

Das Pfadintegral in der Quantenmechanik

Schriftliche Ausarbeitung des Vortrags vom 8. Juli 2011
im Seminar zur Theorie der Teilchen und Felder

Patrick Steppeler¹

15. Juni 2011

¹p.steppeler@online.de

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
1.1	Historische Einordnung	2
1.2	Motivation	2
2	Herleitung des Pfadintegrals	3
2.1	Das freie Teilchen	3
2.2	Teilchen in einem Potential	4
2.3	Übergang zu endlichen Zeiten	4
3	Diskussion	5
3.1	Eigenschaften des Pfadintegrals	5
3.2	Klassischer Grenzfall	6
3.3	Anwendungen	6
	Literatur	8

1 Einleitung

1.1 Historische Einordnung

Das Pfadintegral wurde aufbauend auf Arbeiten von Paul Dirac (vgl. [1]) im Jahre 1948 von Richard Phillips Feynman eingeführt. Neben einem neuen Werkzeug für konkrete Berechnungen erhält man mit dem Pfadintegral eine alternative Sichtweise auf die Prozesse in der Quantenmechanik insgesamt.

Interessanterweise fand die Methode anfänglich jedoch wenig Beachtung. Feynmans Originalpaper (vgl. [2]) wurde sogar von der Redaktion der *Physical Review* abgelehnt (vgl. [3]). Doch auch nach der Veröffentlichung des Artikels in *Reviews of Modern Physics* sollte es noch einige Jahre dauern, bevor das Pfadintegral ernst genommen wurde.

Der Grund für diese Entwicklung liegt zu einem Teil darin, dass der bis dato gebräuchliche Formalismus der Quantenmechanik – also das Schrödinger- respektive Heisenbergbild – für damalige Fragestellungen völlig ausreichend war. Tatsächlich lassen sich viele aus den Grundvorlesungen zur Quantenmechanik bekannte Probleme wie etwa der harmonische Oszillator oder das Wasserstoffatom vollständig im Pfadintegralformalismus behandeln. Gerade beim Wasserstoffatom erweist sich die Lösung jedoch als deutlich umständlicher als das herkömmliche Verfahren. Kurzgefasst sah man keine Notwendigkeit für den Formalismus des Pfadintegrals. Diese Notwendigkeit und damit die Etablierung des Pfadintegrals als unverzichtbare Methode innerhalb der Quantentheorie ergab sich erst mit dem Aufkommen der modernen Feldtheorien.

1.2 Motivation

Die folgende Motivation des Formalismus sowie die sich anschließende Herleitung des Pfadintegrals orientieren sich an [4]. Wir betrachten zunächst den allseits bekannten Doppelspaltversuch, wie er in Abbildung 1 zu sehen ist.

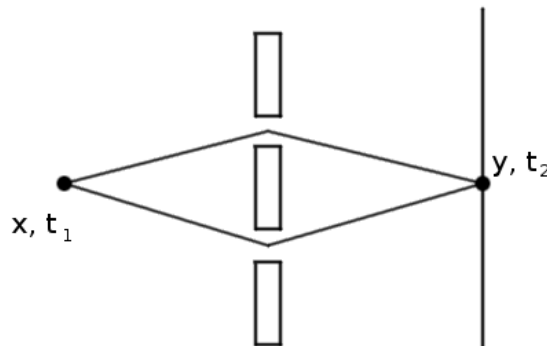


Abbildung 1: Der Doppelspaltversuch

Ein Teilchen befinde sich zur Zeit t_1 am Ort x . Wir suchen die Wahrscheinlichkeit dafür, dass es sich zur Zeit t_2 am Ort y befindet. Gesucht ist also die *Übergangsamplitude*

$$\langle y, t_2 | x, t_1 \rangle. \quad (1)$$

Entsprechend der obigen Abbildung könnte man vereinfacht sagen, dass sich das Teilchen für diesen Übergang entlang einem der eingezeichneten Pfade bewegen muss. Die zentrale Idee des Pfadintegralformalismus lautet nun:

Lässt sich die gesuchte Übergangsamplitude nicht durch eine Integration über alle möglichen Pfade gewinnen?

