Quantenmechanische Pfadintegrale

Westfälische-Wilhelms-Universität Münster

Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie

26.10.2011

Jonathan Hendrich (j.hendrich@gmx.de)

Gliederung

1. Einleitung
2. Motivation
3. Herleitung
4. Das freie Teilchen
5. Vergleich mit klassischer Betrachtung

1.Einleitung

Pfadintegrale stellen eine neue Formulierung der Quantentheorie dar, die 1948 von Richard Feynman entwickelt wurde. Das besondere an den Pfadintegralen ist, dass sie gänzlich ohne abstrakte Größen wie Operatoren auskommen und somit eine anschauliche Betrachtungsweise der Quantenphysik ermöglichen. Des Weiteren liefern Pfadintegrale rechnerische Vorteile auf verschiedenen

Gebieten der Physik, z.B bei Tunneleffekten in der Quantenmechanik, zur Berechnung von Eichfeldern in der Quantenfeldtheorie und bei Vielteilchensystemen in der statistischen Physik.

2.Motivation

Zur Motivation für die Herleitung soll das bekannte Doppelspaltexperiment dienen. Klassisch betrachtet, würde ein Teilchen von einem Punkt x_a nach x_b den Weg mit der geringsten Wirkung S nehmen:

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L\big(q(t), \dot{q}(t)\big) dt \,.$$

Dabei ist $L\big(q(t), \dot{q}(t)\big)$ die klassische Lagrange-Funktion. Die Anfangs- und Endpunkte sind dabei fest gewählt. Für sie gilt:

$$\partial x(t_a) = \partial x(t_b) = 0$$

Nur Pfade mit stationärer Wirkung:

$$\partial S[x(t)] = S[x(t) + \partial x(t)] - S[x(t)] = 0$$

spielen eine Rolle.

Im Gegensatz dazu wird in der Quantenmechanik jedem möglichen Pfad eine Amplitude A_j zugeordnet, mit:

$$A_j \sim e^{\frac{i}{\hbar}S_j}.$$

Die Gesamtamplitude des Übergangs von x_a nach x_b entspricht der Summe über alle Einzelamplituden:

$$A_{Gesamt} = \sum_{j=1}^{N} A_j \; .$$

Beim ursprünglichen Doppelspaltexperiment befindet sich vor einer Lichtquelle eine Blende mit zwei Spalten. Dadurch gibt es für ein Teilchen zwei Möglichkeiten um von der Quelle zum Schirm zu gelangen. Fügt man einen weiteren Doppelspalt ein erhöht sich die Anzahl der Möglichkeiten auf vier. Werden nun immer mehr Blenden mit mehr Spalten eingesetzt, steigt die Zahl der Pfade enorm an, wobei jeder Pfad zum tatsächlich Genommenen einen Beitrag liefert.

3. Herleitung

Die folgende Herleitung wird im Eindimensionalen durchgeführt. Um die Wellenfunktion zu beliebigen Orts- und Zeitpunkten bestimmen zu können, wird die Greensche Funktion benötigt, die über

$$\Psi(x_b, t_b) = \int G(x_b, t_b; x_a, t_a)\, \Psi(x_a, t_a) dx_a$$

definiert ist. Um für diese Gleichung eine physikalisch sinnvolle Lösung zu erhalten, werden nur die retardierten Lösungen betrachtet.

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = 0 \text{ für } t_b < t_a$$

Diese Bedingung stellt die Kausalität der Lösung sicher.

Die eigentliche Herleitung beginnt im Heisenbergbild. Die Greensche Funktion entspricht nun dem Zeitentwicklungsoperator:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = < x_b \left| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \right| x_a > .$$

Hier ist $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ der Hammiltonoperator. Mit $\lambda = \frac{i}{\hbar} t$ folgt:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) =< x_b \left| e^{-\lambda(\hat{T}+\hat{V})} \right| x_a > .$$

Mit der Trotter-Produktformel:

$$e^{(\hat{A}+\hat{B})} = \lim_{n\to\infty} (e^{\frac{\hat{A}}{n}} e^{\frac{\hat{B}}{n}})^n$$

lautet der Propagator:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) =< x_b \left| \lim_{N\to\infty} \left(e^{\frac{-\lambda\hat{T}}{N+1}} e^{\frac{-\lambda\hat{V}}{N+1}} \right)^{N+1} \right| x_a > .$$

Der Operatorausdruck wirkt N+1-mal auf den Zustand $|x_a>$. Das entspricht einer Diskretisierung der Zeit und des Weges in N+2 Weg- und Zeitpunkte und somit in N+1 Weg- und Zeitabschnitte. Fügt man die Vollständigkeitsrelation

$$1 = \int \left| x_j >< x_j \right| dx_j$$

N mal ein, und verwendet anschließend die Umformung

$$< x_b \left| e^{(\dots)^{N+1}} \right| x_a > = \int \prod_{j=0}^{N} < x_{j+1} \left| e^{(\dots)} \right| x_j > dx_1 \dots dx_N \ ,$$

mit $x_0 = x_a$ und $x_{N+1} = x_b$,erhält man für den Propagator:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N\to\infty} \int \prod_{j=0}^{N} < x_{j+1} \left| e^{\frac{-\lambda \hat{T}}{N+1}} e^{\frac{-\lambda \hat{V}}{N+1}} \right| x_j > dx_1 \dots dx_N \ .$$

