

2 Einführung in Pfadintegrale

Vorbemerkung:

Der zuvor skizzierte Operator-Zugang zur QM ist ein differentieller Zugang, bei dem die Eigenschaften eines Zustandes sich aus der Kenntnis desselben Zustands zu einer infinitesimal früheren Zeit ergeben. Die Lösung zu einer bestimmten Zeit ergibt sich durch Integration der zeitlich lokalen Information zu vorhergehenden Zeiten.

Im (fundamentalen) Unterschied dazu, gewinnt der Pfadintegralzugang Information über QM Amplituden durch einen globalen Zugang, bei dem die Eigenschaften des Systems zu allen Zeiten betrachtet werden. In der Tat geht dabei (in gewisser Weise) der Begriff des Zustands verloren (kann aber rekonstruiert werden).

2.1 Pfadintegraldarstellung des Zeitentwicklungsoperators

Wir betrachten der Einfachheit halber eine 1-dim kausale Zeitentwicklung mit Zeitentwicklungsoperator in Ortsbasis

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle_{(R)} = \langle x_b | \hat{U}_{(R)}(t_b, t_a) | x_a \rangle, \quad t_b > t_a \quad (2.1)$$

$\nwarrow$ im folgenden unterdrückt wegen $\nearrow$

Mit Hilfe der Verknüpfungseigenschaft von $\hat{U}$ lassen sich eine große Zahl von "Zeitscheiben" einfügen:

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle = \langle x_b | \hat{U}(t_b, t_N) \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \dots \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_a) | x_a \rangle. \quad (2.2)$$

Der Einfachheit halber sei angenommen, dass alle Zeitscheiben die gleiche "Dicke" ε haben mit

$$\varepsilon := t_n - t_{n-1} = \frac{t_b - t_a}{N+1} > 0. \quad (2.3)$$

Jedes $\hat{U}$ in (2.2) beschreibt die Zeitentwicklung durch eine Zeitscheibe hindurch. Durch Einfügen von

$$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_n |x_n\rangle \langle x_n|, \quad n=1, \dots, N, \quad (2.4)$$

zerlegt sich der Propagator in ein Produkt von Integralen:

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle = \left(\prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right) \prod_{n=1}^{N+1} \langle x_n t_n | x_{n-1} t_{n-1} \rangle \quad (2.5)$$

mit $x_b \equiv x_{N+1}$, $x_a \equiv x_0$, $t_b = t_{N+1}$, $t_a = t_0$.

Im folgenden betrachten wir Hamilton-Operatoren, deren $\hat{x}$ - und $\hat{p}$ -Abhängigkeiten sich in kinetische und potentielle Terme separieren lassen:

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{x}, t) = \hat{T}(\hat{p}, t) + \hat{V}(\hat{x}, t). \quad (2.6)$$

Desweiteren sei angenommen, daß die explizite Zeitabhängigkeit "langsam veränderlich" in jeder Zeitscheibe ist, so daß

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_n, t_{n-1}) &= \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \hat{H}(t)} \\ &\simeq e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{H}(t_n)} \quad , \quad \varepsilon = t_n - t_{n-1} \end{aligned} \quad (2.7)$$

(Im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ wird (2.7) exakt.)

Hamilton-Operatoren der Form (2.6) lassen sich mit Hilfe der Baker-Campbell-Hausdorff Formel faktorisieren:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon (\hat{T} + \hat{V})} = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{V}} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{T}} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon^2 \hat{X}} \quad (2.8)$$

$$\text{mit} \quad \hat{X} = \frac{1}{2} [\hat{V}, \hat{T}] - \frac{\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{1}{6} [\hat{V}, [\hat{V}, \hat{T}]] - \frac{1}{3} [[\hat{V}, \hat{T}], \hat{T}] \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

↑
vollständig bekannt

Im folgenden sei angenommen, daß die $\hat{X}$ -Terme im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ verschwinden. Dies stellt implizit Bedingungen an $\hat{T}$ und $\hat{V}$, die weiter unten besprochen werden.

Unter dieser Annahme gilt für den Zeitentwicklungsoperator in jeder Zeitscheibe

$$\underline{\langle x_n t_n | x_{n-1} t_{n-1} \rangle} \stackrel{(2.7)}{=} \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{H}(t_n)} | x_{n-1} \rangle$$

$$\begin{aligned} &\stackrel{(2.8)}{\simeq} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\hat{x}, t_n)} | x' \rangle \underbrace{\langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon T(\hat{p}, t_n)} | x_{n-1} \rangle}_{1 = \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} |p_n\rangle \langle p_n|} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \underbrace{\langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\hat{x}, t_n)} | x' \rangle}_{= e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(x_n, t_n)} \delta(x_n - x')} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_n (x' - x_{n-1})} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon T(p_n, t_n)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_n (x_n - x_{n-1}) - \frac{\varepsilon}{\hbar} (T(p_n, t_n) + V(x_n, t_n))} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Einsetzen in (2.5) ergibt die (vorläufige) Feynman'sche Pfadintegralformel

