

Die Pfadintegral-Formulierung der Quantenmechanik

Mathieu Kaltschmidt

21. Dezember 2018

Institut für Theoretische Physik
Universität Heidelberg

Dieser Vortrag entstand im Rahmen des Seminars *Theoretische Quantenmechanik*, organisiert von Prof. Wolschin am Institut für Theoretische Physik der Universität Heidelberg im Wintersemester 2018/2019.

Ziel des Vortrages ist es, eine alternative Formulierung der Quantenmechanik, den sog. Pfadintegral-Formalismus, zu motivieren und diesen aus der expliziten Analyse einer Übergangsamplitude herzuleiten.

Der Formalismus wird verwendet, um das Eigenenergie-Spektrum des Harmonischen Oszillators zu bestimmen und das Resultat mit den bereits bekannten Eigenenergien verglichen.

Ein Ausblick auf die zahlreichen Anwendungsgebiete der Pfadintegrale, vor allem in der Statistischen Physik und der Quantenfeldtheorie, wird präsentiert.

Zu Beginn wird noch einmal das grundlegende Konzept des Wirkungsprinzips in der klassischen Mechanik sowie die bisher kennengelernten Interpretationen der Quantenmechanik nach Heisenberg und Schrödinger wiederholt.

1 Das Wirkungsprinzip in der klassischen Mechanik

Die ersten Konfrontationen mit theoretisch-physikalischen Problemen treten im Studium in der klassischen und analytischen Mechanik auf. Genauer gesagt ist man zunächst einmal interessiert an den Bewegungsgleichungen beziehungsweise an den Trajektorien des untersuchten Systems, welche dessen zeitliche Entwicklung deterministisch vorhersagen. Die Trajektorien ergeben sich hierbei aus dem **Hamiltonschen Wirkungsprinzip**, welches besagt, dass für jedes mechanische System eine Funktion existiert, die sog. **Lagrange-Funktion** $\mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t), t)$, so dass gilt:

Die physikalische Bewegung aus einer Lage q_a bei $t = t_a$ in eine Lage q_b bei $t = t_b$ verläuft so, dass das Wirkungsfunktional

$$\mathcal{S} = \int_{t_a}^{t_b} dt \mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t)) \quad (1)$$

minimiert wird.

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

$$\delta\mathcal{S} = \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \delta q + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right) \stackrel{!}{=} 0 \quad (2)$$

Das Ausführen dieser Variation liefert die bekannten **Euler-Lagrange-Gleichungen**

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = 0 \quad (3)$$

aus deren Lösung wir die gesuchten Bewegungsgleichungen erhalten.

Bereits 1933 hat Paul Dirac auf die besondere Bedeutung sowohl der Lagrange-Funktion, als auch des Wirkungsfunktional in der klassischen Mechanik sowie bei der Beschreibung von quantenmechanischen Übergangsamplituden $\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle$ hingewiesen [1].

Wir werden sehen, dass Richard Feynman diese grundlegenden Konzepte sowie Diracs Ideen für seine Pfadintegral-Formulierung der Quantenmechanik einige Jahre später aufgegriffen hat.

2 Bisherige Zugänge zur Quantenmechanik

Eine der großen Revolutionen der modernen Physik im 20. Jahrhundert war mit Sicherheit die fortschreitende Entwicklung der Quantenmechanik.

Die im ersten Teil bereits angesprochenen, deterministischen Bewegungsgleichungen zur Beschreibung makroskopischer, mechanischer Probleme wurden ergänzt durch einen Formalismus, der den Anspruch hat, auch die Dynamik von mikroskopischen Prozessen und Systemen zu beschreiben und die klassischen Gleichungen als Grenzfall zu enthalten.

Die grundlegenden Axiome der Quantenmechanik, wie wir sie bereits kennengelernt haben, lassen sich wie folgt zusammenfassen:

1. Der Zustand eines physikalischen Systems wird vollständig durch einen Hilbertraum-Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ bestimmt.
2. Jeder physikalischen Observablen ist ein hermitescher Operator \hat{A} zugeordnet und umgekehrt. Die Eigenwerte sind die möglichen Messergebnisse.
3. Es gilt die Bornsche Regel: Gegeben einen Zustand $|\psi\rangle$, so ist die Wahrscheinlichkeit, das System im Zustand $|\chi\rangle$ zu finden, durch

$$P(\psi, \chi) = |\langle \psi | \chi \rangle|^2 \quad (4)$$

gegeben.

