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

Klassische Dynamik von Teilchen

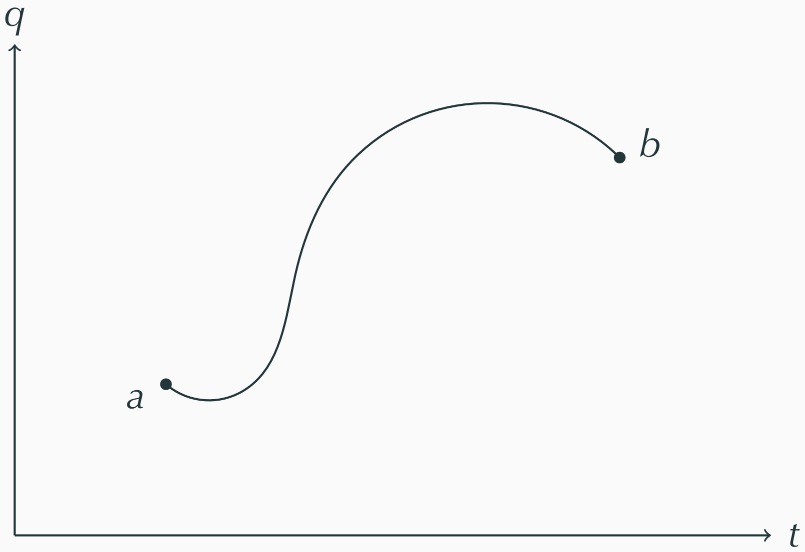

Abbildung 1: Trajektorie eines klassischen Punktteilchens

Klassische Dynamik von Teilchen

- Trajektorien ergeben sich aus dem **Wirkungsprinzip**:

$$\text{Wirkung } S = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \, \mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t)) \text{ wird minimiert.}$$

- Erste Variation δS soll verschwinden:

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \delta q + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \overset{!}{=} 0$$

- 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.

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

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

- Grundlegende Beiträge von **Gregor Wentzel, Paul Dirac** und insbesondere **Richard P. Feynman**

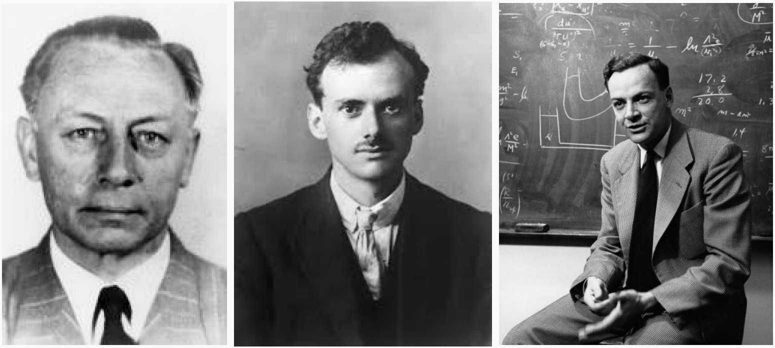

Abbildung 2: Von links nach rechts: G. Wentzel, P. Dirac und R. Feynman

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**:

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \langle q_b | \exp\left(-\mathrm{i}\hat{\mathrm{H}}(t_b - t_a)\right) | q_a \rangle$$

Einige hilfreiche Identitäten:

