungsamplitude des freien Teilchens.
Mit Hilfe der Schrödingertheorie und dem Operatorformalismus hätte man ebenfalls dieses Ergebnis erhalten können. Es gilt nämlich:

$$G(x,t;y,t_0)=\langle x|G(t,t_0)|\,y\rangle=\langle x|\exp(-\frac{i}{2\hbar m}(t-t_0)P^2)|\,y\rangle\,. \tag{38}$$

Vor dem y wird eine Identität ($\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar}|\,p\rangle\langle p|=1$) eingefügt.

$$\begin{aligned}G(x,t;y,t_0)&=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar}\langle x|\exp(-\frac{i}{2\hbar m}(t-t_0)P^2)|\,p\rangle\langle p|y\rangle\\&=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar}\exp(-\frac{i}{2\hbar m}(t-t_0)p^2)\langle x|p\rangle\langle p|y\rangle\end{aligned} \tag{39}$$

Die Skalarprodukte sind wie zu Beginn definiert. Man erhält ein Gaußintegral vom Typ (25):

$$G(x,t;y,t_0)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar}\exp(-\frac{i}{2\hbar m}(t-t_0)p^2+\frac{i}{\hbar}(x-y)p)\,. \tag{40}$$

Bei der Auswertung von (40) mit (25) erhält man wiederum (37). Hieraus sieht man, daß beide Verfahren (Operatorformalismus und Pfadintegralmethode) diegleichen Ergebnisse liefern.
Allerdings gibt es auch Situationen, in denen die Lösung mit dem Operatorformalismus erst durch die Pfadintegralmethode ermöglicht wurde. Da die Pfadintegralmethode einen pfadgeometrischen Zugang zur Quantenmechanik in nichteuklidischen Räumen mit Krümmung und Torsion erlaubt, können Probleme hier geometrisch gelöst werden. Der Operatorformalismus hatte hier mit Operatorordnungsproblemen zu kämpfen, die durch die Ergebnisse über die Pfadintegralmethode beseitigt wurden. Dies würde für eine Einführung aber eindeutig zu weit führen.

Literaturverzeichnis

L. Schulman, Techniques and Applications of Path Integration, Wiley 1981

H. Kleinert, Pfadintegrale, BI Wissenschaftsverlag 1993

Kerson Huang, Quarks Leptons & Gauge Fields, 2nd edition, World Scientific 1992

H. Schulz, Physik mit Bleistift, 2. Auflage, Springer Verlag 1993

W. Nolting, Band 2: Analytische Mechanik, 3. Auflage, Verlag Zimmermann-Neufang 1993

W. Nolting, Band 5: Quantenmechanik, Teil 1: Grundlagen, 2. Auflage, Verlag Zimmermann-Neufang 1994