

Wenn aus einer Summe plötzlich Physik wird...

## *P*fadintegrale!



**Feynman**

G. PFANNER

*powered by de.sci.physik*



*"I think that I can safely say that nobody understands  
quantum mechanics."*

RICHARD P. FEYNMAN

—The character of physical law—  
(*The MIT Press, 1965*)



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>6</b>
1.1	Wozu Pfadintegrale? . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1	Der Zusammenhang zwischen klass. und Quanten-Mechanik . . . . .	7
2.1.1	Die Hamilton-Jacobi Gleichung . . . . .	7
2.1.2	Die Wirkung in der klassischen Mechanik . . . . .	8
2.2	Der Pfadintegralformalismus . . . . .	10
2.2.1	Das Doppelspaltexperiment und seine Verallgemeinerung . . . . .	10
2.2.2	Ein Streuexperiment . . . . .	13
2.2.3	Die allgemeine Definition . . . . .	15
2.2.4	Die Greensche Funktion in der Quantenmechanik . . . . .	18
2.2.5	Zur Pfadintegraldarstellung der Greenschen Funktion . . . . .	19
2.2.6	Anmerkungen zum Pfadintegral . . . . .	21
2.2.7	Die Ableitung der Schrödingergleichung aus der Pfadintegraldarstellung der Greenschen Funktion . . . . .	21
2.3	Beispiele . . . . .	26
2.3.1	Die klassische Wirkung für den harmonischen Oszillator bzw. das freie Teilchen . . . . .	26
2.3.2	Das freie Teilchen im Pfadintegralformalismus . . . . .	27
2.3.3	Der harmonische Oszillator . . . . .	29
2.3.4	Der Aharonov-Bohm-Effekt . . . . .	33
<b>3</b>	<b>Literatur</b>	<b>36</b>
3.1	Wie's weitergehen könnte . . . . .	36
3.2	Mail to Author . . . . .	37

# 1 Einleitung

## 1.1 Wozu Pfadintegrale?

Wie die meisten Gebiete der Physik besitzt auch die Quantenmechanik ein umfangreiches Spektrum an Zugängen. Es gibt die Matrizenmechanik. Es gibt die Wellenmechanik. Physikerherz, was willst du mehr!

Es gibt aber noch mehr. Der dritte Weg zur Beschreibung der QM wird durch die Pfadintegralmethode beschrritten. "Schritt" hat hierbei eine sehr wörtliche Bedeutung. Bei den Pfadintegralen geht es um Pfade. Bevor wir jedoch den Pfad der Pfade betreten, wollen wir uns kurz überlegen, wozu wir eigentlich eine weitere Darstellung gebrauchen könnten? Warum sollen zwei nicht ausreichen? Noch dazu, wo man deren Zusammenhang<sup>1</sup> kennt.

Die Antwort ist: Nein! Nach einer weiteren Beschreibungsmöglichkeit zu suchen, *macht Sinn*. Auch wenn es sich dabei um die 100. handeln sollte. Schließlich könnte es genau SIE sein, die alle anderen widerlegt. Ein Komma, ein Minuszeichen unterschiedlich zu allen anderen (aber in Übereinstimmung mit dem Experiment) und aus! Dass kann auch so verstanden werden, als dass ein Zugang neue Versuche "produzieren" kann bzw. dessen Durchführung rechtfertigt.

Das umreißt die heutige Philosophie der Wissenschaftler, die man auch als *kritischen Rationalismus* bezeichnet. Sie sehen schon, als Wissenschaftler lebt man ganz schön gefährlich. Denn ein kleines Detail, ein kleines neuerworbenes "piece of information" kann Lebenswerke zerstören! Die Standardbeispiele in der Physik sind die Quantenmechanik und die Relativitätstheorie. Es ist dabei erstaunlich wie aus so "wenig" wie "die Maxwellgleichungen gelten unabhängig vom Bezugssystem" oder "physikalische Größen sind im mikroskopischen Bereich gequantelt" so viel *Neues entsteht* bzw. wie viel *Altes geändert* werden muss. Das ist durchaus bemerkenswert.