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

Die Idee des Pfadintegral-Formalismus

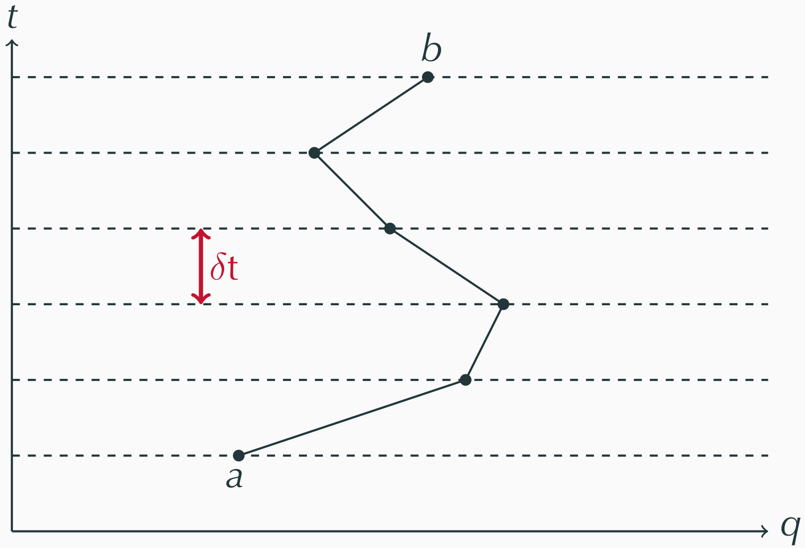

Abbildung 3: Konstruktion der "Summe über alle Pfade"

Übergang zu zwei und mehr Events

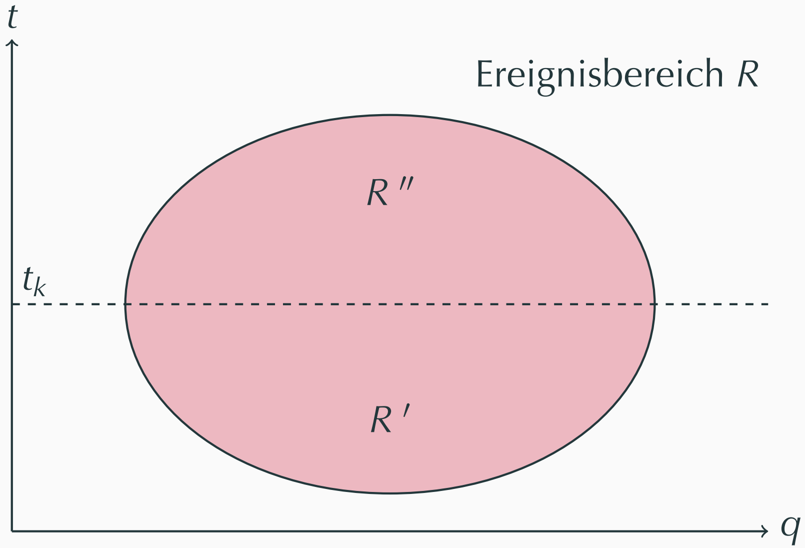

Abbildung 4: Zerlegung des Ereignisraumes

Übergang zu zwei und mehr Events

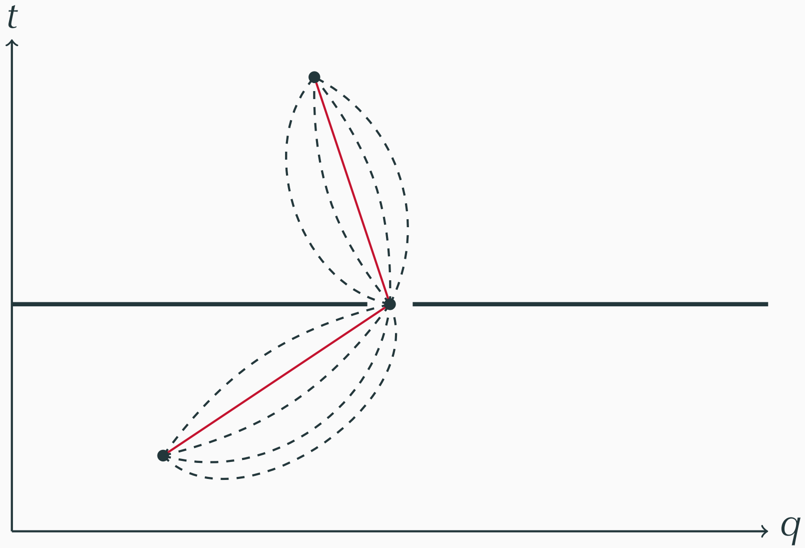

Abbildung 5: Einzelspalt zur Veranschaulichung der Idee von Multi-Events

Wichtiges Zwischenergebnis

Formale Definition des Pfadintegrals

$$
\begin{aligned}
K(b,a) &= \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle \\
&= \int_a^b \mathcal{D}[q(t)] \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t\, \mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t))\right)
\end{aligned}
$$

Im nächsten Schritt untersuchen wir den Fall eines allgemeinen Hamiltonians der Form:

$$
\hat{\mathrm{H}}(p,q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)
$$

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

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

Kommutatorrelation im Pfadintegralformalismus

Wo versteckt sich die Kommutatorrelation?