$$\underline{\langle x_{\text{bata}} | x_{\text{ata}} \rangle} \simeq \left(\prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right) \left(\prod_{n=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right) e^{\frac{i}{\hbar} S_N} \quad (2.10)$$

mit

$$\underline{S_N = \sum_{n=1}^{N+1} \left[p_n (x_n - x_{n-1}) - \varepsilon H(x_n, p_n, t_n) \right]} \quad (2.11)$$

Frage: (die hier leider nicht im Detail beantwortet werden kann...)

Wann konvergiert die rechte Seite von (2.10) im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ gegen die linke Seite?

Teilantworten:

- Für $T = \frac{p^2}{2m}$ und glatte Potentiale $V(x)$ enthält $\hat{X}$ Produkte aus Impulsoperatoren $\hat{p}$ und wohldefinierten Ableitungen von $V(\hat{x})$.

Term für Term verschwinden dann die $\hat{X}$ -Terme in einer Entwicklung $e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{X}} = 1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{X} + \dots$

im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ angewendet auf $|x\rangle$, mit Ausnahme der 1 $\Rightarrow$ (2.10) gilt mit " $\varepsilon \rightarrow 0$ "

- Für zeitunabh. $\hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p})$ mit nach unten beschränkten Potentialen gilt die Trotter -

Produkt-Formel

$$e^{-\frac{i}{\hbar} (t_b - t_a) \hat{H}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{V}} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{T}} \right)^{N+1} \quad (2.12)$$

(einvollst. Beweis erfordert aufwendige Funktionalanalysis, siehe E. Nelson, J. Math. Phys. 5, 322 (1964))

Woraus die Gültigkeit von (2.10) mit " $\varepsilon \rightarrow 0$ " folgt.

- Für nicht nach unten beschränkte Potentiale
(z.B. $V(\vec{r}) = c \frac{1}{|\vec{r}|}$ (Coulomb))

$$V(x) \sim \frac{l(l+1/2)\hbar^2}{|x|^2} \quad (\text{centrifugal barrier})$$

Wird die Entwicklung von $\hat{X}$ in (2.8) mehr und mehr singulär und konvergiert im Allgemeinen nicht $\Rightarrow$ (2.10) gilt nicht mit " $\varepsilon \rightarrow 0$ " und kann nicht (direkt) verwendet werden.

Im folgenden sei angenommen, daß $\hat{H}$ dergestalt ist, daß (2.10) gilt im $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0}$:

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} S[x,p]} \quad (2.13a)$$

$$\text{mit } \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x \int \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} := \left(\prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right) \left(\prod_{n=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right) \Big|_{N \rightarrow \infty} \quad (2.13b)$$

$$\text{und } S[x,p] = \int_{t_a}^{t_b} dt [p(t) \dot{x}(t) - H(p, x, t)]$$

Interpretation:

Pfadintegral $\hat{=}$ Summe über alle möglichen
Phasenraum Trajektorien eines Teilchens
gewichtet mit Phasenfaktor $e^{\frac{i}{\hbar} S}$

(vgl. Boltzmann-Faktor $e^{-\frac{E}{kT}}$ in statistischer Mechanik)

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \sum_{\substack{\text{alle Pfade} \\ (x_a, t_a) \rightarrow (x_b, t_b)}} e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

Spezialfall:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}, t) \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow S_N &= \sum_{n=1}^{N+1} \left[p_n (x_n - x_{n-1}) - \varepsilon \frac{p_n^2}{2m} - \varepsilon V(x_n, t_n) \right] \\ &= \sum_{n=1}^{N+1} \left[-\frac{\varepsilon}{2m} \left(p_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} m \right)^2 + \frac{m}{2} \varepsilon \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} \right)^2 - \varepsilon V(x_n, t_n) \right] \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ alle $N+1$ Impulsintegrale $\prod_{n=1}^{N+1} \int dp_n$ sind vom
Fresnel-Typ (vgl. (1.39)):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{\sqrt{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2m} \left(p_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} m \right)^2 \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar \varepsilon}} \quad (2.15)$$

$$\Rightarrow \langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle \approx \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar \varepsilon}} \left(\prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi i \hbar \varepsilon}} \right)} e^{\frac{i}{\hbar} S_N[x]} \quad (2.16)$$

