Das Pfadintegral in der Quantenmechanik

Michael Döring

4. Mai 1999

Zusammenfassung

Pfadintegrale sind eine Berechnungsmethode für die zeitliche und räumliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems. Das Pfadintegral stellt einen Ausdruck für den Propagator G dar, der als Operator formal auf den Ausgangszustand $|\Psi_0\rangle$ wirkt und die zeitentwickelte Amplitude des Systems liefert. Die Formulierung des Pfadintegrals lehnt sich eng an den Lagrangeformalismus an, wie er aus der klassischen Mechanik bekannt ist. Der Anteil der klassischen Bahn ist maximal über alle möglichen Bahnen

1 Übersicht

Zunächst wollen wir uns das Prinzip der Lagrangeformulierung ins Gedächtnis rufen und den Unterschied seiner Anwendung in der klassischen und in der Quantenphysik herausarbeiten. Die groben Vorstellungen wollen wir zunächst suggestiv in Mathematik verwandeln und nach dem Korrepondenzprinzip den klassischen Grenzfall suchen. Danach werden wir auf zwei verschiedene Weisen eine genaue Formulierung finden: erst eine anschauliche nach Feynman, dann eine streng abgeleitete nach Schulmann. Versehen mit diesen mächtigen Ergebnissen, werden wir die Bewegung eines freien Teilchens untersuchen.

2 Der Lagrangeformalismus

Eine Einführung in den Lagrangeformalismus erscheint ratsam, weil dieser in den Vorlesungen höchstens gestreift wurde. Wir bestimmen die klassische Bewegung eines klassischen Teilchens in einem konservativen Kraftfeld durch das Minimum des Funktionals S. Dabei ist t_a die Startzeit am Punkt a und t_b die Zeit, an der das Teilchen den Endpunkt b erreicht haben soll. Wir legen also die Teilchenbahn anders als gewöhnlich nicht durch Vorgabe von Startzeit und Startgeschwindigkeit vor und lösen das Anfangswertproblem einer Differentialgleichung zweiter Ordnung, sondern geben neben Startzeit und -ort auch das Ende der Bahn mitsamt der Zeit, die das Teilchen dafür brauchen soll, fest. Dadurch ist die Bahn ebenfalls eindeutig bestimmt, was natürlich noch zu zeigen wäre. Wir schreiben also:

$$S = S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t)dt. \tag{1}$$

Dabei bezeichnet L die Lagrangefunktion dieses speziellen Systems. Sie hat hier die Form:

$$L(\dot{x}, x) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x). \tag{2}$$

Unser Potential V soll nicht explitit von der Zeit abhängen.

Satz:

Die tatächliche Bahn des Körpers ist gegeben durch ein Extremum von S, d.h. der wahre Pfad $\overline{x}(t)$ ist gegeben durch die Gleichung $\delta S{:=}S[\overline{x}(t)+\delta x]-S[\overline{x}(t)] = 0$. Dabei bezeichnet $\delta x(t)$ die infinitesimale Änderung des Pfades zur Zeit t. Es handelt sich also um kein gewöhnliches Differntail, sondern um das Differential eines Funktionals.

Beweis:

Physik IV, etwa Mitte der Vorlesung

Wir können die Formeln (1) und (2) benutzen und unsere infinitesimale Änderung der Wirkung S schreiben als

$$\begin{aligned}
\delta S &= S[x(t) + \delta x] - S[x(t)] \\
&= \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x} + \delta\dot{x}, x + \delta x, t)dt - S[x(t)] \\
&= \int_{t_a}^{t_b} [L(\dot{x}, x, t) + \delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}} + \delta x\frac{\partial L}{\partial x}]dt - s[x(t)] \\
&= \int_{t_a}^{t_b} [\delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}} + \delta x\frac{\partial L}{\partial x}]dt. \qquad (3)
\end{aligned}$$