Formal bedeutet dies, dass wir einen Ausdruck der Form

$$\langle y, t_2 | x, t_1 \rangle = \int A[x(t)] \mathcal{D}[x(t)] \quad (2)$$

suchen. Hierin bezeichnet $x(t)$ alle möglichen Pfade, entlang derer sich das Teilchen beim jeweiligen Übergang bewegen bzw. genauer alle möglichen Orte x an denen sich das Teilchen zum Zeitpunkt t befinden kann. $A[x(t)]$ ist ein noch zu bestimmendes Funktional und $\mathcal{D}[x(t)]$ das zugehörige, ebenfalls noch zu bestimmende Integrationsmaß.

Natürlich soll das Pfadintegral nicht nur den Übergang beim Doppelspalt beschreiben. Diese motivierende Visualisierung kann jedoch auf den allgemeinen Fall unendlich vieler, beliebig gearter Pfade übertragen werden. Das Vorgehen ist in Abbildung 2 dargestellt. Hier sieht man drei Blenden mit jeweils sechs Spalten, wodurch eine Vielzahl möglicher Pfade entsteht. Den allgemeinen Fall kann man sich als Limes vorstellen, in dem sowohl die Zahl der Blenden als auch die Zahl der Spalte gen unendlich strebt.

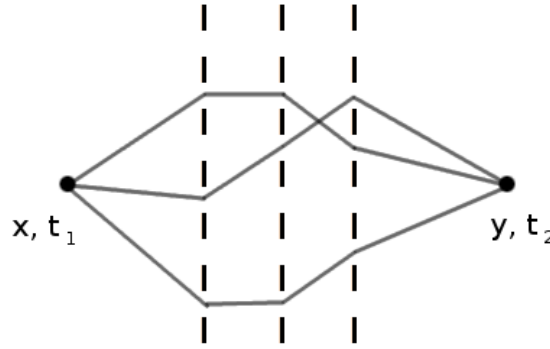


Abbildung 2: Übergang zu mehreren Spalten und mehreren Blenden

2 Herleitung des Pfadintegrals

2.1 Das freie Teilchen

Wir berechnen zunächst die Übergangsamplitude des freien Teilchens. Der zugehörige Hamiltonoperator sei $H = H_0 = \frac{p^2}{2m}$. Wir setzen fortan o. B. d. A. $t_1 = 0$ und $t_2 = t$. Weiterhin bezeichne

$$U(t) = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) \quad (3)$$

den *Zeitentwicklungsoperator*. Dann lässt sich die gesuchte Übergangsamplitude (2) schreiben als

$$\langle y, t | x, 0 \rangle = \langle y | \exp\left(-\frac{ip^2 t}{2m\hbar}\right) | x \rangle. \quad (4)$$

Wir betrachten diesen Ausdruck in der Impulsdarstellung. Für diese gilt

$$\langle p | x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \quad \text{sowie} \quad \mathbb{1} = \int dp |p\rangle \langle p|. \quad (5)$$

Somit erhalten wir

$$\langle y, t | x, 0 \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp\left(\frac{ip(y-x)}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{ip^2 t}{2m\hbar}\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \exp\left(\frac{im(y-x)^2}{2\hbar t}\right). \quad (6)$$

Im letzten Schritt wurde das Integral mittels quadratischer Ergänzung und geeigneter Substitution auf ein Gauß-Integral zurückgeführt. Allgemein gilt in solchen Fällen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-\frac{a}{2}x^2 + bx\right) = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{2a}\right). \quad (7)$$

2.2 Teilchen in einem Potential

Wir gehen nun zu größerer Allgemeinheit über und betrachten ein Teilchen in einem Potential V . Der zugehörige Hamiltonoperator sei $H = H_0 + V$. Das Potential V sei dabei stationär, d. h. nicht explizit zeitabhängig. Leider kann die gesuchte Übergangsamplitude für ein solches Potential im Allgemeinen nicht analytisch bestimmt werden. Daher betrachten wir zunächst lediglich die Bewegung über infinitesimale Zeiten $t = \epsilon$. Dann gilt

$$U(\epsilon) = \exp\left(-\frac{i(H_0 + V)\epsilon}{\hbar}\right) \approx \exp\left(-\frac{iV\epsilon}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{iH_0\epsilon}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{iV\epsilon}{\hbar}\right) := W(\epsilon). \quad (8)$$