Abseits der kurz skizzierten Möglichkeit der Falsifikation gibt es noch weitere Vorteile, die ein alternativer Zugang haben kann. Im konkreten Beispiel der Pfadintegrale sind dies

- Die verwendeten zeitgitterten Integrale sind von Natur aus diskret und eignen sich daher besonders gut für eine numerische Auswertung.
- Eine Integralformulierung der Quantenmechanik ermöglicht ein tieferes Verständnis durch eine globale Beschreibungsweise. Insbesondere ist die Quantisierung von Theorien (im Sinne von *Eichtheorien*, also z.B. Elektrodynamik) im Operatorformalismus nicht so einfach zu bewerkstelligen. Wieso? Nun, Operatoren betonen zwar die Unitarität der Zeitentwicklung, sie orientieren sich aber an den Poissonklammern der *Hamiltonschen Mechanik*. Die sind im relativistischen Falle unbequem, da man die Zeitvariable anders behandeln muss als die Ortsvariable. Der kanonische Formalismus versteckt die relativistische Invarianz und führt zu nicht

<sup>1</sup> Schrödinger's Differentialgleichung und Heisenberg's Matrixgleichung sind ja verschiedene, aber äquivalente Darstellungen desselben Eigenwertproblems

kovarianten Regeln bei den Zwischenschritten.

- Integrale lassen sich besser approximieren, abschätzen und umformen. Im Vergleich zu Operatoren.

## 2 Grundlagen

### 2.1 Der Zusammenhang zwischen klass. und Quanten-Mechanik

#### 2.1.1 Die Hamilton-Jacobi Gleichung

In seiner Nobelpreisrede "Fundamental Idea of wave mechanics", welche man über das Nobel *e*-Museum<sup>2</sup> beziehen kann, betont SCHRÖDINGER den Zusammenhang zwischen Hamiltonscher Mechanik und geometrischer Optik. Der springende Punkt ist dabei, dass man aus der *Hamilton-Jacobi-Gleichung* eine Gleichung für die so genannten *Wirkungswellen* ableiten kann. In der geometrischen Optik stößt man auf eine Gleichung, selbiger Struktur, die *Eikonalgleichung*. Wenn man dieser Analogie eine physikalische Bedeutung zukommen lässt, so steht man bereits an der Schwelle zur Quantenmechanik bzw. konkreter zum *Teilchen-Welle Dualismus*. Die Hamilton-Jacobi-Gleichung gilt ja eben auch für das Teilchen, genauso wie die Eikonalgleichung Bezug auf den Wellencharakter nimmt. Durch eine einfache Überlegung kommt man dann zur berühmten *Schrödingergleichung*. Eine genauere Illustrierung dieser Zusammenhänge findet man z.B in *Quantenmechanik (SOFF)*<sup>3</sup>.

In diesem Rahmen wollen wir uns mit einer etwas "trickreichen" Argumentation begnügen. Die *Hamilton-Funktion* repräsentiere ein Teilchen in einem konservativen Kraftfeld. Das Teilchen soll nur einen Freiheitsgrad haben. Damit ist die Funktion von der Form

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q) = E, \quad (1)$$

sodass die Hamilton-Jacobi-Gleichung zu

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S_0}{\partial q} \right)^2 + V(q) = E$$

wird.

( $S_0$ ...verkürzte *Wirkungsfunktion*, abhängig von  $\vec{q}$  und  $\vec{P}$ )

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung hingegen wird als

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} + V(q)\psi = E\psi$$

<sup>2</sup> <http://www.nobel.se/>

<sup>3</sup> <http://www.physik.tu-dresden.de/studdocs.htm>

angeschrieben. Setzt man in diese Gleichung die Wellenfunktion  $\psi = e^{iS_0/\hbar}$  ein, so folgt

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S_0}{\partial q} \right)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S_0}{\partial^2 q} + V(q) = E.$$