Ergänze bei $x, \dot{x}$ jeweils die Abhängigkeit von t. In der letzten Zeile können wir den ersten Summanden des Integranden partiell integrieren. Dabei fällt der Randterm weg, weil die Variation an Anfangspunkt a und Endpunkt b der Bahn 0 ist. Das verbleibende Integral soll 0 werden. Dafür fordern wir, daß der Integrand identisch in der Zeit verschwindet:

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0. \tag{4}$$

Das identische Verschwinden kann man damit begründen, daß ja jeder Ausschnitt der Teilchenbahn durch ein Wirkungsintegral dargestellt werden kann und deshalb das Integral für beliebige Grenzen 0 sein muß. Ein Satz aus der Riemann-Theorie liefert dann das Behauptung. Die Gleichung (4) ist als Euler-Lagrange-Gleichung bekannt. Setzt man in (4) einmal die Lagrangefunktion (2) ein, erhält man die newtonsche Bewegungsgleichung

$$m\ddot{x} = -\nabla V(x) \tag{5}$$

Das Problem läuft also darauf hinaus, (4) bei bekannter Lagrange-Funktion zu lösen.

2.1 Bedeutung des Lagrange-Formalismus

In der klassischen Mechanik bedeutet das Verschwinden der Variation, daß sich S in erster Ordnung nicht ändert: "Die Ableitung ist 0". Man kann es auch so ausdrücken: Das Teilchen wählt die Bahn geringster Wirkung. Für Licht gilt nach dem Fermatschen Prinzip Ähnliches: Das Licht sucht sich die Bahn geringster Zeit, um von Punkt a nach Punkt b zu kommen.
Veranschaulichung: Analogie Brechung – Weg am Strand
Dabei "testet"es auch benachbarte Pfade. Wir haben beim Licht jedoch eine entscheidende Erweiterung des besprochenen Lagrange-Formalismus: Wir betrachten zu jedem möglichen Pfad die resultierende zugehörige Phase der elektromagnetischen Welle am Endpunkt. Diese ändert sich in der Nähe des wirklichen Lichtweges nur wenig, weil sich die Lichtlaufzeiten dort in erster Ordnung nicht ändern . Bei geringer Änderung einer makroskopisch davon abweichenden Bahn verschiebt sich die Phase jedoch gewaltig. Die Regel lautet nun: Addiere die Phasen aller möglichen Bahnen am Endpunkt, um die resultierende Phase zu erhalten. Dabei mitteln sich alle Anteile dieser Summe weg, die abwegigen Lichtbahnen entsprechen. Daß das tatsächlich so ist, kann man man z.B. an der Reflexion am Spiegel erkennen: Schattet man bei abwegigen Reflexionspunkten z.B. alle Bahnen die zu resultierenden Phasen zwischen 0 und π führen, ab, erhält man von dort plötzlich ebenfalls einen Lichtschein: Wir haben ein Gitter vorliegen! Formal müssen wir nach folgendem Gesetz die Summe über alle möglichen Lichtwege bilden:$\sum \phi[x(t)]$ mit $\phi[x(t)] \sim e^{iS}$ mit einer geeignet definierten Wirkung S.

2.2 Bedeutung des Lagrangeformalismus in der Quantenmechanik

In der Quantenmechanik haben wir es mit Übergangswahrscheinlichkeiten zu tun. Diese schreiben wir als $P(b,a) = |K(b,a)|^2$ mit einer Amplitude K(b,a), um von a nach b zu gelangen (in einer *bestimmten* Zeit). Wir vermuten, daß sich K aus der Summe der Amplituden über alle möglichen Pfade zusammensetzt, daß nun aber auch *Pfade abseits des klassisch möglichen dazu signifikant beitragen*, da die Unschärferelation gilt. Wir setzen also an:

$$K(b,a) = \sum_{x(\cdot)} \phi[x(t)] = \langle \Psi(r,t_a) | \Psi(r,t_b) \rangle. \tag{6}$$

$x(\cdot)$ bedeutet Summe über alle möglichen Pfade. Weiterhin setzen wir die Phase als komplexe Welle an, die ähnlich wie in der Optik die Wirkung S enthält:

$$\phi[x(t)] = ce^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]} \tag{7}$$

mit einer noch zu bestimmenden Konstanten c. Die genaue Rechtfertigung dieses Resultates folgt später.

