

Die Pfadintegral-Formulierung der Quantenmechanik

Vortrag im Rahmen des Quantenmechanik-Seminars bei Prof. Wolschin

Mathieu Kaltschmidt

21. Dezember 2018

Institut für Theoretische Physik, Universität Heidelberg

1. Von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik
2. Die Idee des Pfadintegral-Formalismus
3. Der Harmonische Oszillator
4. Der klassische Grenzfall
5. Weiterführende Anwendungen

Von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik

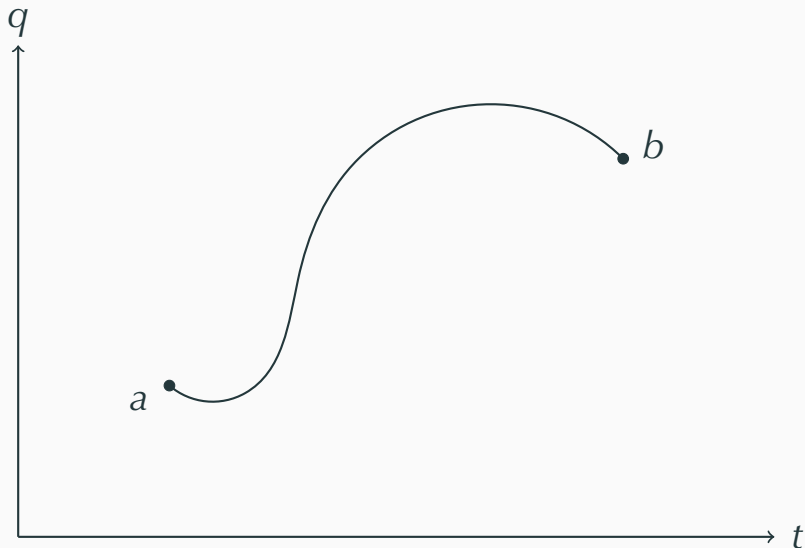


Abbildung 1: Trajektorie eines klassischen Punktteilchens

Klassische Dynamik von Teilchen

- Trajektorien ergeben sich aus dem **Wirkungsprinzip**, das heißt die Wirkung \mathcal{S} , mit

$$\mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t))$$

soll minimiert werden.

- Dazu muss die erste Variation $\delta\mathcal{S}$ verschwinden:

$$\delta\mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \delta q + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right) \stackrel{!}{=} 0$$

- Ausführen der Variation liefert **Euler-Lagrange-Gleichungen:**

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = 0$$

Bisheriger Zugang zur Quantenmechanik

- Determinismus \longrightarrow Wahrscheinlichkeitsaussagen
- Zentrale Objekte sind **Zustände** $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$
- Messung verschiedener Observablen mittels selbsadj. **Operatoren**

Interpretationen der Quantenmechanik

1. Matrizenmechanik nach Heisenberg et al.

$$\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H]$$

2. Wellenmechanik nach Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

3. **Mein Vortrag:** Pfadintegral-Formalismus nach Feynman et al.

Entwicklung des Pfadintegral-Formalismus

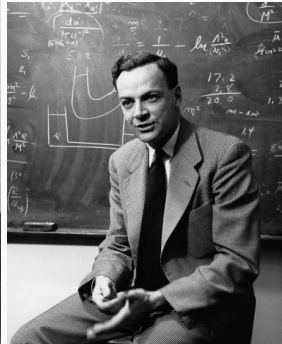


Abbildung 2: Von links nach rechts:

G. Wentzel¹, P. A. M. Dirac² und R. P. Feynman³

¹ Quelle: https://research.uni-leipzig.de/catalogus-professorum-lipsiensium/leipzig/Wentzel_378/

² Quelle: <https://www.gettyimages.de/search/2/image?specificpeople=2032478&sort=best>

³ Quelle: <http://www.caltech.edu/news/feynmans-nobel-year-48524>

- **1924: G. Wentzel** entdeckt 1924 das später nach Feynman benannte Pfadintegral.
- **1933: P. Dirac** erkennt die besondere Bedeutung des Wirkungsfunktional für die klassische Mechanik, vgl. [1].
- **1948: R. Feynman** formuliert seine grundlegende, alternative Formulierung der Quantenmechanik, den Pfadintegral-Formalismus, vgl. [2].