4. Der Erwartungswert einer Messung von \hat{A} ist

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (5)$$

Wird der Eigenwert A_i gemessen, so geht das System in den entsprechenden Eigenzustand über. Man spricht auch vom Kollaps der Wellenfunktion.

5. Die Zeitentwicklung wird durch einen unitären Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t_b, t_a)$ beschrieben.

Die beiden gängigsten Interpretationen der Quantenmechanik, mit denen wir bereits konfrontiert wurden, sind zum Einen die **Matrizenmechanik nach Heisenberg**, welche durch die **Heisenberg-Gleichung**

$$\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H] + \left(\partial_t \hat{A}_S\right)_H \quad (6)$$

charakterisiert wird. Hier ist $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ der Kommutator der beiden Operatoren und \hat{H} der zugehörige Hamilton-Operator des Systems.

Zum Anderen haben wir die **Wellenmechanik nach Schrödinger** mit der **Schrödinger-Gleichung**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (7)$$

kennengelernt.

Die Verbindung zwischen den beiden Interpretationen ist durch den unitären Zeitentwicklungsoperator gegeben:

$$|\psi, t\rangle_H = \hat{U}^\dagger(t_b, t_a) |\psi(t)\rangle_S \quad (8)$$

Wir wollen nun im nächsten Abschnitt einen alternativen Zugang zur Quantenmechanik, den bereits zuvor angesprochenen Pfadintegral-Formalismus, motivieren und herleiten.

3 Der Pfadintegral-Formalismus

Die Entwicklung des Formalismus begann bereits in den 1920er Jahren mit ersten Arbeiten des deutschen Physikers Gregor Wentzel. Dessen Veröffentlichungen wurde aber kaum Beachtung geschenkt.

Wie bereits zuvor angemerkt, legten die Arbeiten Paul Diracs über die Bedeutung des Lagrangians und des Wirkungsfunktional für die Quantenmechanik eine wichtige Grundlage für die Formulierung von Feynman, welche er schon im Rahmen seiner Doktorarbeit 1942 entwickelte und schlussendlich einige Jahre später 1948 publizierte.

3.1 Feynmans Postulate

An dieser Stelle wollen wir kurz einen Blick auf die Originalarbeit [2] von Feynman aus dem Jahr 1948 werfen und dessen Postulate des Pfadintegral-Formalismus vorstellen. Die Herleitung im nachfolgenden Abschnitt basiert hauptsächlich auf [8].

Die grundlegende Fragestellung mit der er sich beschäftigte, war die Analyse von Wahrscheinlichkeitsamplituden für Übergänge der Form $|q_a, t_a\rangle \rightarrow |q_b, t_b\rangle$ für $t_a < t_b$.

Die Amplitude bezeichnet er als **Kernel**, mit

$$K(b, a) = \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \sum_{\text{alle Pfade}} \phi[q(t)] \quad (9)$$

wobei für die Beiträge einzelner Pfade gilt:

$$\phi[q(t)] \sim N \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[q(t)]\right) \quad (10)$$

Hier wird auch schon die konzeptuell neue Idee des Formalismus deutlich, nämlich dass nun nicht wie zuvor in der Beschreibung der klassischen Mechanik nur der Pfad mit stationärer Wirkung zum Übergang beiträgt, sondern **alle möglichen Pfade**. Hierbei tragen alle Pfade gleichwertig bei, sie sind jedoch mit einer Phase gewichtet, welche proportional zum klassischen Wirkungsfunktional ist, wie bereits von Dirac vermutet.

Die Wahrscheinlichkeit für den Übergang ergibt sich dann aus dem Betragsquadrat des Kernels:

$$P(b, a) = |K(b, a)|^2 \quad (11)$$

Wie wir später sehen werden, liefert die Pfadintegral-Methode die gleichen Ergebnisse wie die anderen beiden Zugänge und enthält die klassische Mechanik als Grenzfall.

3.2 Allgemeine Herleitung

Ausgangspunkt unserer Herleitung ist die Auswertung der Übergangsamplitude:

$$\langle q_b, T | q_a, 0 \rangle = \langle q_b | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} T} | q_a \rangle \quad (12)$$

Wir teilen das Zeitintervall $[0, T]$ in $N + 1$ Teilintervalle der Länge $\delta t = \frac{T}{N+1}$, was dazu führt, dass die Exponentialfunktion in $N + 1$ Faktoren $e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t}$ zerfällt. Interessant ist die Betrachtung dieser Zerlegung im Limes für hohe N .