2.3 Der klassische Grenzfall

Gehen wir von einer makroskopischen Bewegung aus, so sind die Werte von Masse, Raum und Zeit so groß, daß S/$\hbar$ eine sehr große Zahl wird. Eine kleine Änderung des Pfades wird also eine enorme Änderung von ϕ verursachen. Wie beim Licht, tragen also nur die Wege nahe der extremalen Wirkung zu der Summe bei: Lassen wir also entfernte Pfade in der Summation fort, ändert sich nichts, und wir können z.B. in einem solchen Pfad eine Abschirmung plazieren, ohne die resultierende Amplitude wesentlich zu ändern. Genauer gesagt, tragen die Pfade bei, deren Änderung der Wirkung die Größenordnung von $\hbar$ nicht überschreiten. Wir erkenennen daran, daß die klassische Bahn nur bis auf die Größenordnung $\hbar$ festgelegt ist und sich darunter das Unschärfeprinzip bemerkbar macht.

3 Das Pfadintegral: Plausibilitätsbetrachtung

Um die Phasen aller Pfade zu addieren, unterteilen wir die Zeit äquidistant in N Intervalle der Länge ϵ. $t_0 = t_a, t_N = t_b$. Nehmen wir zunächst an, die Regel zur Addition heißt: "Addiere nicht über alle möglichen Wege. Auswahl besteht nur, daß ein bestimmter Punkt x_1, der zur Zeit t_1 erreicht ist, beliebig liegt und ansonsten gerade Linien beschritten werden." Dann müssen wir die Summe über alle möglichen Positionen von x_1 bilden, die wir als Integral schreiben:

$$K(b,a) \sim \int_{\Re^3} \phi[x(t)]dx_1 \qquad \text{(vorläufig)}. \tag{8}$$

Durch Hinzunahme eines beliebigen zweiten Punktes $x_2 \neq x_1$ zu einer Zeit $t_2 > t_1$ müssen wir nun über neue Wege integrieren. Dabei soll die Bewegung geradlinig bis zum ersten, dann geradlinig bis zum zweiten und dann geradlinig bis zum Endpunkt führen. Die Möglichkeiten multiplizieren sich also:

$$K(b,a) \sim \int_{\Re^3} \int_{\Re^3} \phi[x(t)]dx_1 dx_2 \qquad \text{(vorläufig)}. \tag{9}$$

Wie man erkennt, erhält man durch sukzessive Fortsetzung dieses Verfahrens und die obige äquidistante Unterteilung der Zeit schließlich einen Ausdruck, der sich über alle (stetigen) Bahnen (mit jeder möglichen Zeitparametrisierung, insoweit die vorgeschriebene Lagrangebedingung eingehalten wird) erstreckt:

$$K(b,a) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{A} \int \cdots \int e^{\frac{i}{\hbar} S[b,a]} \frac{dx_1}{A} \cdots \frac{dx_{N-1}}{A} \qquad \text{(endgültig)}. \tag{10}$$

Dabei ist

$$A = \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m}} \tag{11}$$

die Normierungskonstante. Diese werden wir sogleich ableiten. S[b,a] bedeutet die zugehörige Wirkung mit den AP a und EP b und *hängt natürlich von* $x_1 \cdots x_{N-1}$ *ab.*

Wir definieren eine neue Schreibweise für Ausdruck (10):

$$K(b,a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar}S[b,a]}\mathcal{D}x(t). \tag{12}$$

Wie wir aus unserer Veranschaulichung des Pfadintegrals schließen können, multiplizieren sich zeitlich sukzessive Ereignisse: Sei K(b,a) ersetzt durch einen Vorgang, bei dem das Teilchen zur Zeit t_c einen vorgegebenen "Zwischenaufenthalt" bei c machen soll. Dann gilt: S[b,a]=S[b,c]+S[c,a], was einer einer Multiplikation aller möglichen Pfade entspricht, die von a nach c laufen mit denen die von c nach b laufen.