Bildet man nun dem Limes  $\hbar \rightarrow 0$ , so erhält man die eindimensionale Hamilton-Jacobi-Gleichung. Die Verwandtschaft zwischen beiden Konzepten ist also unmittelbar einsichtig. Wie kommt man aber eigentlich zur Hamilton-Jacobi-Gleichung? Diese entsteht durch eine *kanonische Transformation* der Variablen, sodass die neuen verallgemeinerten Koordinaten und Impulse konstant werden; in einem gewissen Sinne erreicht man somit die "maximalste" Vereinfachung. Hat man es jetzt mit einem holonom-skleronomen System zu tun, so gilt für die Erzeugende der Transformation

$$F_2(\vec{q}, \vec{P}, t) = S_0(\vec{q}, \vec{P}) - Et$$

sowie für die totale Zeitableitung

$$\frac{dF_2(\vec{q}, \vec{P}, t)}{dt} = \sum_k p_k \dot{q}_k - H = \mathcal{L}$$

woraus unmittelbar

$$F_2 = \int \mathcal{L} dt$$

folgt.  $F_2$  entspricht also genau der vom *Hamilton-Prinzip* her bekannten *Wirkungsfunktion*,  $\mathcal{L}$  der *Lagrange-Funktion*.

### 2.1.2 Die Wirkung in der klassischen Mechanik

Für den Pfadintegral-Formalismus lohnt es sich letzteren Zusammenhang etwas eingehender zu studieren. In der klassischen Mechanik ist die *Wirkung* eben definiert durch

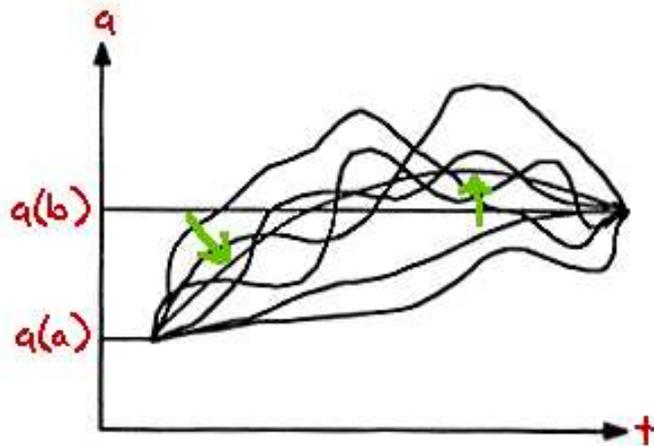
$$S = \int_{t_b}^{t_a} \mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t), t) dt. \quad (2)$$

Diese Größe ist abstrakt, ihr kommt keine "unmittelbare" physikalische Bedeutung zu. Trotzdem kann man aus ihr die Bewegung, z.B. eines Teilchens, bestimmen. Dazu benötigt man das bereits erwähnte Wirkungsprinzip. Es besagt, dass die Bewegung so abläuft, als dass die Bahnkurve die Wirkung *stationär* macht. Formal drückt sich das durch

$$\delta S[q] = S[q + \delta q] - S[q] = 0 \quad (3)$$

aus, wobei die Endpunkte für alle infinitesimalen Variationen  $\delta q(t) = 0$  festgehalten werden, d.h.

$$\delta q(t_a) = 0 \text{ mit } q(t_a) = q_a$$

Abbildung 1: Mögliche Pfade zwischen  $q_a$  und  $q_b$  (nach *Mechanik* (MITTER))

$$\delta q(t_b) = 0 \text{ mit } q(t_b) = q_b$$

Die Bedeutung dieser Forderung skizzieren wir jetzt anhand von Abbildung 1. Man denke sich viele verschiedene Wege, die nur an die Auflage gebunden sind, dass sie durch  $q_a$  und  $q_b$  gehen müssen. Für jeden dieser Wege kann man nun den Zahlenwert  $S$  berechnen. Die wirkliche Bahn entspricht dann genau jenem Wege, dessen Wert für  $S$  am *kleinsten* ist. Ist dies seltsam oder gar paradox? Weiß das Teilchen welchen Weg es nehmen soll? Die Antwort ist: Nein. Zumindest im Rahmen der klassischen Mechanik. Setzt man nämlich die Definition der Wirkung in das Hamiltonsche Prinzip ein, so folgt nach partieller Integration