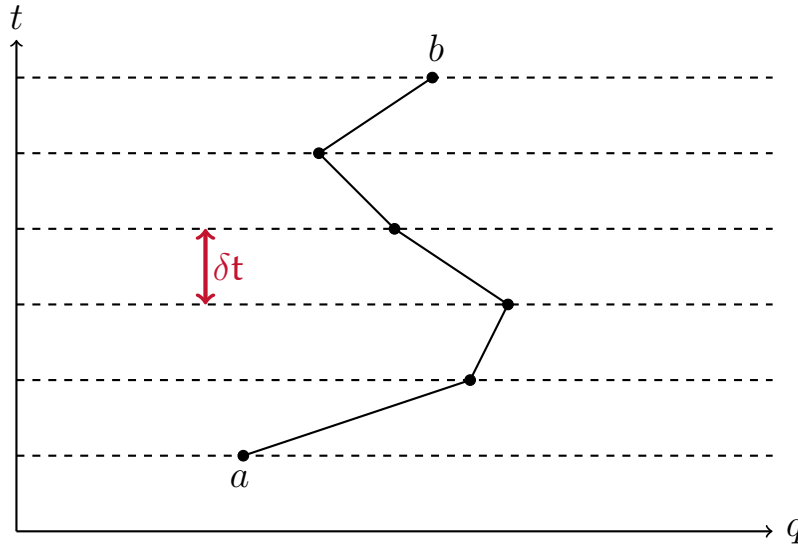


Abbildung 1: Visualisierung der durchgeführten Zerlegung

Nun wollen wir zwischen jedem der Faktoren Identitätsoperatoren im Ortsraum einfügen. Diese sind von der Form $\mathbb{1} = \int dq_k |q_k\rangle \langle q_k|$ und überführen Gleichung (12) in

$$\langle q_b, T | q_a, 0 \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^N dq_k \langle q_b | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} | q_N \rangle \langle q_N | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} | q_{N-1} \rangle \cdots \langle q_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} | q_a \rangle \quad (13)$$

Für den Hamilton-Operator wählen wir den Ansatz $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$. Dieser repräsentiert die Klasse der physikalisch relevantesten Probleme. Außerdem wird die (maximal) quadratische Abhängigkeit im kinetischen Term noch wichtig für die Herleitung sein.

Nach der *Baker-Campbell-Hausdorff-Formel* haben die einzelnen Exponential-Operatoren die Form

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} \delta t} e^{-\frac{i}{\hbar} V(\hat{q}) \delta t} e^{\frac{1}{2\hbar^2} [\frac{\hat{p}^2}{2m}, V(\hat{q})] \delta t^2} + \mathcal{O}(\delta t^3) \quad (14)$$

Aufgrund unserer Grenzwertbetrachtung für den Fall hoher N wollen wir jedoch auch den Term $\mathcal{O}(\delta t^2)$ für die weitere Herleitung vernachlässigen.

Wir fügen erneut Identitätsoperatoren ein, dieses Mal jedoch im Impulsraum und analysieren beispielhaft einen der Faktoren aus Gleichung (13):

$$\begin{aligned} \langle q_{k+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} | q_k \rangle &= \int dp_k \langle q_{k+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} \delta t} | p_k \rangle \langle p_k | e^{-\frac{i}{\hbar} V(\hat{q}) \delta t} | q_k \rangle \\ &= \int dp_k e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p_k^2}{2m} + V(q_k) \right) \delta t} \langle q_{k+1} | p_k \rangle \langle p_k | q_k \rangle \\ &= \int \frac{dp_k}{2\pi} e^{-\frac{i}{\hbar} H(p_k, q_k) \delta t} e^{\frac{i}{\hbar} (q_{k+1} - q_k) p_k} \end{aligned} \quad (15)$$

Der letzte Umformungsschritt begründet sich aus der Relation zwischen der Basis im Orts- und Impulsraum, welche durch die Fourier-Transformation gegeben ist und die folgende Form hat: $\langle p_k | q_k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_k q_k}$.