An dieser Stelle werden die Exponentialterme genauer betrachtet. Da das Potential $V(\hat{x})$ mit dem Ortsoperator vertauscht, gilt für den Potentialterm:

$$e^{\frac{-\lambda \hat{V}}{N+1}} |\hat{x} > = |\hat{x} > e^{\frac{-\lambda V(\hat{x})}{N+1}} \ .$$

Das gilt allerdings nicht für den Exponentialterm mit dem Operator für die kinetischen Energie, da diese vom Impulsoperator $\hat{p}$ abhängt. Um dieses Problem zu lösen wird die Vollständigkeitsrelation für den Impulsoperator eingesetzt:

$$1 = \int |\hat{p_j} > < \hat{p_j}| dp_j \ .$$

Mit der Relation

$$< \widehat{p_j}|\widehat{x_j} > = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\, e^{\frac{-ip_jx_j}{\hbar}}$$

folgt:

$$< x_{j+1} \left| e^{\frac{-\lambda\hat{T}}{N+1}} \right| x_j > = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{ip}{\hbar}(x_{j+1}-x_j)}\, e^{\frac{-\lambda p^2}{2m(N+1)}}\, dp.$$

Das Vorzeichen von x_{j+1} ist hier positiv, da es komplex konjungiert wird. Um auf diese Gleichung zu kommen, wurde für die kinetische Energie

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

eingesetzt. Beim dem obigen Integral handelt es sich um ein Gauß´sches Integral mit der Lösung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2+by}\, dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{b^2/(4a)}\ .$$

In diesem Fall ist $a = \frac{\lambda}{2m(N+1)}$ und $b = \frac{i}{\hbar}(x_{j+1} - x_j)$. Unter Verwednung des Hilfsintegrales erhält man:

$$< x_{j+1} \left| e^{\frac{-\lambda\hat{T}}{N+1}} \right| x_j > = \frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2\pi m(N+1)}{\lambda}}\, e^{\frac{-\left(x_{j+1}-x_j\right)^2 2m(N+1)}{2\lambda\hbar^2}}$$

$$= \sqrt{\frac{m(N+1)}{2\pi\lambda\hbar^2}}\, e^{\frac{-m\left(x_{j+1}-x_j\right)^2(N+1)}{2\lambda\hbar^2}} \quad .$$

Mit den gefundenen Relationen für die Exponentialausdrücke lässt sich der Propagator ausdrücken als:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N\to\infty} \int \prod_{j=0}^{N} < x_{j+1} \left| e^{\frac{-\lambda\hat{T}}{N+1}}\, e^{\frac{-\lambda\hat{V}}{N+1}} \right| x_j > dx_1 \ldots dx_N$$

$$= \lim_{N\to\infty} \int \left(\frac{m(N+1)}{2\pi\lambda\hbar^2}\right)^{\frac{N+1}{2}} \prod_{j=0}^{N} e^{\frac{-m(x_{j+1}-x_j)^2(N+1)}{2\lambda\hbar^2} - \frac{\lambda V}{N+1}}\, dx_1 \ldots dx_N \quad .$$

Die Substitution $\varepsilon = \frac{t}{N+1} = \frac{\hbar\lambda}{i(N+1)}$ entspricht der Zeitdiskretion. Damit lässt sich der oben stehende Ausdruck vereinfachen zu:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) =$$
$$\lim_{N\to\infty} \int \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_{j=0}^{N}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2 - V(x_j)\right)}\, dx_1 \ldots dx_N \quad .$$

Das ist der eigentliche Pfadintegralausdruck für den Propagator. Diesen gilt es nun zu vereinfachen. Der Ausdruck lässt sich als entstehenden Polygonenzug von x_0 nach x_{N+1} interpretieren. Zwischen den Punkten x_j und x_{j+1} befindet sich ein zeitlicher Abstand mit der Länge ε.

Lässt man nun den Abstand ε immer kleiner werden, entspricht das dem Limes N→∞ . Die Riemannsche Summe im Exponenten geht nun in ein Integral über:

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\sum_{j=0}^{N}\varepsilon[\frac{m}{2}(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon})^2 - V(x_j)] \rightarrow \int_{t_a}^{t_b} d\tau\,[\frac{m}{2}\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 - V(x)\,]$$

$$= \int_{t_a}^{t_b} d\tau\, L\big(x(t);\dot{x}(t)\big) = S[x(t)]\,.$$

Im Exponenten tritt also die klassische Wirkung auf. Mit dem Vorfaktor

$$\frac{1}{A} = (\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon})^{\frac{1}{2}}\ ,$$

ergibt sich schließlich der endgültige Pfadintegralausdruck:

$$G(x_b,t_b;x_a,t_a) = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{A}\int\frac{dx_1}{A}\dots\frac{dx_N}{A}\ e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}\ .$$

4. Das freie Teilchen

In diesem Abschnitt werden die im vorigen Kapitel hergeleiteten Gleichungen verwendet, um die Propagation eines freien Teilchens zu berechnen.