Die Idee des Pfadintegral-Formalismus

Die Idee des Pfadintegral-Formalismus

Grundlegende Fragestellung

Was ist die **Wahrscheinlichkeitsamplitude** für den Übergang von (q_a, t_a) nach (q_b, t_b) für $t_b > t_a$.

Feynman's Ideen von 1948

- Die Amplitude bezeichnet man als **Kernel** $K(b, a)$:

$$K(b, a) = \sum_{\text{alle Pfade}} \phi[q(t)]$$

- Beitrag eines einzelnen Pfades:

$$\phi[q(t)] \sim N \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[q(t)]\right)$$

- Wahrscheinlichkeit für den Übergang:

$$P(b, a) = |K(b, a)|^2$$

Interessant ist die Analyse der **Übergangsamplitude**:

$$\langle q_b, T | q_a, 0 \rangle = \langle q_b | \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} T \right) | q_a \rangle$$

Einige hilfreiche Identitäten:

- Identität im Ortraum: $\mathbb{1} = \int dq_k |q_k\rangle \langle q_k|$
- Baker-Campbell-Hausdorff: $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B] + \dots}$
- Basistransformation: $\langle p_k | q_k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_k q_k}$

Die Idee des Pfadintegral-Formalismus

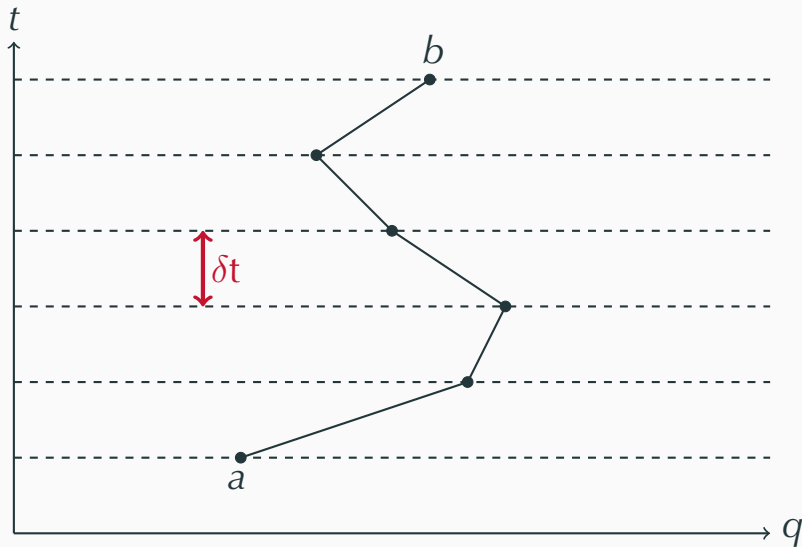


Abbildung 3: Konstruktion der "Summe über alle Pfade"

Konstruktion aus der Lokalität aus Einzelspalten

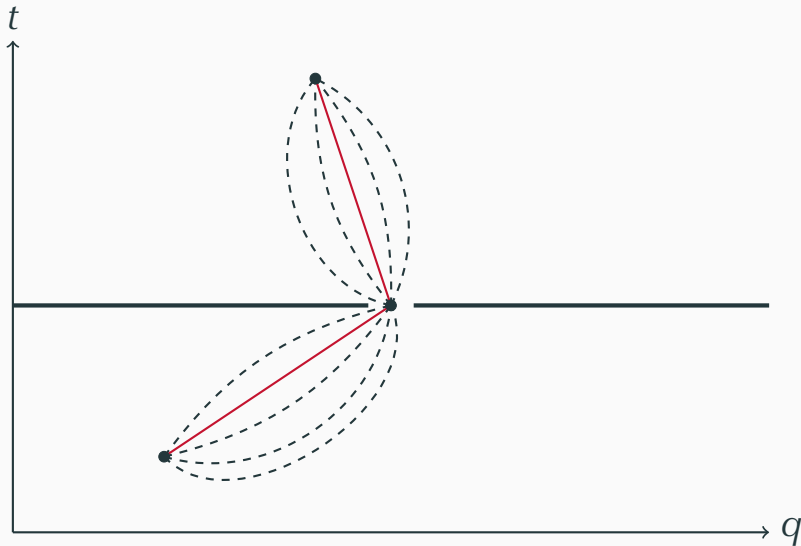


Abbildung 4: Mögliche Darstellung der Vorstellung der Lokalisierung

Wichtiges Zwischenergebnis

Formale Definition des Pfadintegrals

$$\langle q_b, T | q_a, 0 \rangle = \int_{q(0)=q_0}^{q(T)=q_T} \mathcal{D}q(t) \mathcal{D}p(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt [p\dot{q} - H(p, q)] \right)$$