Setzen wir dieses Ergebnis in Gleichung (13) ein, so erhalten wir:

$$\langle q_b, T | q_a, 0 \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{dp_0}{2\pi} \prod_{k=1}^N \frac{dp_k dq_k}{2\pi} e^{\frac{i}{\hbar} \left[p_k \frac{q_{k+1} - q_k}{\delta t} - H(p_k, q_k) \right] \delta t} \quad (16)$$

beziehungsweise, wenn wir uns an die infinitesimale Definition der Ableitung erinnern:

$$\langle q_b, T | q_a, 0 \rangle = \int_{q(0)=q_a}^{q(T)=q_b} \mathcal{D}p(t) \mathcal{D}q(t) e^{\frac{i}{\hbar} [p_k \dot{q}_k - H(p_k, q_k)] \delta t} \quad (17)$$

Wir haben hier direkt die üblichen Konventionen für das Integrationsmaß

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

verwendet.

Im nächsten Schritt sind wir an der rigorosen Lösung für den von uns gewählten Ansatz $H(p_k, q_k) = \frac{p_k^2}{2m} + V(q_k)$ interessiert. In der diskreten Darstellung wie oben

$$\int \frac{dp_k}{2\pi} e^{-\frac{i}{\hbar} \left(p_k(q_{k+1} - q_k) - \frac{p_k^2}{2m} \delta t \right)} \quad (18)$$

erkennen wir die Form eines Gauß-Integrals, für das wir im Reellen die Lösung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \exp \left(-\frac{1}{2} ap^2 + bp \right) = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \exp \left(\frac{b^2}{2a} \right) \quad \text{mit } \Re(a) > 0 \quad (19)$$

kennen. Mit diesem Wissen können wir durch einen mathematischen Trick, eine analytische Fortsetzung in die komplexe Ebene, auch Gauß-Integrale der Form von Gleichung (18) lösen.

Wir wählen hierzu eine Substitution der Form $\delta t \rightarrow \delta t(1 - i\varepsilon)|_{\varepsilon=0}$ und erhalten:

$$\int \frac{dp_k}{2\pi} e^{-\frac{i}{\hbar} \left(p_k(q_{k+1} - q_k) - \frac{p_k^2}{2m} \delta t \right)} = \underbrace{\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\delta t}} e^{i\frac{3\pi}{4}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\delta t} (q_{k+1} - q_k)^2}}_{:= \gamma} \quad (20)$$

Dies führt uns zu dem Endergebnis der Herleitung, der **Feynman-Kac-Formel** für Übergangsamplituden:

$$\begin{aligned} \langle q_b, T | q_a, 0 \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \gamma^{N+1} \prod_{k=1}^N \int dq_k \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \mathcal{L}(q, \dot{q}) \right) \\ &\equiv \int_{q_0}^{q_T} \mathcal{D}q(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \mathcal{L}(q, \dot{q}) \right) \\ &= \int_{q_0}^{q_T} \mathcal{D}q(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}(q, \dot{q}) \right) \end{aligned} \quad (21)$$

Das Integrationsmaß berücksichtigt hierbei die Information aus der p -Integration, welche im Vorfaktor γ steckt.

Wir dürfen an dieser Stelle den Lagrangian \mathcal{L} anstelle des Ausdrucks $p\dot{q} - H(p, q)$ schreiben, welcher zuvor noch nicht als Legendre-Transformation angesehen werden konnte, da wir zuerst die p -Integration ausführen mussten, um den extremalisierenden Charakter der Legendre-Transformation zu berücksichtigen und eine Funktion von q und \dot{q} zu erhalten. Hier ist auch die Bedeutung des quadratisch in p angesetzten kinetischen Terms im Hamiltonian eingegangen.

4 Der Harmonische Oszillator

Wir wollen nun das Erlernte benutzen, um das Eigenenergie-Spektrum für das Potential des Harmonischen Oszillators zu bestimmen.

