

Die Behandlung eines Teilchens im EM Feld mit Hilfe des Pfadintegrals offenbart einige Subtilitäten des Formalismus, was insbesondere durch die zugrundeliegende Eichsymmetrie bedingt ist.

Beginnen wir mit einer Ableitung des Pfadintegrals

"quick & dirty":

Wie üblich suchen wir den Propagator eines QM Teilchens:

$$G(\vec{x}, T; \vec{y}) = \int_{\vec{y}, 0}^{\vec{x}, T} \mathcal{D}x \, e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \quad (2.150)$$

Bislang haben wir Wirkungen der Form

$$S = \int_0^T dt \, L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) \quad , \quad L = \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 - V(x) \quad (2.151)$$

studiert. Hierbei kann $V(\vec{x}) \in \Phi(\vec{x})$ z.B. ein elektrostatisches Potential sein.

Ein zusätzliches magnetisches Feld $\vec{B}$ kann im Lagrange-Formalismus durch ein Vektor-

Potential $\vec{A}$ beschrieben werden mit

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (2.152)$$

Die zugehörige klassische Lagrange-Funktion ist

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + \frac{e}{c} \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{A} - V(\vec{x}). \quad (2.153)$$

Das bedeutet, daß die Wirkung einen Beitrag der Form

$$\frac{e}{c} \int_0^T dt \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{A} \quad (2.154)$$

enthält. Einsetzen von (2.153) und (2.151) in (2.150) liefert also die gewünschte Pfadintegral-darstellung! (?)

Puzzle (1):

Für diff'bare Pfade ist (2.154) $\hat{=}$ $\frac{e}{c} \int d\vec{x} \cdot \vec{A}$.

Was aber gilt für die Pfade im Pfadintegral?

Puzzle (2):

Wenn wir versuchen, die diskrete "Zeitscheiben"-Darstellung von (1.154) anzugeben; wie diskretisiert sich dann $\int dt \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}$?

$$? \sum_j (\vec{x}_j - \vec{x}_{j-1}) \cdot \vec{A}(\vec{x}_j), \quad \sum_j (\vec{x}_j - \vec{x}_{j-1}) \cdot \vec{A}(\vec{x}_{j-1}), \quad \sum_j (\vec{x}_j - \vec{x}_{j-1}) \cdot \vec{A}\left(\frac{\vec{x}_j + \vec{x}_{j-1}}{2}\right)?$$

In der Tat ist letztere Form, die sogenannte "midpoint rule", richtig (alternativ kann auch $\frac{1}{2}[\vec{A}(x_j) + \vec{A}(x_{j-1})]$ verwendet werden). Wir zeigen dies, indem wir aus dem Pfadintegral mit midpoint-rule die entsprechende Schrödinger-Gleichung ableiten. Dazu beginnen wir mit der Identität

$$\psi(x, T) = \int d^3\vec{y} \ G(\vec{x}, T; \vec{y}) \ \psi(\vec{y}, 0) \quad (2.155)$$

für die Propagation der Wellenfunktion. Da die Schrödinger-Gleichung eine Dgl. in der Zeit und im Ort ist, genügt es, infinitesimale Änderungen zu

betrachten: $(\vec{y}, T) \rightarrow (\underbrace{\vec{y} + \Delta\vec{x}}_{\equiv \vec{x}}, T + \Delta T) \equiv (\underbrace{\vec{y} + \vec{0}}_{\equiv \vec{x}}, T + \epsilon)$
aus "historischen" Gründen

$$\Rightarrow \psi(\vec{x}, T + \epsilon) = \int d^3\vec{y} \ \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{3/2} e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\vec{x} - \vec{y}}{\epsilon} \right)^2 - V(\vec{y}) \right] + \frac{i\epsilon}{\hbar} (\vec{x} - \vec{y}) \cdot \vec{A}\left(\frac{1}{2}(\vec{x} + \vec{y})\right)} \cdot \psi(\vec{y}, T) \quad (2.156)$$

wobei wir hier den infinitesimalen Propagator für einen Zeitschritt eingesetzt haben und die midpoint rule verwendet haben.

Nun benutzen wir auf der RHS $\vec{y} = \vec{x} - \vec{\xi}$ und entwickeln in $\vec{\xi}$. Dabei zählen wir in Ordnungen von ϵ und beachten die Eigenschaft des Feynman-Pfades (vgl.