Wenn nun Punkt c beliebig ist, müssen wir unser $K(b,a)_c$ über alle möglichen Werte von x_c integrieren. Wir haben dann die Ausgangssituation ohne Festlegung der Bahn in c. So gilt:

$$K(b,a) = \int_{x_c} K(b,c)K(c,a)dx_c. \tag{13}$$

Wir stellen fest: *Amplituden von Ereignissen, die nacheinander stattfinden, multiplizieren sich, während sich die Wirkungen addieren.*
Analogie: Bedingte Wahrscheinlichkeiten.

4 Herleitung des Pfadintgrals

Nach diesen recht suggestiven und vorläufigen Veranschaulichungen wollen wir nun R. Feynmans Darstellung verlassen und Schulmanns Herleitung folgen. Trotzdem sollte man das oben Beschriebene nicht zu gering einschätzen, liefert es doch die nötige Anschauung (, die zumindest der Vortragende fast überall vermißt.)

Der "Kernel" K(b,a) ist nichts anderes als der quantenmechanische Propagator. Der Propagator G, der sich als Greensche Funktion erweisen wird, erlaubt es, die zeitliche Entwicklung eines Zustands zu berechnen. Es gilt, G in der Gleichung

$$\Psi(x,t) = \int_{\mathcal{R}^3} dy' G(x,t,y',t_0)\Psi(y',t_0) \tag{14}$$

zu berechnen.
Der oben hergeleitete Kernel beschreibt die Amplitude dafür, daß ein Teilchen am Ort a startet. Haben wir eine ganze Anfangswellenfunktion $\Psi(y,t_0)$ als Startverteilung, können wir schreiben:

$$\Psi(x,t) = \int_{\mathcal{R}^3} K(x,t;y,t_0)\Psi(y,t_0)dy. \tag{15}$$

Dabei haben wir t und t_0 im Kernel als die zu x und y gehörenden Zeiten ergänzt. Wie man sieht, gilt K = G. Es ist natürlich auch

$$K(b,a) = \langle\Psi(x,t)|\Psi(y,t_0)\rangle \tag{16}$$

in der Bra – ket – Schreibweise.

Setzen wir einmal $\Psi(x,t)$ aus Gleichung (14) in die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$(H - i\hbar\frac{\partial}{\partial t})\Psi(x,t) = 0 \tag{17}$$

ein. Durch Vertauschung von Integration und Differentation erhalten wir die Tatsache, daß auch G eine Lösung der Schrödingergleichung ist (abgesehen von $G(t_0, t_0)$.

Wir definieren nun G neu als das zum Operator der Schrödingergleichung Inverse:

$$(H_x - i\hbar\frac{\partial}{\partial t})G(x,t;y,t_0) = -i\hbar\delta(x-y)\delta(t-t_0) \qquad \text{(Ortsdarstellung).} \tag{18}$$

G kann natürlich auch geschrieben werden als:

$$G(x,t;y,t_0) = \langle x|G(t,t_0|y\rangle. \tag{19}$$

Warum haben wir einen inhomogenen Term auf der rechten Seite ergänzt? Wieso können wir den Schrödingeroperator überhaupt invertieren, der doch gerade alle Wellenfunktionen auf die Null abbildet, und zwar surjektiv? Die Antwort: Die Inhomogenität kommt durch die Anfangs-Randbedingung zustande, nämlich den Zustand zur Zeit t_0. Die Gleichung besagt ja gerade: Wenn ich in G x = y wähle und $t = t_0$, dann liefert mir G die Identität. Für Ungleichheit in x oder t liefert dann Gleichung (18) den Ausdruck 0 = 0 und gilt immer noch. Daran erkennt man weiterhin, daß G eine Funktion liefert, *die zu jeder Zeit die Schrödingergleichung erfüllt.* Der Trick an unserer Definition (18) besteht also darin, daß wir am Anfangszustand unsere Schrödingergleichung verletzen, sonst aber beibehalten. Diese Verletzung ist nicht weiter tragisch, denn sie liefert uns für den Anfangszustand für G die Identität, wie wir es von einem ordentlichen Zeitentwicklungsoperator erwarten. Allein die Tatsache, daß G uns zu späteren Zeiten eine Funktion liefert, die die Schrödingergleichung erfüllt, sichert uns schon Eindeutigkeit der Inversion und der Zeitentwicklung. G ist also wohldefiniert und

$$|\Psi(t)\rangle = G(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle. \tag{20}$$