Wir kennen den Lagrangian für dieses Problem:

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - \frac{m\omega^2}{2} q^2 \quad (22)$$

und parametrisieren alle Pfade als Abweichungen vom klassischen Pfad:

$$q(t) = q_{\text{cl}}(t) + \eta(t) \quad (23)$$

Die Wirkung des klassischen Beitrags lässt sich aus einer etwas länglichen aber nicht allzu schweren Rechnung bestimmen und wird an dieser Stelle als bekannt vorausgesetzt:

$$\mathcal{S}[q_{\text{cl}}] = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} [(q_T^2 + q_0^2) \cos(\omega T) - 2q_T q_0] \quad (24)$$

Mit unserem Ansatz aus den Gleichungen (22) und (23) erhalten wir für die Wirkung eines beliebigen Pfades $q(t)$:

$$\mathcal{S}[q] = \frac{m}{2} \int_0^T dt [\dot{q}_{\text{cl}}^2 + \dot{\eta}^2 + 2\dot{q}_{\text{cl}}\dot{\eta} - \omega^2 (q_{\text{cl}}^2 + \eta^2 + 2q_{\text{cl}}\eta)] \quad (25)$$

Wir entwickeln das Wirkungsfunktional gemäß dem Ansatz

$$\mathcal{S}[q_{\text{cl}} + \eta] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dt_1 \cdots \int dt_n \frac{\delta^{(n)} \mathcal{S}[q_{\text{cl}} + \eta']}{\delta \eta'(t_1) \cdots \delta \eta'(t_n)} \bigg|_{\eta'=0} \eta(t_1) \cdots \eta(t_n) \quad (26)$$

wobei $\frac{\delta^{(n)} \mathcal{S}[q_{\text{cl}} + \eta']}{\delta \eta'(t_1) \cdots \delta \eta'(t_n)}$ der Variation n -ter Ordnung des Wirkungsfunktionals entspricht.

Aus dieser Entwicklung wird direkt ersichtlich, dass die Terme linear in η und $\dot{\eta}$ in Gleichung (25) vernachlässigt werden können, da per Definition die erste Variation der Wirkung für q_{cl} verschwindet.

Mit Hilfe dieses Ansatzes und unter Verwendung der Tatsache, dass alle Variationen für Ordnungen höher $n = 2$ gleich null sind, erhalten wir für die Wirkung $\mathcal{S}[q]$:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[q] &= \mathcal{S}[q_{\text{cl}}] + \frac{m}{2} \int_0^T dt [\dot{\eta}^2 - \omega^2 \eta^2] \\ &= \mathcal{S}[q_{\text{cl}}] + \frac{m}{2} \int_0^T dt \eta \left[-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2 \right] \eta \end{aligned} \quad (27)$$

Im letzten Schritt wurde partiell integriert, unter Berücksichtigung der Randbedingungen unseres Problems $q_{\text{cl}}(0) = q_0$, $q_{\text{cl}}(T) = q_T$ sowie $\eta(0) = \eta(T) = 0$.

An dieser Stelle sei angemerkt, dass für das Integrationsmaß $\mathcal{D}q = \mathcal{D}\eta$ gilt, was aus der Linearität des Ansatzes $\mathcal{D}q \simeq \prod_k dq_k$ mit $q_k = q_{\text{cl},k} + \eta_k$ folgt.

Wir suchen nach einem Ansatz für η , genauer nach einer Eigenfunktion zu $\left[-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2\right]$. Hierzu entwickeln wir η in eine Sinus-Fourierreihe, also

$$\eta(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \eta_n(t) \quad \text{mit} \quad \eta_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \quad (28)$$

was erneut aus unseren Randbedingungen folgt.

Diese Reihenentwicklung liefert uns eine Orthonormalbasis mit der Relation

$$\int_0^T dt \eta_n \eta_m = \delta_{nm} \quad (29)$$

die das Eigenwertproblem

$$\left[-\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2\right] \eta_n = \underbrace{\left(\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2\right)}_{:= \lambda_n} \eta_n \quad (30)$$

löst. Einsetzen in Gleichung (27) resultiert in

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[q] &= \mathcal{S}[q_{cl}] + \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} a_n a_m \int_0^T dt \eta_n \lambda_m \eta_m \\ &= \mathcal{S}[q_{cl}] + \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 \lambda_n \\ &= \mathcal{S}[q_{cl}] + \mathcal{S}[a_n] \end{aligned} \quad (31)$$

Hierbei handelt es sich um eine lineare Transformation. Aus diesem Grund müssen wir die auftretende Funktionaldeterminante $\det \mathbf{J}$ im Integrationsmaß berücksichtigen:

$$\mathcal{D}\eta = \det \mathbf{J} \prod_{n=1}^{\infty} da_n$$

Mit diesem Wissen können wir beginnen, Gleichung (21) für den Harmonischen Oszillator auszuwerten:

$$\begin{aligned} \langle q_b, T | q_a, 0 \rangle &= e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[q_{cl}]} \det \mathbf{J} \int \prod_{n=1}^{\infty} da_n e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} a_n^2 \lambda_n} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[q_{cl}]} \underbrace{\det \mathbf{J} \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi}{m\lambda_n}} e^{i\frac{3\pi}{4}}}_{:= \xi(T)} \end{aligned} \quad (32)$$

Der letzte Schritt folgt aus der Auswertung des Gauß-Integrals analog zur Herleitung der Feynman-Kac-Formel.