Obige Näherung entspricht einer Tayorentwicklung bis zur ersten Ordnung. Für kommutierende Größen würde die Relation exakt gelten. Da es sich jedoch um eine Exponentialfunktion von Operatoren handelt, ist beim Umformen solcher Terme Vorsicht geboten. Mithilfe dieser Näherung können wir nun die gesuchte Übergangsamplitude bestimmen.

$$\begin{aligned} \langle y|W(\epsilon)|x\rangle &= \exp\left(-\frac{iV(y)\epsilon}{\hbar}\right) \langle y|\exp\left(-\frac{iH_0\epsilon}{\hbar}\right)|x\rangle \exp\left(-\frac{iV(x)\epsilon}{\hbar}\right) \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}} \exp\left(\frac{im(y-x)^2}{2\hbar\epsilon} - \frac{i\epsilon(V(y) + V(x))}{2\hbar}\right). \end{aligned} \quad (9)$$

Im letzten Schritt wurde hier das Resultat für das freie Teilchen (6) verwendet.

2.3 Übergang zu endlichen Zeiten

Wir werden nun mittels der Salami-taktik zu einer Aussage über die Übergangsamplitude für endliche Zeiten gelangen. Dazu sei $t = N\epsilon$ eine endliche Zeit und ϵ weiterhin infinitesimal. Dann gilt zunächst

$$\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) = \exp^N\left(-\frac{iH\epsilon}{\hbar}\right) \approx W^N(\epsilon). \quad (10)$$

Wir bilden nun den Limes $\epsilon \rightarrow 0$ bzw. $N \rightarrow \infty$. In diesem Limes greift die Näherung aus (8) natürlich besser. Tatsächlich gilt die Gleichung hier sogar exakt, man erhält gerade die Lie-Kato-Trotter Produktformel. Wir ändern noch die Notation zu $x_N := y$ und $x_0 = x$ und gelangen zu

$$\begin{aligned} \langle y|\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)|x\rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x_N|W^N(\epsilon)|x_0\rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \langle x_N|W^{N-1}(\epsilon)|x_1\rangle \langle x_1|W(\epsilon)|x_0\rangle. \end{aligned} \quad (11)$$

Im letzten Schritt wurde eine vollständige Eins eingefügt. Dieser Trick wird nun insgesamt $(N-1)$ -mal angewandt, sodass man

$$\langle y|\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)|x\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_{N-1} \dots \int dx_1 \prod_{j=1}^N \langle x_j|W(\epsilon)|x_{j-1}\rangle \quad (12)$$

erhält. Die hier auftretenden Skalarprodukte können wir mithilfe von (9) berechnen. Insgesamt finden wir

$$\langle y | \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) | x \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{N/2} \int dx_{N-1} \dots \int dx_1 \exp\left(\frac{iS_\epsilon}{\hbar}\right) \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \frac{iS_\epsilon}{\hbar} &= \frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{j=1}^N (x_j - x_{j-1})^2 - \frac{i\epsilon}{2\hbar} \sum_{j=1}^N (V(x_j) + V(x_{j-1})) \\ \Leftrightarrow S_\epsilon &= \frac{m\epsilon}{2} \sum_{j=1}^N \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\epsilon}\right)^2 - \epsilon \sum_{j=1}^N \frac{V(x_j) + V(x_{j-1})}{2}. \end{aligned} \quad (14)$$

Im betrachteten Limes werden die Summen zu Integralen über die Zeit. Die Division der Differenz $x_j - x_{j-1}$ durch ϵ entspricht dann gerade einer zeitlichen Ableitung. Wir ändern dazu die Parametrisierung zu $x_j = x(t_j)$ und erhalten

$$S[x(t)] = \int_0^t dt' \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2(t') - V(x(t')) \right). \quad (15)$$