Brown'sche Bewegung), daß $\frac{d\vec{x}^2}{dt} \sim \text{const} \Rightarrow |\vec{\xi}| \sim \sqrt{\epsilon}$:

$$\bullet \quad e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \frac{(\vec{x} - \vec{y})^2}{\epsilon^2} - V(\vec{x} - \vec{\xi}) \right]} = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{\vec{\xi}^2}{\epsilon}} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(\vec{x}) + \mathcal{O}(\epsilon^{3/2}) \right)$$

$$\bullet \quad (\vec{x} - \vec{y}) \cdot \vec{A}\left(\frac{1}{2}(\vec{x} + \vec{y})\right) = \vec{\xi} \cdot \vec{A}\left(\vec{x} - \frac{\vec{\xi}}{2}\right) \\ = \vec{\xi} \cdot \vec{A}(\vec{x}) - \frac{1}{2} \vec{\xi} \cdot (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) \vec{A}(\vec{x}) + \mathcal{O}(\epsilon^{3/2})$$

$$\Rightarrow e^{\frac{i\epsilon}{\hbar c} (\vec{x} - \vec{y}) \cdot \vec{A}\left(\frac{1}{2}(\vec{x} + \vec{y})\right)} = 1 + \frac{i\epsilon}{\hbar c} \vec{\xi} \cdot \vec{A}(\vec{x}) - \frac{i\epsilon}{2\hbar c} \vec{\xi} \cdot (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) \vec{A}(\vec{x}) - \frac{1}{2} \frac{\epsilon^2}{\hbar^2 c^2} (\vec{\xi} \cdot \vec{A}(\vec{x}))^2 + \mathcal{O}(\epsilon^{3/2})$$

$$\bullet \quad \psi(\vec{y}, T) = \psi(\vec{x}, T) - \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, T) + \frac{1}{2} \xi_m \xi_n \frac{\partial^2 \psi(\vec{x}, T)}{\partial x_m \partial x_n} + \mathcal{O}(\epsilon^{3/2}) \quad (2.157)$$

$$\Rightarrow \psi(\vec{x}, T + \epsilon) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{3/2} \int d^3 \xi \, e^{\frac{i m \vec{\xi}^2}{2 \epsilon \hbar}} \\ \cdot \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(\vec{x}) + \frac{i\epsilon}{\hbar c} \vec{\xi} \cdot \vec{A} - \frac{i\epsilon}{2\hbar c} \xi_m \xi_n \partial_m A_n - \frac{1}{2} \frac{\epsilon^2}{\hbar^2 c^2} \xi_m \xi_n A_m A_n \right) \\ \cdot \left(\psi - \xi_m \partial_m \psi + \frac{1}{2} \xi_i \xi_k \partial_i \partial_k \psi \right) + \mathcal{O}(\epsilon^{3/2}) \quad (2.158)$$

Finally, we need

$$\int d^3 \xi \, e^{\frac{i m \vec{\xi}^2}{2 \epsilon \hbar}} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{-3/2}, \quad \int d^3 \xi \, \vec{\xi} \, e^{\frac{i m \vec{\xi}^2}{2 \epsilon \hbar}} \underset{\text{symmetric}}{=} 0$$

und
$$\int d^3\xi \sum_m \xi_l e^{\frac{i m \xi^2}{2\hbar E}} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar E}\right)^{-3/2} \frac{i \hbar E}{m} \delta_{ml}$$

$$\Rightarrow \psi(\vec{x}, T+\epsilon) = \psi - \frac{i\epsilon}{\hbar} V\psi + \frac{e\epsilon}{2mc} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A})\psi - \frac{i\epsilon e^2}{2\hbar mc^2} \vec{A}^2 \psi + \frac{i\epsilon \hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi + \frac{e\epsilon}{mc} (\vec{A} \cdot \vec{\nabla})\psi \quad (2.159)$$

Mit $\psi(\vec{x}, T+\epsilon) - \psi(\vec{x}, T) = \epsilon \frac{\partial \psi(\vec{x}, T)}{\partial t} + \mathcal{O}(\epsilon^{3/2})$ und

$-i\hbar \vec{\nabla} = \vec{p}$ folgt:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi + V(\vec{x}) \psi \quad (2.160)$$

Dies ist die Schrödingers-Gleichung für ein Teilchen im EM-Feld. Dieses Resultat rechtfertigt und bestätigt die Verwendung der midpoint rule für die Diskretisierung im Gegenwart eines Vektor-Potentials.