Wir wollen det **J** eliminieren und $\xi(T)$ auswerten, indem wir die Lösung für ein freies Teilchen $\xi_{\text{frei}}(T)$, also für $\omega = 0$ benutzen. Diese lässt sich recht einfach bestimmen, wenn man analog verfährt und beachtet, dass nun $\lambda_n|_{\omega=0} = \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2$ gilt.

Man findet:

$$\xi_{\text{frei}}(T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi T}} e^{i\frac{3\pi}{4}} \quad (33)$$

Damit finden wir folgenden Ausdruck für unser Problem:

$$\begin{aligned} \xi(T) &= \xi_{\text{frei}}(T) \cdot \frac{\xi(T)}{\xi_{\text{frei}}(T)} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi T}} e^{i\frac{3\pi}{4}} \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{\lambda_n|_{\omega=0}}{\lambda_n}} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi T}} e^{i\frac{3\pi}{4}} \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \left(\frac{\omega T}{n\pi}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi T}} e^{i\frac{3\pi}{4}} \left(\frac{\sin(\omega T)}{\omega T}\right)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (34)$$

Alles zusammen führt uns auf die **Mehler-Formel** für den Harmonischen Oszillator:

$$\langle q_b, T | q_a, 0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} \exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega T)} [(q_T^2 + q_0^2) \cos(\omega T) - 2q_T q_0]\right) \quad (35)$$

Um das resultierende Energiespektrum auszuwerten, bilden wir die Spur des Zeitentwicklungsoperators:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{U}(T, 0)) &= \int_{-\infty}^{\infty} dq \langle q, T | q, 0 \rangle \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} \int_{-\infty}^{\infty} dq \exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega T)} [2q^2(\cos(\omega T) - 1)]\right) \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}} \sqrt{\frac{\pi \hbar \sin(\omega T)}{im\omega(1 - \cos(\omega T))}} \\ &= \frac{1}{2i \sin\left(\frac{\omega T}{2}\right)} \\ &= \frac{\exp\left(-i\frac{\omega T}{2}\right)}{1 - \exp(-i\omega T)} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hbar \omega \left(k + \frac{1}{2}\right) T\right) \end{aligned} \quad (36)$$

Im Exponenten erkennen wir die bereits bekannten Eigenenergien des Harmonischen Oszillators, welche wir nun auch mit Hilfe des Pfadintegral-Formalismus hergeleitet haben.

5 Der klassische Grenzfall

Um die Herleitung abzurunden, wollen wir nun den klassischen Grenzfall untersuchen, welcher sich im Limes $\hbar \rightarrow 0$ wiederfindet.

In diesem Fall oszilliert der Phasenfaktor $\phi[q] \sim \exp(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[q])$ sehr stark und es wird deutlich, dass nur Pfade in direkter Nähe zum Pfad stationärer Wirkung konstruktiv zur Übergangsamplitude beitragen, was genau dem klassischen Fall entspricht. Lösungen, welche weiter entfernt vom klassischen Pfad sind, werden damit stark unterdrückt und liefern dementsprechend keinen Beitrag.

6 Weiterführende Anwendungen

Wie bereits in der Rechnung zum Harmonischen Oszillator deutlich wurde, liefert der Pfadintegral-Formalismus zwar die gleichen Resultate wie die anderen Zugänge, die Rechnungen sind jedoch sehr aufwendig. Das Wasserstoff-Atom beispielsweise wurde erst knapp 30 Jahre nach Feynmans Originalarbeit im Pfadintegral-Formalismus gelöst.

Große Anwendung finden Pfadintegrale jedoch in der Statistischen Physik und in der Quantenfeldtheorie, was nachfolgend anhand einiger Beispiele vorgestellt werden soll.