Dies ist gerade das klassische Wirkungsfunktional, wie es aus der analytischen Mechanik bekannt ist. Dort gilt

$$S = \int_0^t dt' L(x(t'), \dot{x}(t'), t') \quad (16)$$

mit der Lagrangefunktion $L = T - V$, was mit dem vorherigen Ausdruck (15) übereinstimmt. Wir definieren nun

$$\mathcal{D}[x(t)] := \mathcal{D}x := \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{N/2} dx(t_1) \dots \int dx(t_{N-1}), \quad (17)$$

wodurch wir den gewünschten Ausdruck (2) gefunden haben.

$$\langle y, t | x, 0 \rangle = \int \exp\left(\frac{iS[x(t)]}{\hbar}\right) \mathcal{D}x. \quad (18)$$

Es stellt sich jedoch die Frage, was diese recht undurchsichtige Größe nun eigentlich aussagt bzw. beinhaltet.

3 Diskussion

3.1 Eigenschaften des Pfadintegrals

Zunächst wollen wir die wesentlichen Eigenschaften des Pfadintegrals zusammen tragen.

- Der Ausdruck (18) enthält nur noch kommutierende Größen. Es treten keine Elemente des Hilbertraums – d. h. Vektoren oder Operatoren – auf.
- Das Integral ist unendlichdimensional. Diese Eigenschaft hat zur Konsequenz, dass die Konvergenz und die Wohldefiniertheit des Pfadintegrals noch nicht in voller Allgemeinheit mathematisch untersucht bzw. bewiesen ist.
- Die Integration erfolgt über alle möglichen Orte $x(t_i)$ zum Zeitpunkt t_i . Demnach gilt:

Es tragen alle möglichen Pfade zum Pfadintegral bei.

Diese Tatsache ist überraschend, da man aus der klassischen Mechanik gerade das Gegenteil gewohnt ist. Gemäß dem Hamiltonschen Prinzip wird dort genau ein Pfad realisiert und zwar derjenige, für welchen die Wirkung minimal ist. Im nächsten Unterkapitel werden wir uns näher mit diesem Dilemma beschäftigen und untersuchen, wie sich die beiden scheinbaren Gegensätze aufheben lassen.

3.2 Klassischer Grenzfall

Um besser zu verstehen, wie sich die Tatsache, dass beim Pfadintegral alle Pfade zum Ergebnis beitragen mit dem klassischen Verhalten vereinbaren lässt, betrachten wir zwei eng benachbarte Pfade $x(t)$ und $x'(t)$. Wir fordern, dass sich der benachbarte Pfad $x'(t)$ als

$$x'(t) = x(t) + \eta(t) \quad (19)$$

schreiben lässt, wobei $\eta(t)$ die geringfügige Abweichung vom ursprünglichen Pfad bezeichnen soll und am Anfangs- und Endpunkt des Pfades verschwinden möge. Wir berechnen nun näherungsweise die Wirkung $S[x't]$.

$$S[x'(t)] = S[x(t) + \eta(t)] \approx S[x(t)] + \int dt' \eta(t') \frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t')}. \quad (20)$$

Diese Näherung entspricht einer Taylorentwicklung bis zur ersten Ordnung. Anstelle einer gewöhnlichen Ableitung tritt hier die Funktionalableitung $\frac{\delta}{\delta x(t')}$. Mithilfe dieser Entwicklung betrachten wir nun die Beiträge der zwei benachbarten Pfade $x(t)$ und $x'(t)$ zu (18), wobei wir das Integral durch eine einfache Summe nähern.

$$\exp\left(\frac{iS[x(t)]}{\hbar}\right) + \exp\left(\frac{iS[x'(t)]}{\hbar}\right) \approx \exp\left(\frac{iS[x(t)]}{\hbar}\right) \left(1 + \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dt' \eta(t') \frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t')}\right)\right). \quad (21)$$

Eine erste Überlegung zur Addition der beiden Beiträge könnte nun wie folgt lauten: Die beiden Pfade sind sehr eng benachbart, d. h. $\eta(t)$ ist klein. Da diese Größe im Exponenten steht, ist der zweite Summand ungefähr gleich Eins. Die beiden Beiträge addieren sich schlicht.