Als Analogie betrachten wir die lineare Antworttheorie: Sei L ein linearer Operator mit Ly(x)=f(x). Im Beispiel eines Pendels steht links der Schwingungsoperator und rechts eine zeitabhängige Störung F(t). Dann hatten wir in Physik III gesehen, daß die durch $LG(x-x_0) = \delta(x-x_0)$ definierte Greensche Funktion G die Antwort auf den Delta-Impuls darstellt und die Antwort y(x) superponiert werden kann zu

$$y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 f(x_0)G(x,x_0). \tag{21}$$

Dabei muß das Integral wegen Kausalität nur bis bis x laufen, wenn x die Zeit bedeutet.

In Gleichung (20) haben wir im Unterschied zu hier kein Integral, weil wir uns in Operatorenschreibweise bewegen. Zur Integralschreibweise in (14) gelangt man, indem man in (20) einen Satz Eigenzustände von G ergänzt und darüber integriert.
Für einen zeitunabhängigen Hamiltonian können wir die Greensche Funktion aus Quantenmechanik I übernehmen (dort hieß sie U und wurde als unitär bewiesen.):

$$G(t, t_0) = \theta(t - t_0) \exp[-\frac{iH(t - t_0)}{\hbar}], \tag{22}$$

wobei

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } t \leq 0 \\ 0 & \text{für } t > 0 \end{cases}$$

Für einen zeitabhängigen Hamiltonian müßten wir den Exponenten als Integral schreiben.

Da Feynman vor Rechnungen mit Operatoren im Exponenten zurückschreckte und wir uns ihm da anschließen wollen, versuchen wir den Ausdruck zu vereinfachen, was uns auf die Berechnung eines beliebig oft verschachtelten Integrals führen wird, eine bekanntermaßen trivialen Übung. Teilen wir also die Zeit in N Intervalle und setzen $\lambda = it/\hbar$. So können wir für den Hamiltonian ansetzen: $exp(H) = (exp(H/N))^N$. Diese Umformung ist unproblematisch, da H mit sich selbst vertauscht.
Satz: Es gilt mit $H = T+V$:

$$e^{-\lambda(T+V)/N} = e^{-\lambda T/N} e^{-\lambda V/N} + O(\frac{\lambda^2}{N^2}). \tag{23}$$

Beweis:

Löst man nach O(...) auf und entwickelt die drei Exponentialterme in eine Potenzreihe (wenn man vorher diesen Schritt durch Betrachtung der Operatornorm von H, T und V rechtfertigen kann), so kann man Koeffizientenvergleich der a_n in den Termen $1, \lambda/N, \lambda^2/N^2$ durchführen und erhält erst ab dem quadratischen Term Entwicklungskoeffizienten ungleich Null: $a_0 : 1 - 1 = 0; a_1 : (T + V) - V - T = 0; a_2 : \frac{1}{2}(T + V)^2 - \frac{1}{2}(V^2 + T^2) - TV = \frac{1}{2}[V, T]$ (Beachte dazu die Möglichkeiten, die Terme des Summenproduktes zur zweiten Potenz in $\frac{\lambda^2}{N^2}$ zu kombinieren inkl. Fakultätsterme. Für den quadratischen Term ergibt sich also als Koeffizient: $\frac{1}{2}[V, T]$. Nun läst sich V in eine Potenzreihe des Ortsoperators entwickeln und der Kommutator berechnen: In Übung 3.2 haben wir gezeigt:

$$[Q, F(P)] = \frac{\hbar}{i} F'[P]. \tag{24}$$

Für Austauschung der Symbole Q und P ergibt sich das gleiche Ergebnis. Haben wir also eine *glatte* Potentialverteilung, bleibt unser Koeffizient überall beschränkt.