Neue Notation:

$$\mathcal{D}q(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^N dq_k$$
$$\mathcal{D}p(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=0}^N dp_k$$

Wir benötigen die Definition des **Gaußintegrals**:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq \exp \left(-\frac{1}{2} a q^2 + b q \right) = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \exp \left(\frac{b^2}{2a} \right) \quad \text{mit } \Re(a) > 0$$

Ergebnis der Herleitung

Endergebnis der Herleitung für einen Hamiltonian der Form $\frac{p^2}{2m} + V(q)$:

Feynman-Kac-Formel

$$\begin{aligned}\langle q_b, T | q_a, 0 \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \gamma^{N+1} \prod_{k=1}^N \int dq_k \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \mathcal{L}(\dot{q}, q) \right) \\ &\equiv \int_{q_0}^{q_T} \mathcal{D}q(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \mathcal{L}(\dot{q}, q) \right)\end{aligned}$$

- Integrationsmaß berücksichtigt Information aus p -Integration
- Wir dürfen nun \mathcal{L} im Exponenten schreiben, da nun wirklich eine Funktion von \dot{q} und q vorliegt.

Der Harmonische Oszillator

Anwendung des erlernten Formalismus

Wir wollen nun das Erlernte benutzen um die Energie-Eigenwerte für das Potential des harmonischen Oszillators zu bestimmen.

Wir kennen den Lagrangian für dieses Problem:

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - \frac{m\omega^2}{2} q^2$$

Wir schreiben die Pfade als Abweichungen vom klassischen Pfad:

$$q(t) = q_{\text{cl}}(t) + \eta(t)$$

Die Wirkung des klassischen Beitrags ist bekannt:

$$\mathcal{S}[q_{\text{cl}}] = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} [(q_T^2 + q_0^2) \cos(\omega T) - 2q_T q_0]$$

Mehler-Formel für den harmonischen Oszillator

$$\langle q_b, T | q_a, 0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} \exp \left(\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin(\omega T)} [(q_T^2 + q_0^2) \cos(\omega T) - 2 q_T q_0] \right)$$

Energiespektrum

Wir bilden die Spur des Zeitentwicklungsoperators:

$$\text{Tr}(U(T, 0)) = \text{Tr} \left(\exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} T \right) \right) = \sum_k \exp \left(-\frac{i}{\hbar} E_k T \right)$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(U(T, 0)) &= \int_{-\infty}^{\infty} dq \langle q, T | q, 0 \rangle \\&= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} \int_{-\infty}^{\infty} dq \exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega T)} [2q^2(\cos(\omega T) - 1)]\right) \\&= \frac{1}{2i \sin\left(\frac{\omega T}{2}\right)} \\&= \frac{\exp\left(-i\frac{\omega T}{2}\right)}{1 - \exp(-i\omega T)} \\&= \sum_{k=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hbar \omega \left(k + \frac{1}{2}\right) T\right)\end{aligned}$$

Dies liefert uns das gewünschte, bereits bekannte Energie-Spektrum des Harmonischen Oszillators!

Der klassische Grenzfall

- Klassischer Limes: $\hbar \rightarrow 0$

$$\phi[q] \sim \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[q]\right)$$

- Starke Oszillation im Phasenfaktor
- Für den klassischen Pfad ist \mathcal{S} stationär!

Fazit

- Der dominante Pfad für den Limes $\hbar \rightarrow 0$ ist gerade der Klassische!
- Die schnelle Oszillation des Exponenten führt zu "destruktiver Interferenz" von den Beiträgen der Pfade, die weit von der klassischen Lösung entfernt sind.