mit

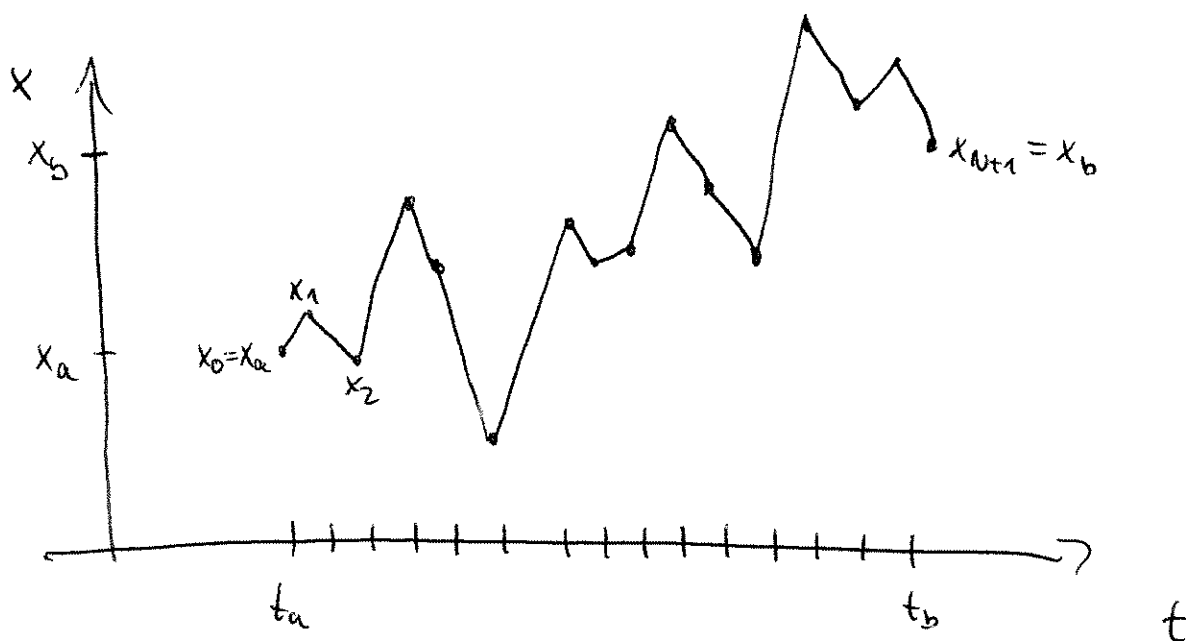
$$S_N[x] = \varepsilon \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_n, t_n) \right] \quad (2.17)$$

Im Kontinuumslimites schreiben wir

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x \, e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \quad (2.18a)$$

$$\text{mit } S[x] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) \right) . \quad (2.18b)$$

Dieses Pfadintegral summiert über alle Pfade im Konfigurationsraum (nicht im Phasenraum)



Beispiel: Freies Teilchen

$$\begin{aligned}
 \langle x_b t_b | x_a t_a \rangle &= \int_{x_a}^{x_b} \mathcal{D}x \, e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \, \frac{m}{2} \dot{x}^2} \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar \epsilon \frac{m}{2}}} \prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi i \hbar \epsilon \frac{m}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon \sum_{n=1}^{N+1} \frac{m}{2} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\epsilon^2}}
 \end{aligned} \quad (2.19)$$

Betrachte x_n Integral:

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar \epsilon \frac{m}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi i \hbar \epsilon \frac{m}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\epsilon} (x_{n+1} - x_n)^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\epsilon} (x_n - x_{n-1})^2} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar \epsilon \cdot 2} \frac{m}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_{n-1})^2}{2\epsilon}}
 \end{aligned} \quad (2.20)$$

N -fache Anwendung:

$$\begin{aligned}
 \langle x_b t_b | x_a t_a \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar \epsilon \frac{m}{2} (N+1)}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{(N+1)\epsilon}} \\
 &\stackrel{\epsilon(N+1) \equiv t_b - t_a}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar \frac{m}{2} (t_b - t_a)}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}}
 \end{aligned} \quad (2.21)$$

vgl. (1.39)

Interessant ist der Vergleich des freien Propagators mit der klassischen Wirkung; der freie klass. Pfad ist

$$x_0(t) = x_a + \frac{t-t_a}{t_b-t_a} (x_b - x_a) \quad , t \in [t_b, t_a]$$

$$\Rightarrow S[x_0(t)] = \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{(x_b - x_a)^2}{(t_b - t_a)^2} = \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}$$

$\hat{=}$ h. Phase im Quantenpropagator

$\Rightarrow$ klass. Pfad ergibt den exakten Propagator für das freie Teilchen

(mit Ausnahme des Vorfaktors in (2.21), der in der Tat das Ergebnis von Fluktuationen um den klass. Pfad ist.)