Unser nächster Gegner ist die Umformung von Gl.(23): Wir müssen sie ja in den N-ten Exponenten erheben, ohne daß sich unser Fehlerterm aufbläht. Wir berechnen also

$$(e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N})^N - (e^{-\lambda(T+V)/N})^N = (*). \tag{25}$$

Dabei enthält der rechte Term das gefährliche O(...). $(*) =$

$$\begin{aligned} &1 \quad [e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N} - e^{-\lambda(T+V)/N}] \quad (e^{-\lambda(T+V)/N})^{N-1} \\ +&(e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N})^1 \quad [e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N} - e^{-\lambda(T+V)/N}] \quad (e^{-\lambda(T+V)/N})^{N-2} \\ +\cdots+&(e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N})^{N-1} \quad [e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N} - e^{-\lambda(T+V)/N}] \quad 1 \end{aligned} \tag{26}$$

Dabei wurde analog verfahren zu der aus der Analysis bekannten Formel:

$$a^n - b^n = (a-b)\sum_{k=1}^{n} a^{n-k}b^{k-1}, \tag{27}$$

wobei hier zu beachten ist, daß der Term wegen fehlender Vertauschbarkeit etwas komplizierter ist. Der Term (a-b) entspricht dabei dem Term in der eckigen Klammer, der für jeden Summanden gleich und n.V. von der Ordnung $O(1/N^2)$ ist. Die Terme außerhalb der eckigen Klammern sind beschränkt. Also geht die rechte Seite im Limes $N \to \infty$ gegen 0.

Wenn wir dieses Ergebnis in unseren ursprünglichen Ausdruck für G in Gleichung (22) einsetzen, $t_0 = 0$ setzen und das Argument in G dafür im folgenden weglassen, erhalten wir:

$$G(x,t;y) = \lim_{N\to\infty}\langle x|(e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N})^N|y\rangle. \tag{28}$$

Nun schieben wir N-1-mal ein Integral über alle Ortsprojektionen ein, also eine Eins der Form

$$1 = \int dx_j|x_j\rangle\langle x_j|, \qquad j = 1, ..., N-1, \tag{29}$$

wobei der Index j bedeutet, daß wir verschiedene Inetgrationen zu unterschiedlichen Zeiten ausführen. Das Integral ist natürlich N-1-fach. Es ergibt sich mit $y = x_0, x = x_n$:

$$G(x,t;y) = \lim_{N\to\infty}\int dx_1\cdots dx_{N-1}\prod_{j=0}^{N-1}\langle x_{j+1}|e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N}|x_j\rangle. \tag{30}$$

Unser Ziel ist, die Zustände $\langle x|$ und $|y\rangle$ durch den Operator zusammen zu schieben. Da wir uns im Ortsraum bewegen und der Ortsoperator V=f(Q) hier diagonal ist, können wir sofort schreiben:

$$\exp(-\frac{\lambda V}{N})|x_j\rangle = |x_j\rangle\exp(-\frac{\lambda V(x_j)}{N}). \tag{31}$$

$V(x_j)$ ist jetzt nur noch eine Zahl der Eigenwert von V bei x_j.
Links im Produktterm von (30) ist etwas mehr zu tun: Der Operator T ist garantiert nicht diagonalisierbar, weil P und Q nicht vertauschen. Wir fügen daher an geeignete Stellen N-1-mal Einsen aus Eigenvektoren des T-Operators

$$1 = \int dp_j |p_j\rangle\langle p_j|, \qquad j = 1, ..., N-1 \tag{32}$$

ein. Dabei gilt

$$\langle p|x_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(-\frac{ipx_j}{\hbar}), \tag{33}$$

wie aus elementaren Vorlesungen bekannt. Aus Gleichung (31) wissen wir, daß wir x_j vorziehen dürfen und erhalten mit unserem neuen Einschub:

$$\begin{aligned} \langle x_{j+1}|e^{-\lambda T/N}|x_j\rangle &= \int dp_j \langle x_{j+1}|e^{-\lambda T/N}|p_j\rangle\langle p_j|x_j\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp_j e^{-\lambda p_j^2/(2mN)} e^{ip_j(x_{j+1}-x_j)/\hbar}. \end{aligned} \tag{34}$$