6.1 Die Wick-Rotation

Ein sehr nützliches mathematisches Hilfswerkzeug ist die sog. Wick-Rotation, welche es uns ermöglicht, eine analytische Fortsetzung in die komplexe Zahlenebene durchzuführen. Hierzu wird eine Substitution der Form

$$t \longrightarrow e^{-i\varphi} \tau \quad \varphi : 0 \rightarrow \frac{\pi}{2} \quad (37)$$

durchgeführt.

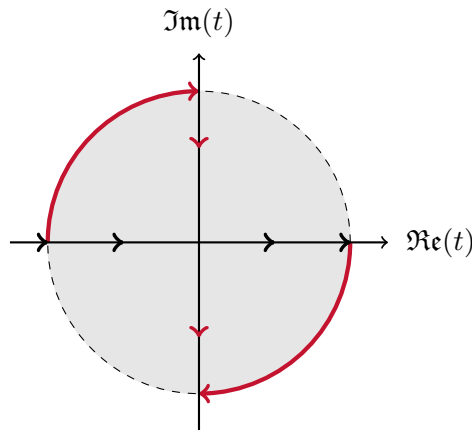


Abbildung 2: Visualisierung der Wick-Rotation

Die Wick-Rotation führt uns zu den sog. Euklidischen Pfadintegralen, deren Anwendungsgebiete gleich noch einmal etwas genauer vorgestellt werden.

6.2 Statistische Physik

In der Statistischen Physik sind wir vor allem an der Kenntnis der Zustandssummen Z interessiert, da sich aus ihnen sämtliche interessanten Größen ableiten lassen.

Pfadintegrale liefern uns eine neue Möglichkeit, diese Zustandssummen zu bestimmen. Wir betrachten nur Pfade, welche bei derselben Konfiguration starten und auch wieder enden:

$$Z = \int \mathcal{D}q \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_{\text{eukl.}}[q] \right) \quad (38)$$

Dies entspricht genau der kanonischen Zustandssumme mit $\frac{1}{T} = \frac{k_B \tau}{\hbar}$.
Insgesamt gilt demnach:

$$Z = \int \mathbf{d}q U(q, \beta \hbar; q) = \sum_k \langle k | \int \mathbf{d}q e^{-\beta E_k} | q \rangle \langle q | k \rangle = \sum_k e^{-\beta E_k} \quad (39)$$

wobei wie üblich $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

6.3 Quantenfeldtheorie

Auch in der Quantenfeldtheorie wird man häufig mit Pfadintegralen konfrontiert. Man berechnet zum Beispiel **Erwartungswerte** von Funktionalen $F[\phi]$:

$$\langle F \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi F[\phi] e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}[\phi]}}{\int \mathcal{D}\phi' e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}[\phi']}} \quad (40)$$

Oder die **Korrelationsfunktionen**:

$$\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \dots \phi(x_n) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}[\phi]} \phi(x_1) \dots \phi(x_n)}{\int \mathcal{D}\phi' e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}[\phi']}} \quad (41)$$

In der Feldtheorie wird hierbei die Variation aller möglichen Feldkonfigurationen anstelle der Pfade betrachtet.

Diese abschließend vorgestellten Beispiele sollen nur einen kleinen Ausblick auf die zahlreichen Anwendungen für Pfadintegrale in der theoretischen Physik liefern.

Literaturverzeichnis

- [1] P. A. M. Dirac. „The Lagrangian in Quantum Mechanics“. In: *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* 3.1 (1933), S. 312–320.
- [2] R. P. Feynman. „Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics“. In: *Reviews of Modern Physics* 20.2 (1948), S. 367–387.
- [3] R. P. Feynman und A. R. Hibbs. *Quantum mechanics and path integrals*. New York [u.a.]: Dover, 2010, S. 371.
- [4] A. Hebecker. *Theoretische Physik II - Analytische Mechanik und Thermodynamik*. Universität Heidelberg, 2017, S. 122.
- [5] A. Hebecker. *Theoretische Physik IV - Quantenmechanik*. Universität Heidelberg, 2018, S. 111.
- [6] R. MacKenzie. *Path Integral Methods and Applications*. Université de Montréal, 2000, S. 55.
- [7] Yen Chin Ong. *Note: Where is the Commutation Relation Hiding in the Path Integral Formulation?* Leung Center for Cosmology und Particle Astrophysics, National Taiwan University, Taipei, Taiwan 10617, S. 6.
- [8] T. Weigand. *Quantum Field Theory I + II*. Heidelberg University, 2013/2014, S. 271.