Die Lagrangefunktion eines freien Teilchens lautet:

$$L = \frac{m}{2}\,\dot{x}^2\ .$$

Damit gilt für Propagator:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\varepsilon\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}} e^{\frac{im}{2\varepsilon\hbar} \sum_{j=0}^{N}(x_{j+1}-x_j)^2}\, dx_1 \dots dx_N\ .$$

Zunächst wird dieses Integral bis zu einem Index von j=1 betrachtet. Für die Lösung verwendet man wieder ein Gauß-Integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{a(x_1-x_0)^2+b(x_2-x_1)^2}\, dx_1 = \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}}\ e^{\frac{ab}{a+b}(x_2-x_0)^2}\ .$$

Mit $a = b = \frac{im}{2\hbar\varepsilon}$ ergibt sich durch Einsetzen des Hilfsintegrals:

$$G(x_2, t_2; x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar 2\varepsilon}}\ e^{\frac{im}{2\hbar 2\varepsilon}(x_2-x_0)^2}\ .$$

Um die Lösung für den Index j=2 zu erhalten, muss vor der Integration mit dem Term:

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}}\ e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon}(x_3-x_2)^2}$$

Multipliziert werden. Das führt auf die Lösung des Integrales mit j=2:

$$G(x_3,t_3;x_0,t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar 3\varepsilon}}\ e^{\frac{im}{2\hbar 3\varepsilon}(x_3-x_0)^2}\ .$$

Durch N-fache Widerholung ergibt sich die Integrallösung für den ganzen Weg:

$$G(x_{N+1},t_{N+1};x_0,t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(N+1)\varepsilon}}\ e^{\frac{im}{2\hbar(N+1)\varepsilon}(x_{N+1}-x_0)^2}\ .$$

An dieser Stelle wird die frühere Substitution $(N+1)\varepsilon = t_b - t_a$ eingesetzt und liefert somit für den Propagator:

$$G(x_b,t_b;x_a,t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b-t_a)}}\ e^{\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}}\ .$$

Dieser Ausdruck entspricht der Greenschen Funktion, wie sie auch aus der Schrödingergleichung abgeleitet wird. Um nun die Wahrscheinlichkeitsdichte zu erhalten, bildet man das Betragsquadrat des Propagatorausdrucks:

$$P(t_b,t_a)\ dx = \frac{m}{2\pi\hbar(t_b-t_a)}\ dx\ .$$

Dieses Ergebniss hängt nur noch von dem Zeitintervall $(t_b - t_a)$ ab. Je größer das gegebene Zeitintervall ist, umso kleiner wird die Wahrscheinlichkeitsdichte für ein Wegintervall dx.

5. Vergleich mit klassischer Betrachtung

Wie im 2. Kaptiel gezeigt, sind die Übergangsamplituden proportional zu dem Term:

$$e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]} .$$

Wie bekannt, lässt sich ein imagnärer Exponentialterm auch ausdrücken als:

$$e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]} = \cos\left(\frac{S[x(t)]}{\hbar}\right) + isin(\frac{S[x(t)]}{\hbar}) .$$

Hierbei kann man $\frac{S[x(t)]}{\hbar}$ als Phasenwinkel auffassen. Im klassischen Fall gilt die Näherung $S[x(t)] \gg \hbar$. Eine kleine Änderung der Wirkung hat also eine große Änderung der Phase zur Folge. Die Pfade „interferieren" destruktiv miteinander und liefern keine Beiträge mehr zum genommenen Pfad. Klassisch nimmt ein Teilchen den Weg mit stationärer Wirkung, da in diesem Fall keine Phasenänderung auftritt.

In Quantentheoreitsche Betrachtung hingegen ist $S[x(t)] \approx \hbar$. Kleine Abweichungen der Wirkung ergeben auch nur kleine Phasenänderungen und die Pfade „interferieren“ miteinander konstruktiv. Jeder mögliche Pfad ergibt nun einen Beitrag zum genommenen Pfad. Sogar Wege, die klassisch verboten sind, fließen bei der Berechnung mittels Pfadintegralen ein.

Referenzen

1) Gernot Münster: Quantentheorie, 2. Auflage, de Gruyter Verlag

2) Ashok Das: Field Theory - A Path Integral Approach, World Scientific Verlag

3) Gerhard Soff: Quantenfeldtheorie, www.physik.uni-kassel.de/exp2/Skripte/Soff-Quantenfeldtheorie.pdf

4) G. Pfanner: Pfadintegrale!, http://theory.gsi.de/ vanhees/faq-pdf/Pfadintegrale.pdf