Wir haben dabei einfach $\langle x_{j+1}|p_j\rangle$ kombiniert und als Zahl ins Integral geschrieben. Das können wir mit einem Fehler der Größenordnung $\epsilon := t/N$ tun. Beachte, daß x_{j+1} mit einem Pluszeichen vertreten ist! Das rührt natürlich davon, daß man das Bra im Integral Komplex konjugiert nehmen muß. Man kann die Schreibweise (34) auch als Fouriertransformation auffassen. Dort ist T diagonal. Der Vorfaktor kann bekanntlich je nach Faktorisierung der Fouriertransformation auch ohne Wurzel geschrieben oder ganz weggelassen werden.
Durch die Formel für das allgemeine Gaußintegral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2+by} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a} \tag{35}$$

können wir nun schreiben

$$\langle u|e^{-\lambda T/V}|v\rangle = \sqrt{\frac{mN}{2\pi\lambda\hbar^2}} e^{-mN(u-v)^2/(2\lambda\hbar^2)}. \tag{36}$$

Wir können nun also Gleichung (30) vereinfachen zu

$$G(x,t;y) = \lim_{N\to\infty} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} (\frac{mN}{2\pi\lambda\hbar^2})^{\frac{N}{2}} \prod_{j=0}^{N-1} \exp[-\frac{m(x_{j+1}-x_j)^2 N}{2\lambda\hbar^2} - \frac{\lambda V(x_j)}{N}]. \tag{37}$$

Wir schreiben diesen Ausdruck vermittels der Definition $\epsilon := t/N = \hbar\lambda/(iN)$ um und benutzen die Exponentialregel:

$$G(x,t;y) = \lim_{N\to\infty} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} (\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon})^{N/2} \exp[\frac{i\epsilon}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}[\frac{m}{2}(\frac{x_{j+1}-x_j}{\epsilon})^2 - V(x_j)]]. \tag{38}$$

Das ist unser gesuchtes Pfadintegral. In der Darstellung (38) sehen wir nun endlich den Zusammenhang mit unserer alten Formel (10): Die Summe in (38) fassen wir als Riemann-Summe auf und erhalten, daß sie im Limes gleich der Wirkung S ist:

$$\begin{aligned}\sum_{j=0}^{N-1} \epsilon[\frac{m}{2}(\frac{x_{j+1}-x_j}{\epsilon})^2 - V(x_j)] &\approx \int_0^t d\tau[\frac{1}{2}m(\frac{dx}{d\tau})^2 - V(x)] \\ &= \int_0^t d\tau L \\ &= S. \end{aligned} \tag{39}$$

So haben wir unseren alten Ausdruck dastehen und gleichzeitig einen Ausdruck unserer Normierungskonstanten A gefunden:

$$A = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}. \tag{40}$$

Dabei haben wir natürlich vorausgesetzt, daß die Bahn zwischen zwei infinitesimal benachbarten Punkten geradlinig verläuft.

