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

Inhaltsverzeichnis

Von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik

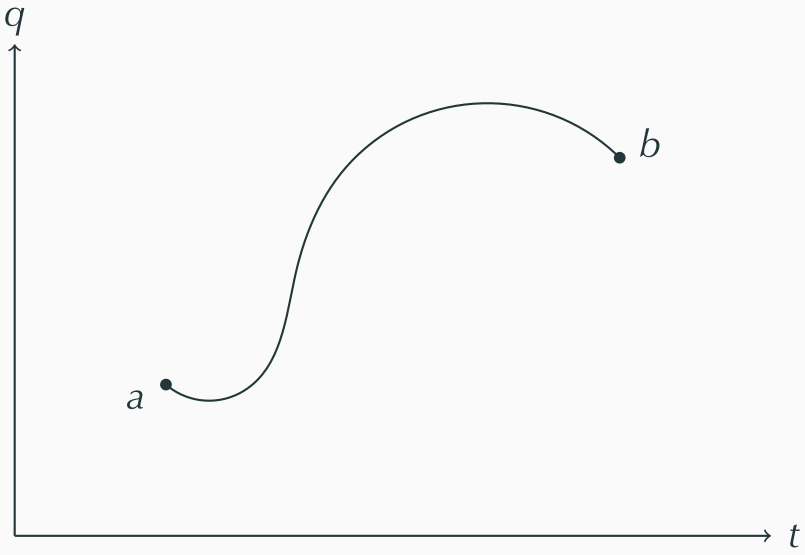

Abbildung 1: Trajektorie eines klassischen Punktteilchens

Klassische Dynamik von Teilchen

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

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

  soll minimiert werden.

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

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

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

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

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.

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathrm{A}}_{\mathrm{H}}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\hat{\mathrm{H}}, \hat{\mathrm{A}}_{\mathrm{H}}\right]$$

2. Wellenmechanik nach Schrödinger

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

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

Entwicklung des Pfadintegral-Formalismus

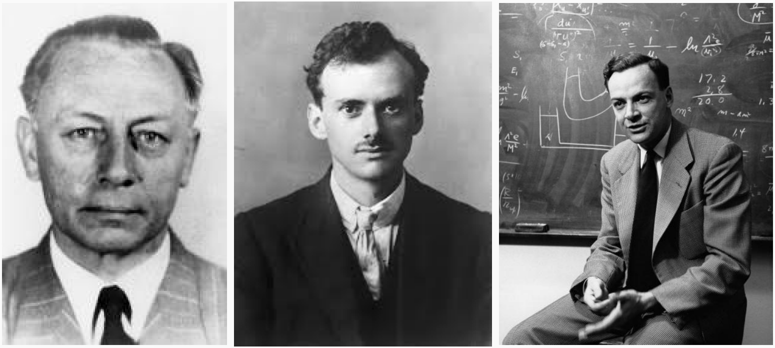

Abbildung 2: Von links nach rechts:
G. Wentzel[1], P. A. M. Dirac[2] und R. P. Feynman[3]

[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

Entwicklung des Formalismus

- **1924: G. Wentzel** entdeckt 1924 das später nach Feynman benannte Pfadintegral.
- **1933: P. Dirac** erkennt die besondere Bedeutung des Wirkungsfunktionals 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:

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

- Wahrscheinlichkeit für den Übergang:

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

Ausgangslage für unsere Herleitung

Interessant ist die Analyse der **Übergangsamplitude**:

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

Einige hilfreiche Identitäten:

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

Die Idee des Pfadintegral-Formalismus

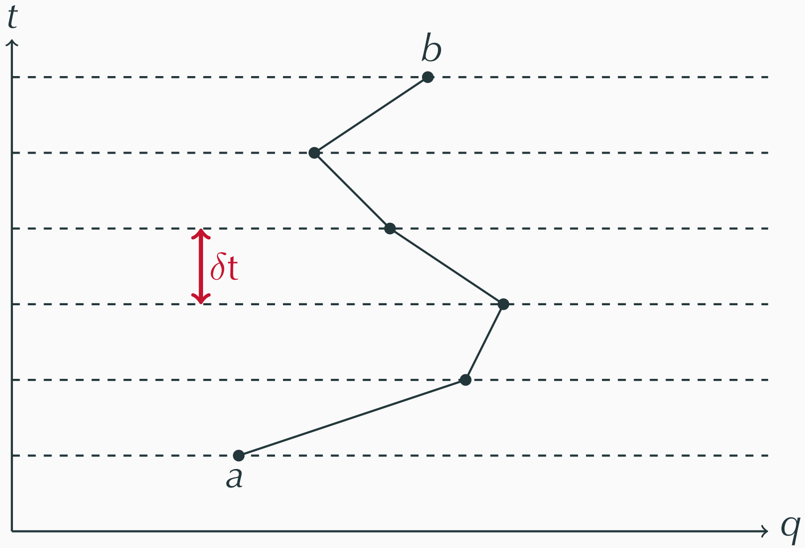

Abbildung 3: Konstruktion der "Summe über alle Pfade"