Ein grundlegendes Problem?

Ein zentraler Fakt in der Quantenmechanik war bisher:

$$[p, q] = -\mathrm{i}\hbar$$

Wo finden wir die kanonische Kommutatorrelation im Pfadintegral-Formalismus?

Wo versteckt sich die Kommutatorrelation?

Vorgehensweise, basierend auf [6]:

1. Aufspalten des Pfadintegrals im Zeitintervall $[0, T]$:

$$\begin{aligned}\int_{(q_a,0)}^{(q_b,T)} \mathrm{d}q\, e^{i\mathcal{S}}\, q(t) &= \int \mathrm{d}q\, \langle q_b, T|q, t\rangle\, q\, \langle q, t|q_a, 0\rangle \\ &= \int \mathrm{d}q\, \langle q_b, T|\ \tilde{q}(t)\ |q, t\rangle \langle q, t|q_a, 0\rangle \\ &= \langle q_b, T|\ \tilde{q}(t)\ |q_a, 0\rangle\end{aligned}$$

2. Analog: Produkt von zwei eingefügten q‘s:

$$\int_{(q_a,0)}^{(q_b,T)} \mathrm{d}q\, e^{i\mathcal{S}}\, q(t)q(t') = \langle q_b, T| \underbrace{\hat{\mathrm{T}}\ [\hat{q}(t)\ \hat{q}(t')]}_{=\theta(t-t')q(t)q(t')+\theta(t'-t)q(t)q(t)} |q_a, 0\rangle$$

3. Partielle Integration liefert:

$$\left\langle \psi_b \middle| \frac{\delta F}{\delta q_k} \middle| \psi_a \right\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left\langle \psi_b \middle| F \frac{\delta \mathcal{S}}{\delta q_k} \middle| \psi_a \right\rangle$$

Wo versteckt sich die Kommutatorrelation?

Vorgehensweise, basierend auf [6]:

4. Diskretisiere $\mathcal{S} = \sum_k \mathcal{S}(q_{k+1}, q_k) = \frac{m\varepsilon}{2}\left[\frac{q_{k+1} - q_k}{\varepsilon}\right]^2 - \varepsilon V(q_{k+1})$:

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\delta F}{\delta q_k} \overset{S}{\longleftrightarrow} F\left[\frac{\delta \mathcal{S}(q_{k+1}, q_k)}{\delta q_k} + \frac{\delta \mathcal{S}(q_k, q_{k-1})}{\delta q_k}\right]$$

5. Wähle $F = q_k$ und vernachlässige Terme $\mathcal{O}(\varepsilon)$:

$$\underbrace{m\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\varepsilon}\right)}_{p_k} q_k - \underbrace{m\left(\frac{q_k - q_{k-1}}{\varepsilon}\right)}_{p_k} q_k \overset{S}{\longleftrightarrow} -i\hbar$$

Fazit

Die Kommutatorrelation versteckt sich also in der Diskretisierung und der sukzessiven Anwendung des Zeitordnungsoperators $\hat{\mathrm{T}}$!

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 die den Lagrangian für dieses Problem:

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

Wir schreiben die Pfade als Abweichungen vom klassischen Pfad:

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

Klassische Lösung für $q(t_a) = q_a$ und $q(t_b) = q_b$:

$$q_{cl.}(t) = \frac{\sin \omega(t_b - t)}{\sin \omega(t_b - t_a)} \cdot q_a + \frac{\sin \omega(t - t_a)}{\sin \omega(t_b - t_a)} \cdot q_b$$

Mehler-Formel für den harmonischen Oszillator

$$\begin{aligned}\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \mathrm{i}\hbar \sin(\omega T)}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{S}_{cl.}\right) \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \mathrm{i}\hbar \sin(\omega T)}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}m\omega}{2\hbar \sin(\omega T)}\left[(q_b^2 + q_a^2)\cos(\omega T) - 2q_b q_a\right]\right)\end{aligned}$$

wobei $T = t_b - t_a =$ Periodendauer.

