VIII Funktionale Methoden – Pfadintegralquantisierung

VIII.1 Pfadintegrale in der Quantenmechanik

Schrödinger-Bild:

zeitabh. Zustände $|\psi(t)\rangle_s$ mit

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_s = H|\psi(t)\rangle_s$$

formale Lösung:

$$|\psi(t)\rangle_s = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle_s$$

mit dem Zeitentwicklungsoperator

$$U(t,t_0) = e^{-iH(t-t_0)}$$

(Bei expliziter Zeitabh. von H auf Grund eines zeitabh. Potenzials:

$$U(t,t_0) = T\exp\left(-i\int_{t_0}^{t}dt'\,H(t')\right),$$

vgl. QFT I, V-9.
Diesen Fall brauchen wir hier aber nicht zu betrachten.)

$$\Rightarrow\quad U^\dagger(t,t_0) = U(t_0,t) = U^{-1}(t,t_0) \qquad \text{(unitär)}$$

$$U(t_f,t_0)\,U(t_0,t_i) = U(t_f,t_i)$$

Ortsraum - Wellenfunktion:

$\psi(t,\vec{x}) \equiv \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle_S$

$|\vec{x}\rangle$: Eigenzustand des Ortsoperators $\hat{\vec{x}}$:

$$\hat{\vec{x}} |\vec{x}\rangle = \vec{x} |\vec{x}\rangle$$

Heisenberg - Bild:

zeitunabh. Zustände $\quad |\psi\rangle_H \equiv |\psi(t_0)\rangle_S$

zeitabh. Operatoren $\quad \hat{O}_H(t) = U^\dagger(t,t_0)\, \hat{O}_S\, U(t,t_0)$

$\hookrightarrow$ Def.: $\quad |t,\vec{x}\rangle := U^\dagger(t,t_0) |\vec{x}\rangle$

$$\Rightarrow \hat{\vec{x}}_H(t) |t,\vec{x}\rangle = U^\dagger(t,t_0)\, \hat{\vec{x}}\, \underbrace{U(t,t_0)\, U^\dagger(t,t_0)}_{=\mathbb{1}} |\vec{x}\rangle = \vec{x}\, |t,\vec{x}\rangle$$

(Achtung:
$|t,\vec{x}\rangle$ ist ein Heisenberg-Zustand, d.h. zeit<u>un</u>abhängig.
Das Argument „t" zeigt lediglich an, dass $|t,\vec{x}\rangle$ ein Eigenzustand des (zeitabhängigen) Ortsoperators $\hat{\vec{x}}_H(t)$ zur Zeit t ist.)

Es gilt dann

$$\langle t,\vec{x} | \psi \rangle_H = \langle \vec{x} | U(t,t_0) | \psi(t_0) \rangle_S = \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle_S$$
$$= \psi(t,\vec{x})$$

Vollständigkeit:

$$\int d^3x \, |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| = \mathbb{1}$$

$$\Rightarrow \int d^3x \, |t,\vec{x}\rangle\langle t,\vec{x}| = \int d^3x \, U^\dagger(t,t_0)\, |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\, U(t,t_0) = \mathbb{1}$$

Es folgt dann für die Wellenfunktion

$$\psi(t,\vec{x}) = \langle t,\vec{x}|\psi\rangle_H = \int d^3x_i \, \langle t,\vec{x}|t_i,\vec{x}_i\rangle\langle t_i,\vec{x}_i|\psi\rangle_H$$

$$= \int d^3x_i \; K(t,\vec{x}\,;t_i,x_i)\, \psi(t_i,\vec{x}_i)$$

(für beliebiges t_i)

physikalische Interpretation:

Wenn man die Wellenfunktion $\psi(t_i,\vec{x}_i)$ zur Zeit t_i an allen Orten $\vec{x}_i$ vorgibt, lässt sich daraus $\psi(t,\vec{x})$ zu allen Zeiten und Orten konstruieren. Dabei propagiert $K(t,\vec{x}\,;t_i,\vec{x}_i)$ die Lösung von $(t_i,\vec{x}_i)$ nach $(t,\vec{x})$

$$\Rightarrow \quad K(t,\vec{x}\,;t_i,x_i) \equiv \langle t,\vec{x}|t_i,\vec{x}_i\rangle = \langle\vec{x}|e^{-iH(t-t_i)}|\vec{x}_i\rangle$$

= (voller) Propagator der Theorie

Für den Propagator gilt

$$K(t_f,\vec{x}_f\,;t_i,x_i) = \langle t_f,\vec{x}_f|t_i,\vec{x}_i\rangle$$

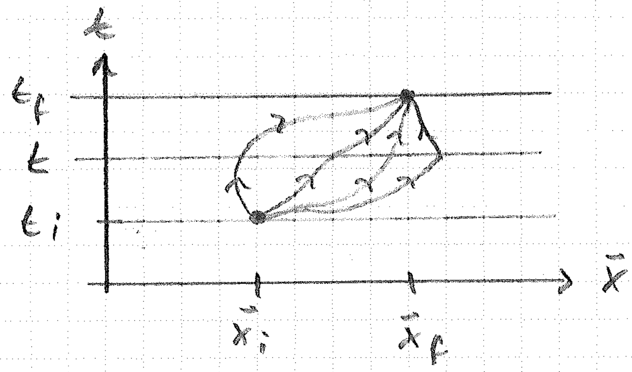
$$= \int d^3x \, \langle t_f,\vec{x}_f|t,\vec{x}\rangle\langle t,\vec{x}|t_i,\vec{x}_i\rangle$$

$$= \int d^3x \; K(t_f,x_f\,;t,\vec{x})\, K(t,\vec{x}\,;t_i,\vec{x}_i)$$

d.h. Propagation $(t_i, \vec{x}_i) \rightarrow (t_f, \vec{x}_f)$

$= \int d^3x$ Propagation $(t_i, \vec{x}_i) \rightarrow (t, \vec{x}) \rightarrow (t_f, \vec{x}_f)$

schematisch:



(hilft z.B. bei der Interpretation des Doppelspalt-Experiments)

Im Pfadintegral-Formalismus zerlegt man nun die Propagation in unendlich viele infinitesimal kleine Zeitschritte:

$$\langle t_f, \vec{x}_f | t_i, \vec{x}_i \rangle$$

$$= \lim_{N \to \infty} \int d^3x_1 \ldots d^3x_{N-1} \langle t_f, \vec{x}_f | t_{N-1}, \vec{x}_{N-1} \rangle \langle t_{N-1}, \vec{x}_{N-1} | t_{N-2}, \vec{x}_{N-2} \rangle \ldots \langle t_1, \vec{x}_1 | t_i, \vec{x}_i \rangle$$

mit $t_{k+1} = t_k + \delta t$, $t_0 \equiv t_i$, $\delta t = \frac{t_f - t_i}{N}$

Für die einzelnen Matrixelemente gilt:

$$\langle t_k, \vec{x}_k | t_{k-1}, \vec{x}_{k-1} \rangle = \langle \vec{x}_k | e^{-iH\delta t} | \vec{x}_{k-1} \rangle$$

$$= \langle \vec{x}_k | 1 - iH\delta t | \vec{x}_{k-1} \rangle + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

Der Hamilton-Operator ist allgemein eine Funktion des Ortsoperators $\hat{x}$ und des Impulsoperators $\hat{p}$

$$H = H(\hat{x}, \hat{p})$$

Beispiel: $H(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) = T(\hat{p}) + V(\hat{x})$

Die Orts-Eigenzustände sind orthogonal:

$$\langle \vec{x}' | \vec{x} \rangle = \delta^3(\vec{x}' - \vec{x})$$

Wir benötigen auch die Impuls-Eigenzustände

$$\hat{p} | \vec{p} \rangle = \vec{p} | \vec{p} \rangle$$

mit $\langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = (2\pi)^3 \delta^3(\vec{p}' - \vec{p})$

$$\mathbb{1} = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} |$$

und $\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = e^{i \vec{p} \cdot \vec{x}}$