Diese Argumentation ist jedoch nicht ganz richtig. Der Übergang zu makroskopischen Verhalten, d. h. der klassische Limes kann als Übergang $\hbar \rightarrow 0$ betrachtet werden, da das reduzierte plancksche Wirkungsquantum im Vergleich zu typischen makroskopischen Größen stets um viele Größenordnungen kleiner ist. Das hat zur Folge, dass der zweite Summand im obigen Ausdruck auch für sehr kleine Abweichungen $\eta(t)$ einen nicht zu vernachlässigenden Beitrag und damit einen Phasenunterschied generiert.

Wenn man nun nicht nur zwei dicht benachbarte Pfade betrachtet, sondern eine Vielzahl solcher Pfade entsteht im Mittel destruktive Interferenz. Die Beiträge dieser Pfade heben sich gegenseitig auf.

Für einen ausgezeichneten Fall trifft dies jedoch nicht zu. Das ist der Pfad mit

$$\frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t')} = 0, \quad (22)$$

das heißt der Pfad der kleinsten Wirkung. In diesem Fall addieren sich die Beiträge dicht benachbarter Pfade (in erster Ordnung) konstruktiv. Der klassische Pfad trägt also besonders stark zum Ergebnis bei. Dies entspricht dem Hamiltonschen Prinzip.

An dieser Stelle sei auf das populärwissenschaftliche Buch [5] hingewiesen. In diesem wird der Leser sukzessive und sehr illustrativ mit den wenig intuitiven Konsequenzen des Pfadintegrals – insbesondere für die Quantenelektrodynamik – vertraut gemacht. Insbesondere das gegenseitige Aufheben von Pfaden, die nicht zum Resultat beitragen wird hier anschaulich dargelegt.

3.3 Anwendungen

Das Pfadintegral wird in zahlreichen Problemstellungen in verschiedenen Themenfeldern genutzt. Abschließend sei daher eine kurze, exemplarische Übersicht über die Anwendungsmöglichkeiten des Pfadintegrals gegeben.

- Die Teilchenbahnen in Gegenwart von magnetischen Flußröhren, d. h. insbesondere der *Aharonov-Bohm-Effekt* lassen sich mithilfe des Pfadintegrals bestimmen.
- Das Pfadintegral wird zur Untersuchung von *Tunnelphänomenen* herangezogen.

- In der Chemie dient das Pfadintegral zur quantitativen Analyse von *Polymeren*, d. h. langen Molekülketten.
- Weiterhin erlaubt das Pfadintegral die *Berechnung von thermodynamischen Zustandssummen*. Dieses Vorgehen ist die Basis von zahlreichen numerischen Methoden innerhalb der Quantenfeldtheorie, insbesondere für sogenannte nichtstörungstheoretische Methoden.
- Wie eingangs bereits erwähnt spielt das Pfadintegral eine nicht zu ersetzende Rolle in der *Quantenfeldtheorie insgesamt*. Insbesondere die Pfadregeln der Feynman-Diagramme lassen sich in diesem Formalismus übersichtlich herleiten.

Literatur

- [1] DIRAC, Paul Adrien M.: The Lagrangian in Quantum Mechanics. In: *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* (1933)
- [2] FEYNMAN, Richard P.: The Space-Time Formulation of Nonrelativistic Quantum Mechanics. In: *Reviews of Modern Physics* (1948)
- [3] MACKENZIE, Richard: *Path Integral Methods and Applications*. <http://arxiv.org/abs/quant-ph/0004090v1>
- [4] MÜNSTER, Gernot: *Quantentheorie*. De Gruyter Verlag, 2006
- [5] FEYNMAN, Richard P.: *QED – Die seltsame Theorie des Lichts und der Materie*. Piper, 2010