5 Anwendungen

5.1 Das freie Teilchen

Um unser Pfadintegral auf seine Berechenbarkeit zu testen, nehmen wir uns den einfachsten aller Fälle vor: Die Bewegung eines Teilchens der Masse m ohne Potential. Der Hamiltonian ist dann zeitunabhängig und wir können schreiben:

$$G(x,t;y) = K(x,y) = \lim_{N\to\infty} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} (\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m})^{-N/2} \exp[\frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{j=1}^{N-1} (x_j - x_{j-1})^2]. \tag{41}$$

Wir erhalten

$$K[x,y] = \frac{\exp[\frac{im(x-y)^2}{2\hbar t}]}{\sqrt{\frac{2\pi i\hbar t}{m}}}. \tag{42}$$

Beweis:

Betrachte das Integral über x_1 Wir müssen in der Summe alle Terme, in denen x_1 auftaucht, beachten, den Rest können wir vor das Integral schreiben:

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty} (\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m})^{2/2} \exp[\frac{m}{2i\hbar\epsilon}[(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2]] dx_1 \\ &\qquad = (\frac{2\pi i\hbar 2\epsilon}{m})^{-1/2} \exp[\frac{m}{2i\hbar(2\epsilon)}(x_2 - x_0)^2]. \end{aligned} \tag{43}$$

Nun integrieren wir diesen Term über x_2, nachdem wir den weiteren Term, der x_2 enthält, nämlich

$$(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m})^{1/2}\exp[\frac{m}{2i\hbar\epsilon}(x_3-x_2)^2], \tag{44}$$

daran multipliziert haben. Die Integration liefert

$$(\frac{2\pi\hbar 3\epsilon}{m})^{-1/2}\exp[\frac{m}{2i\hbar 3\epsilon}(x_3-x_0)^2]. \tag{45}$$

Die Zahl 3 können wir bei n-facher Integration durch n ergänzen und erhalten vermittels $n\epsilon = t_n - t_0$ unsere Behauptung.

Zur Erinnerung: t ist die Zeit, zu der das Teilchen, das bei y zur Zeit 0 gestartet ist, bei x eintrifft. Die WKT, daß dieses Ereignis eintritt, ist gegeben durch $P(x) = |K(x,y)|^2$.

In diesem Fall ist $P(x)dx = \frac{m}{2\pi\hbar t}dx$. Das ist eine relative WKT, da das Integral über die gesamte Verteilung divergiert. Die Wahrscheinlichkeit ist umgekehrt proportional zur Zeit, und klassisch kann man sich das erklären, daß bei zunehmender Zeit der Ort immer unbestimmter wird (Stichwort: Zerfließen des Wellenpaketes).

Unser Kernel enthält einen komplexen Exponentialterm, der die Endentfernung im Quadrat entält. Real- und Imaginärteil von K oszillieren bei *festem* t in größerer Entfernung immer schneller. Bestimmen wir einmal die Wellenlänge. Für eine Periode muß gelten:

$$2\pi = \frac{m(x+\lambda)^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar t} \approx \frac{mx\lambda}{\hbar t}, \tag{46}$$

wenn wir den in λ quadratischen Term vernachlässigen. Also erhalten wir

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m(x/t)} = \frac{h}{p}, \tag{47}$$

wenn wir den klassischen Impuls einführen. Dies ist dadurch gerechtfertigt, daß wir Orts- und Zeitdifferenz in unserer K-Berechnung exakt vorgeben und danach einen exakten Impulswert erwarten.

Betrachten wir noch einmal unseren Kernel, halten wir diesmal den Endpunkt fest und gestalten die Zeit variabel. Der Realteil des Kernel besitzt wiederum eine Periode, solange wir $t > 0$ wählen, sonst ist der Ausdruck natürlich undefiniert. Wiederum wollen wir eine Schwingungsperiode zu Zeiten t feststellen, die groß gegenüber der "Schwingungsdauer" T sind. Es muß gelten:

$$2\pi = \frac{mx^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar(t+T)} = \frac{mx^2}{2\hbar t^2(\frac{T}{1+T/t})}. \tag{48}$$

Und mit $\omega = 2\pi/T$:

$$\omega \approx \frac{m}{2\hbar}(\frac{x}{t})^2. \tag{49}$$

Bei Einführung der klassischen kinetischen Energie gilt also:

$$E = \hbar\omega \tag{50}$$

So führen uns die Ergebnisse am Ende auf wohlbekannte Zusammenhänge und wir können uns auf dem Gebiet des Pfadintegrals etwas mehr zu Hause fühlen.