Für den obigen Hamilton-Operator gilt dann

$$\langle \vec{x}_n | T(\hat{p}) + V(\hat{x}) | \vec{x}_{n-1} \rangle$$

$$= \langle \vec{x}_n | T(\hat{p}) | \vec{x}_{n-1} \rangle + V\left(\frac{\vec{x}_n + \vec{x}_{n-1}}{2} \right) \delta^3(\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1})$$

$$= \int \frac{d^3p_n}{(2\pi)^3} \langle \vec{x}_n | \vec{p}_n \rangle \langle \vec{p}_n | T(\hat{p}) | \vec{x}_{n-1} \rangle + V\left(\frac{\vec{x}_n + \vec{x}_{n-1}}{2} \right) \delta^3(\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1})$$

$$= \int \frac{d^3p_n}{(2\pi)^3} e^{i \vec{p}_n \cdot (\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1})} \underbrace{\left[T(p_n) + V\left(\frac{\vec{x}_n + \vec{x}_{n-1}}{2} \right) \right]}_{= H\left(\frac{\vec{x}_n + \vec{x}_{n-1}}{2}, \vec{p}_n \right)}$$

Beachte: H hängt hier nicht mehr von Operatoren ab, sondern von den Erwartungswerten, ist also die klassische Hamilton-Funktion.

Im Allgemeinen stimmt das Ergebnis nicht mehr, wenn der Hamilton-Operator Terme mit Produkten von $\hat{x}$ und $\hat{p}$ enthält, da es dort auf die Reihenfolge der Operatoren ankommt, während dies in der klassischen Hamilton-Funktion nicht der Fall ist. Man kann den Hamilton-Operator jedoch – auf Kosten zusätzlicher Terme – immer auf eine symmetrische Form („Weyl-Ordnung") bringen, für die die Ersetzung dann funktioniert.

(einfaches Beispiel in einer Dimension:

$$\hat{x}\hat{p} = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}) + \frac{1}{2}[\hat{x},\hat{p}] = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}) + \frac{i}{2} \;)$$

Wir nehmen daher von jetzt ab an, dass H in Weyl-geordnet ist.

Wir haben dann

$$\langle \vec{x}_n | e^{-iH\delta t} | \vec{x}_{n-1} \rangle$$

$$= \int \frac{d^3p_n}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}_n\cdot(\vec{x}_n-\vec{x}_{n-1})} \left[1 - iH\left(\frac{\vec{x}_n+\vec{x}_{n-1}}{2}, \vec{p}_n\right)\delta t\right] + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$= \int \frac{d^3p_n}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}_n\cdot(\vec{x}_n-\vec{x}_{n-1})} e^{-i\delta t H\left(\frac{\vec{x}_n+\vec{x}_{n-1}}{2}, \vec{p}_n\right)} + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$= \int \frac{d^3p_n}{(2\pi)^3} \exp\left\{ i\delta t \left[\vec{p}_n\cdot\frac{\vec{x}_n-\vec{x}_{n-1}}{\delta t} - H\left(\frac{\vec{x}_n+\vec{x}_{n-1}}{2}, \vec{p}_n\right)\right]\right\} + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} &\langle t_f, \vec{x}_f \,|\, t_i, \vec{x}_i \rangle \\ &= \lim_{N\to\infty} \int \frac{d^3p_1}{(2\pi)^3} \cdots \frac{d^3p_N}{(2\pi)^3} \int d^3x_1 \ldots d^3x_{N-1} \\ &\qquad \times \exp\left\{ i\delta t \sum_{k=1}^{N} \left[\vec{p}_k \cdot \frac{\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}}{\delta t} - H\left(\frac{\vec{x}_k + \vec{x}_{k-1}}{2}, \vec{p}_k \right) \right] \right\} \\ &\equiv \int \mathcal{D}\vec{p}\, \mathcal{D}\vec{x} \, \exp\left\{ i \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\vec{p}\cdot\dot{\vec{x}} - H(\vec{x},\vec{p}) \right] \right\} \end{aligned}}$$