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

Das ist die sogenannte *Euler-Lagrange-Gleichung*, die den *Lagrange-Formalismus 2. Art* definiert. Die Lösung dieser Differentialgleichung bestimmt dabei den klassischen Pfad. Der Lagrange-Formalismus ist jedoch nichts anderes als ein Zugang zur Beschreibung physikalischer Bewegungsvorgänge. Völlig gleichwertig zu den Newtonschen Axiomen. Die Beziehung des Extremalprinzipes zur Euler-Lagrange-Gleichung (die ihrerseits ja wiederum mit den Newtonschen Kraftgesetz in Verwandtschaft steht) ist somit nur Ausdruck der inneren Konsistenz des gewählten Beschreibungsrahmen. In anderen Worten: die Extremalität ist nichts, was das Teilchen bei seiner Bewegung zu "erfüllen" hat, sondern es ist genau das, was die Natur dem Teilchen auferlegt. Aus welchen Gründen auch immer.

Der Kreis zur Hamilton-Jacobi Gleichung schließt sich durch den sogenannten *Hamilton-Formalismus*. Zu Gleichung (1) bzw. den verallgemeinerten Koordinaten gelangt man nämlich, wenn man auf die Lagrange-Funktion eine *Legendre-Transformation* ausführt. Das ist im wesentlichen ein mathematischer Trick um aus der Euler-Lagrange-Gleichung, die ja eine Differentialgleichung 2. Ordnung darstellt, zwei Differentialgleichungen 1.

Wahrscheinlichkeit	Spalt 1 offen	Spalt 2 offen	beide Spalte offen
P	$ \phi_1 ^2$	$ \phi_2 ^2$	$ \phi_1 + \phi_2 ^2$

Tabelle 1: Mögliche Resultate ( $\phi_i$ ...Wahrscheinlichkeitsamplitude)

Ordnung zu machen, und zwar

$$\dot{q}(t) = \frac{\partial H}{\partial p} \text{ und } \dot{p}(t) = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

Wie schaut es mit der Definition der Wirkung aus? Da die Hamilton-Funktion durch  $H(p, q) = p\dot{q} - \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$  mit  $p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}$  festgelegt ist, erhält man durch Einsetzen in (2)

$$S[q(t), p(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \{p(t)\dot{q}(t) - H(p(t), q(t), t)\} dt. \quad (4)$$

Die generalisierten Koordinaten und Impulse sind dabei unabhängig voneinander zu variieren.

Was haben wir jetzt eigentlich herausgefunden? Nun, wir haben versucht, uns eine Vorstellung vom Zusammenhang zwischen Quantenmechanik und klassischer Mechanik zu machen. Zudem haben wir uns die wesentliche Struktur der Mechanik ein wenig vor Augen geführt. Dieser Punkt ist nicht ganz uninteressant. Schließlich haben wir in der Einleitung nach dem Sinn "alternativer" Beschreibungsformalismen gefragt. Man kann nun z.B. ein freies Teilchen im Lagrange-Formalismus, im Hamilton-Formalismus, etc. betrachten. Zwar wird das Ergebnis in jeder Darstellung dasselbe sein, hoffentlich, die Zugänge stehen jedoch in einem gewissen *Zusammenhang* zueinander. Genau das haben wir gesehen. Die *gleiche* physikalische Situation *unterschiedlich* zu beschreiben, führt zu einer *neuen* Erkenntnis! Jetzt aber wird es ernst. Wir begeben uns ins Reich der Pfadintegrale...

## 2.2 Der Pfadintegralformalismus

### 2.2.1 Das Doppelspaltexperiment und seine Verallgemeinerung

Das Doppelspaltexperiment. Grundlegend für das Verständnis der Quantenmechanik. Wir betrachten aber gleich das Ergebnis, welches in Tabelle 1 angegeben wird.