Konstruktion aus der Lokalität aus Einzelspalten

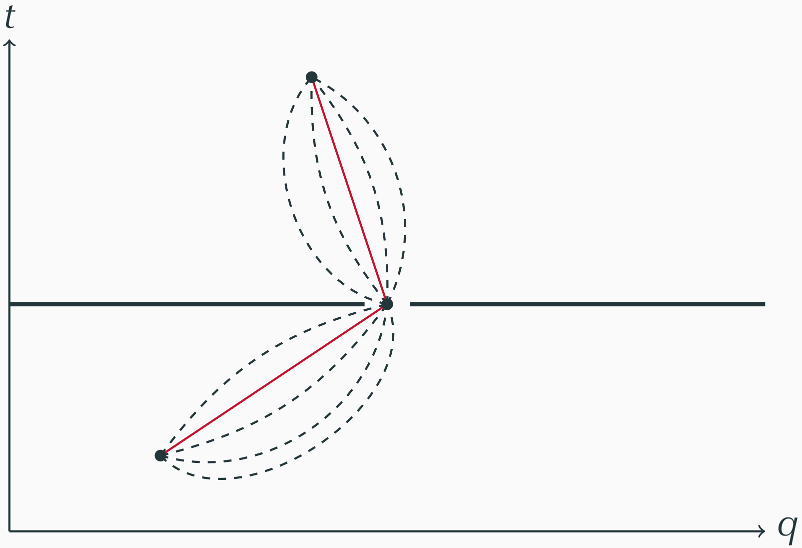

Abbildung 4: Mögliche Darstellung der Vorstellung der Lokalisierung

Wichtiges Zwischenergebnis

Formale Definition des Pfadintegrals

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

Neue Notation:

$$\mathcal{D}q(t) = \lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N} \mathrm{d}q_k$$

$$\mathcal{D}p(t) = \lim_{N\to\infty} \prod_{k=0}^{N} \mathrm{d}p_k$$

Wir benötigen die Definition des **Gaußintegrals**:

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

Ergebnis der Herleitung

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

Feynman-Kac-Formel

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

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

Der Harmonische Oszillator

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:

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

Wir schreiben die Pfade als Abweichungen vom klassischen Pfad:

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

Die Wirkung des klassischen Beitrags ist bekannt:

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

Mehler-Formel und Energiespektrum

Mehler-Formel für den harmonischen Oszillator

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

Energiespektrum

Wir bilden die Spur des Zeitentwicklungsoperators:

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

Mehler-Formel und Energiespektrum

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

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

Der klassische Grenzfall

Der klassische Grenzfall

- Klassischer Limes: $\hbar \to 0$

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

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

Fazit

- Der dominante Pfad für den Limes $\hbar \to 0$ 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

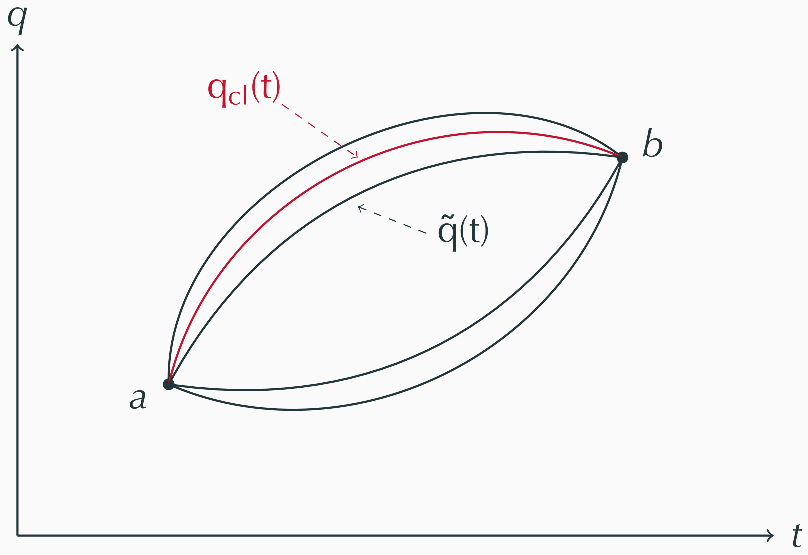

Abbildung 5: Abweichungen zum klassischen Pfad

Weiterführende Anwendungen

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

$$t \longrightarrow \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\,\tau \qquad \varphi : 0 \to \frac{\pi}{2}$$

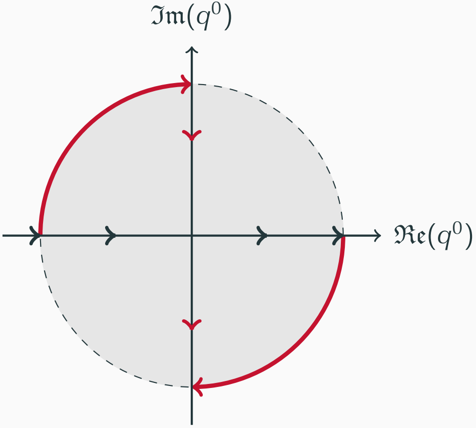

Abbildung 6: Visualisierung der Wick-Rotation

Pfadintegrale in der Statistischen Physik

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

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

- Dies entspricht der kanonischen Zustandssumme mit

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

- Insgesamt gilt:

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

Pfadintegrale in der Quantenfeldtheorie

In der Quantenfeldtheorie wird man häufig mit Pfadintegralen konfrontiert.

- Man berechnet zum Beispiel **Erwartungswerte**:

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

- oder die sog. **Korrelationsfunktionen**:

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

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.

Prof. Arthur Hebecker.
Theoretische Physik IV - Quantenmechanik.
Universität Heidelberg, 2018.

Richard 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.

Prof. Timo Weigand.
Quantum Field Theory I + II.
Heidelberg University, 2013/2014.