(NB: obiges Argument entspricht der Feynman'schen Ableitung der Schrödingers-Gleichung aus dem Pfadintegral verallgemeinert auf Vektorpotentiale)

Es ist wichtig zu erkennen, daß die midpoint-rule nicht lediglich eine Rechenregel ist, sondern eng verknüpft ist mit der Eichsymmetrie, d.h. mit einer Invarianz unter lokalen Transform von Vektorpotential und Wellenfunktion:

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \psi \quad , \quad \psi(\vec{x}, t) : \text{Eichfunktion}$$

$$\psi(\vec{x}, t) \rightarrow e^{\frac{ie}{\hbar c} \psi(\vec{x}, t)} \psi(\vec{x}, t) \quad (2.161)$$

Unter diesen Transform sind Schrödinger-Gleichung und Maxwell-Gleichung invariant. Wegen $\psi = \int G \psi$ folgt das Transformverhalten des Propagators,

$$G(\vec{x}, t; \vec{y}) \rightarrow e^{\frac{ie}{\hbar c} \psi(\vec{x}, t)} G(\vec{x}, t; \vec{y}) e^{-\frac{ie}{\hbar c} \psi(\vec{y}, 0)} \quad (2.162)$$

(homogene Transform)

In der Pfadintegraldarstellung erscheint die Transform (2.162) von G evident, weil

$$e^{\frac{ie}{\hbar c} \int_0^T dt \dot{x} \cdot \vec{A}} \rightarrow e^{\frac{ie}{\hbar c} \int_0^T dt \dot{x} \cdot \vec{A} + \frac{ie}{\hbar c} \int_0^T dt \dot{x} \cdot \vec{\nabla} \psi}$$

$$\text{im Kontinuum: } \int_0^T dt \dot{x} \cdot \vec{\nabla} \psi = \int_{\vec{y}}^{\vec{x}} d\vec{x} \cdot \vec{\nabla} \psi = \psi(\vec{x}, T) - \psi(\vec{y}, 0) \quad (2.163)$$

liefert genau die Exponentiale in (2.162)!

Es ist nun essentiell, daß eine Diskretisierung die Symmetrieeigenschaften des Systems beibehält. Insbesondere erfordert dies, daß (2.163) auch in diskreter Form gilt. Um dies zu erreichen beginnen wir mit der Identität

$$\varphi(\vec{x}) - \varphi(\vec{y}) = \sum_{j=0}^{N-1} (\varphi(\vec{x}_{j+1}) - \varphi(\vec{x}_j)) \quad , \quad \vec{x}_0 = \vec{y}, \quad \vec{x}_N = \vec{x} \quad (2.163)$$

Wir definieren die Schar der interpolierenden Punkte zwischen zwei x_j zu benachbarten Zeitschnitten:

$$\begin{aligned} x_j^\theta &= x_j + (x_{j+1} - x_j) \theta \quad , \quad \theta \in [0, 1] \\ &\equiv x_{j+1} + (x_{j+1} - x_j)(\theta - 1) \quad . \quad (\theta = \frac{1}{2} : \text{midpoint}) \end{aligned} \quad (2.164)$$

Nun entwickeln wir $\varphi(x_j)$ und $\varphi(x_{j+1})$ in (2.163) um x_j^θ :

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{x}) - \varphi(\vec{y}) &= \sum_{j=0}^{N-1} \left[\vec{\nabla} \varphi|_{(x_j^\theta)} \cdot (\vec{x}_{j+1} - \vec{x}_j) + \frac{1}{2} (\vec{x}_{j+1} - \vec{x}_j) \cdot (\vec{\nabla} \vec{\nabla} \varphi) \cdot (\vec{x}_{j+1} - \vec{x}_j) \right. \\ &\quad \left. \cdot (1 - 2\theta) + \dots \right] \end{aligned} \quad (2.165)$$

Betrachten wir vereinfachend den 1-dim Fall.

Für $\theta \in [0, 1]$ gilt im Kontinuumslimites

$$\varphi(x) - \varphi(y) = \int_y^x dx \frac{\partial}{\partial x} \varphi + \frac{1}{2} (1 - 2\theta) \int_0^T dt \varphi'' \left(\frac{\Delta x}{\Delta t} \right)_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \quad (2.166)$$

Für diff'bare $x(t)$ gilt $\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} \rightarrow 0$ und es gilt (2.163) und Eichinvarianz für beliebige θ .

Für Feynman-Pfade (und Brown'sche Bewegung) gilt aber $\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} \rightarrow \text{const.} > 0$, so daß im Allgemeinen der zweite Term der RHS in (2.166) nicht verschwindet (Itô-Integral).

Eichinvarianz verlangt aber das Verschwinden dieses Terms. Dies erzwingt $\Theta = \frac{1}{2}$, also die "midpoint-rule".

Anders ausgedrückt: für diskretisierte Bewegung eines QM Teilchens im EM-Feld gilt:

das geladene (Materie-)teilchen lebt auf den "sites" x_j ,
das Eichfeld lebt auf den "links", $A(\frac{1}{2}(x_{j+1} + x_j))$.



(vgl. Gittereichtheorie)