Den Ausdruck in der letzten Zeile bezeichnet man als <u>Pfadintegral</u>, welches durch den vorangehenden Grenzwert definiert ist. Insbesondere:

$$\mathcal{D}\vec{x} \equiv \lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N-1} d^3x_k \,, \quad \mathcal{D}\vec{p} \equiv \lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N} \frac{d^3p_k}{(2\pi)^3}$$

Das Integral $\int_{t_i}^{t_f} dt$ geht als Grenzwert aus der ursprünglichen Summe über die diskreten Zeiten t_k hervor. Da zu allen Zeiten $t_1 \ldots t_{N-1}$ über alle Werte der Ortskoordinate $\vec{x}_k$ integriert wird, kann im Grenzfall auch die Variable $\vec{x}(t)$ alle möglichen Werte annehmen. Ausnahmen sind nur die Anfangs- und Endpunkte $\vec{x}(t_i) = \vec{x}_i$ und $\vec{x}(t_f) = \vec{x}_f$. Ebenso kann $\vec{p}(t)$ zu allen Zeiten alle Werte annehmen. Hier gibt es keinerlei Einschränkungen an den Anfangs- und Endpunkten.

Sei nun $H(\vec{x},\vec{p}) = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{x})$

Das k-te Impulsintegral ist dann

$$\int \frac{d^3p_k}{(2\pi)^3} \exp\left\{ i\delta t \left[\vec{p}_k \cdot \frac{\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}}{\delta t} - \frac{\vec{p}_k^{\,2}}{2m} - V\left(\frac{\vec{x}_k + \vec{x}_{k-1}}{2}\right) \right] \right.$$

$$= \exp(-i\delta t\, V(\ldots)) \int \frac{d^3p_k}{(2\pi)^3} \exp\left\{ -i\frac{\delta t}{2m}\vec{p}_k^{\,2} - i(\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})\cdot\vec{p}_k \right\}$$

Gauß'sche Integralformel:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{-ax^2+bx} = \frac{1}{\sqrt{4\pi a}} e^{b^2/4a},$$

gilt (sofern das Integral konvergiert, s.u.) auch für komplexe a und b

$$\hookrightarrow \exp(-i\delta t\, V(\ldots)) \left(\frac{m}{2\pi i\delta t}\right)^{3/2} \exp\left(-m\frac{(\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})^2}{2i\delta t}\right)$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi i\delta t}\right)^{3/2} \exp\left\{ i\delta t \left[\frac{m}{2}\frac{(\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})^2}{\delta t^2} - V\left(\frac{\vec{x}_k + \vec{x}_{k-1}}{2}\right) \right] \right.$$

$$\Rightarrow \langle t_f, \vec{x}_f | t_i, \vec{x}_i \rangle$$

$$= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\delta t}\right)^{\frac{3N}{2}} \int \prod_{k=1}^{N-1} d^3x_k \exp\left\{ i\delta t \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}}{\delta t}\right)^2 - V\left(\frac{\vec{x}_k + \vec{x}_{k-1}}{2}\right) \right] \right\}$$

$$= \mathcal{N} \int \mathcal{D}\vec{x} \exp\left\{ i\int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{m}{2}\dot{\vec{x}}^{\,2} - V(\vec{x}) \right] \right\}$$

$$= \mathcal{N} \int \mathcal{D}\vec{x} \exp\left\{ i\int_{t_i}^{t_f} dt\, L(\vec{x},\dot{\vec{x}}) \right\}$$ L: Lagrange-Fkt.

$$= \mathcal{N} \int \mathcal{D}\vec{x} \exp\{ i S[\vec{x}(t)] \}$$ S: Wirkung