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

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

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

Der klassische Grenzfall

Beiträge zur Übergangsamplitude

Betrachte benachbarte Pfade $q(t)$ und $\tilde{q}(t) = q(t) + \eta(t)$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}[q(t)] &= \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) \\
\mathcal{S}[\tilde{q}(t)] &= \mathcal{S}[q(t) + \eta(t)] \\
&\qquad = \mathcal{S}[q(t)] + \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, \eta(t) \frac{\delta \mathcal{S}[q(t)]}{\delta q(t)} + \mathcal{O}(\eta^2)
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich für den Beitrag zur Übergangsamplitude $K(b, a)$:

$$A \;\simeq\; \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \mathcal{S}[q(t)] \right) \cdot \underbrace{\left(1 + \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int \mathrm{d}t\, \eta(t) \frac{\delta \mathcal{S}[q(t)]}{\delta q(t)} \right) \right)}_{\hbar \to 0 \implies \text{größere Abweichung}}$$

Beiträge zur Übergangsamplitude

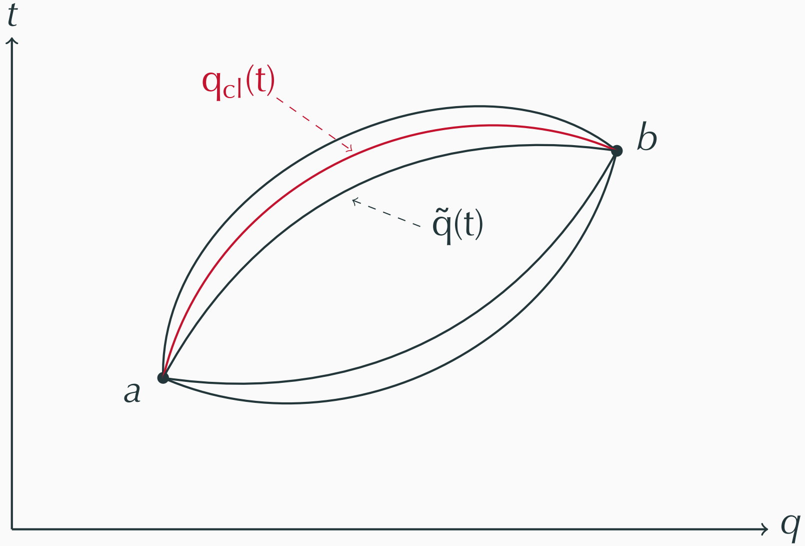

Abbildung 6: Abweichungen zum klassischen Pfad

Weiterführende Anwendungen

Mathematisches Tool: Wick-Rotation

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

$$\tau \longrightarrow -\mathrm{i}t$$

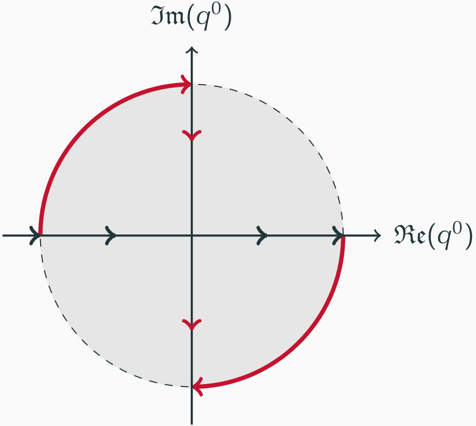

Abbildung 7: Visualisierung der Wick-Rotation

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**:

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

- oder die sog. **Korrelationsfunktionen**:

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

Vielen Dank für eure Aufmerksamkeit!

Literaturverzeichnis I

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.

Literaturverzeichnis II

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.