Beiträge zur Übergangsamplitude

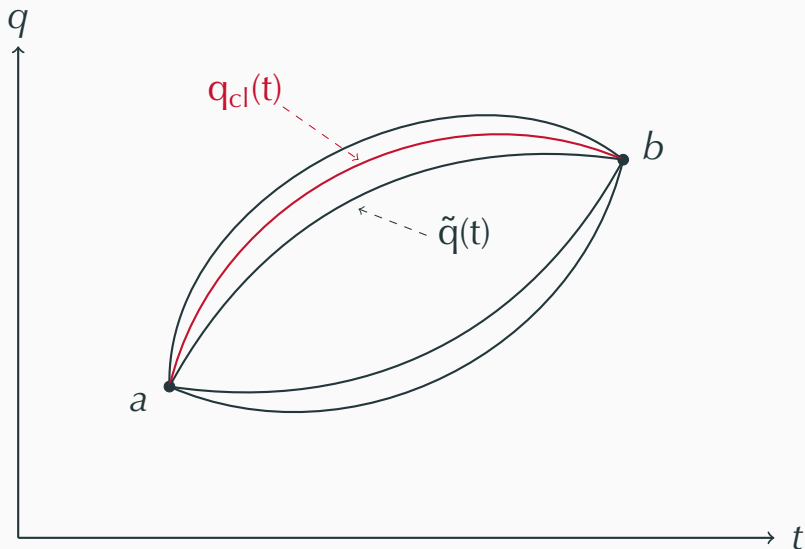


Abbildung 5: Abweichungen zum klassischen Pfad

Weiterführende Anwendungen

Mathematisches Tool: Wick-Rotation

Als **Wick-Rotation** bezeichnen wir die analytische Fortsetzung

$$t \longrightarrow e^{-i\varphi} \tau \quad \varphi : 0 \rightarrow \frac{\pi}{2}$$

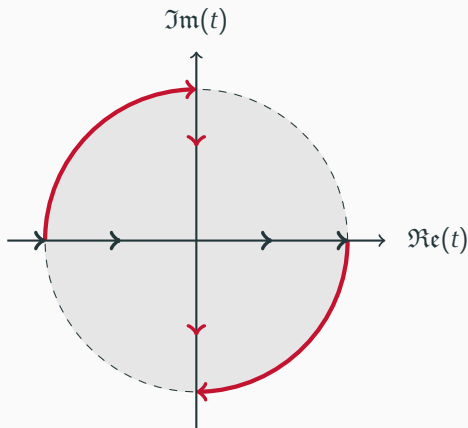


Abbildung 6: Visualisierung der Wick-Rotation

- Betrachte nur Pfade, welche bei der selben Konfiguration starten und auch wieder enden:

$$Z = \int \mathcal{D}q \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_{\text{eukl.}}[q] \right)$$

- Dies entspricht der kanonischen Zustandssumme mit

$$\frac{1}{T} = \frac{k_B \tau}{\hbar}$$

- Insgesamt gilt:

$$Z = \int dq U(q, \beta \hbar; q) = \sum_k \langle k | \int dq e^{-\beta E_k} |q\rangle \langle q|k\rangle = \sum_k e^{-\beta E_k}$$

In der Quantenfeldtheorie wird man häufig mit Pfadintegralen konfrontiert.

- Man berechnet zum Beispiel **Erwartungswerte**:



$$\langle F \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi F[\phi] e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}[\phi]}}{\int \mathcal{D}\phi' e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}[\phi']}}$$

- oder die sog. **Korrelationsfunktionen**:

$$\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \dots \phi(x_n) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}[\phi]} \phi(x_1) \dots \phi(x_n)}{\int \mathcal{D}\phi' e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}[\phi']}}$$

Vielen Dank für eure Aufmerksamkeit!

Literaturverzeichnis

-  P. A. M. Dirac.
The lagrangian in quantum mechanics.
Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion, 3(1):312–320, 1933.
-  R. P. Feynman.
Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics.
Reviews of Modern Physics, 20(2):367–387, 1948.
-  R. P. Feynman and A. R. Hibbs.
Quantum mechanics and path integrals.
Dover, New York [u.a.], 2010.
-  A. Hebecker.
Theoretische Physik II - Analytische Mechanik und Thermodynamik.
Universität Heidelberg, 2017.
-  A. Hebecker.
Theoretische Physik IV - Quantenmechanik.
Universität Heidelberg, 2018.
-  R. MacKenzie.
Path Integral Methods and Applications.
Université de Montréal, 2000.
-  Yen Chin Ong.
Note: Where is the Commutation Relation Hiding in the Path Integral Formulation?
Leung Center for Cosmology and Particle Astrophysics, National Taiwan University,
Taipei, Taiwan 10617.
-  T. Weigand.
Quantum Field Theory I + II.
Heidelberg University, 2013/2014.