Die angegebenen Amplituden sind dabei natürlich proportional zum Schirmabstand, d.h.

$$\phi_1 \sim e^{ikl_1}.$$

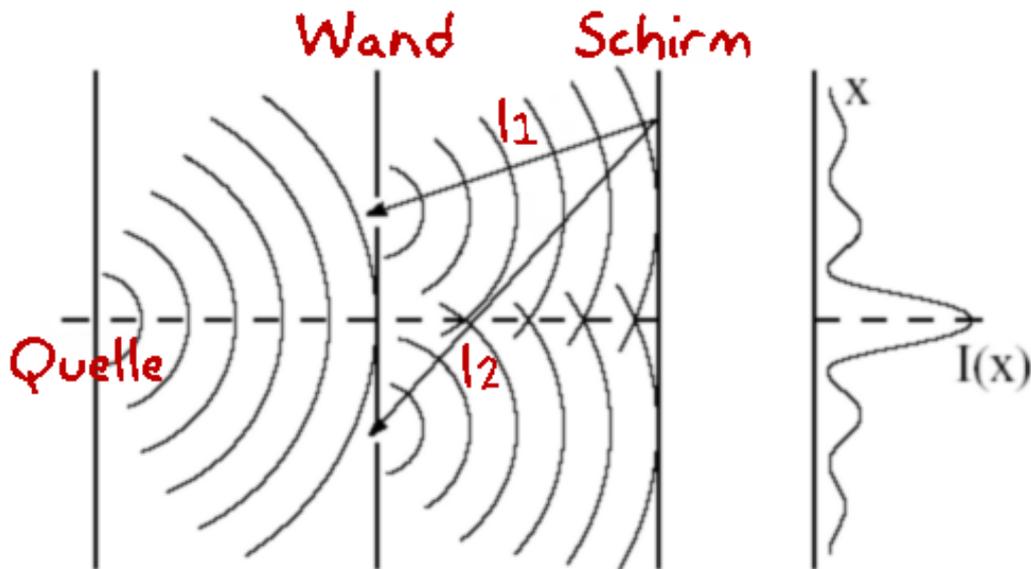


Abbildung 2: Skizze zum Doppelspaltexperiment (aus *Quantenfeldtheorie* (SOFF))

$\phi_2$  ergibt sich analog mit  $l_2$ . Augenfällig ist an dem Ergebnis, dass die Wahrscheinlichkeit *nicht* zu  $P = P_1 + P_2$  wird, wenn beide Spalte offen sind. Warum das so ist? Nun, fragen Sie die Natur!

Die Gesamtamplitude ergibt sich also, indem man den Wegen durch die Öffnungen  $i$  die Amplitude  $e^{ikl_i}$  zuordnet und dann über die beiden Möglichkeiten *aufsummiert*. Die Wahrscheinlichkeit ergibt sich dann durch Bildung des Betragsquadrates. Das kann man jetzt verallgemeinern. Statt zwei Spalte nimmt man 100 oder 200, statt 1 Meter Abstand zwischen Wand und Schirm nimmt man nur 1 cm oder noch viel weniger. Für das, was jetzt aus der Quelle herauskommt, z.B. ein Elektron, bedeutet dies, dass es dadurch mehr und mehr Möglichkeiten hat, den Schirm zu erreichen. Die *Gesamtwahrscheinlichkeit* wird somit zur *Summation* über all diese Wege, im Sinne von

$$P = \left| \sum_i \phi_i \right|^2 = |\phi|^2$$

wobei

$$\phi = \sum_{\text{alle Pfade } q} \phi_{[q]}^{\text{Einzel}}$$

Somit fragt sich nur mehr wie man die Einzelamplituden festlegen soll. Die Proportionalität zum Aufpunkt am Schirm ist etwas unpraktisch. Aber es geht ja schließlich auch wesentlich "sauberer". Wie? Nun ganz einfach! Man erinnert sich an die "klassische"

Herangehensweise und landet somit wieder beim Wirkungsfunktional (siehe Gleichung 2). Wir rufen uns also ins Gedächtnis, dass wir einen Zusammenhang zwischen der Hamilton-Jacobi Gleichung und der Schrödingergleichung gefunden haben, und zwar für  $\psi = e^{iS_0/\hbar}$ . Es ergibt sich daher für die Amplituden des einzelnen Weges

$$\phi_{[q]}^{Einzel} = \text{const} e^{iS[q]/\hbar}$$

bzw. insgesamt

$$K(b, a) = \phi = \text{const} \sum_{\text{alle Pfade } q} e^{iS[q]/\hbar}. \quad (5)$$

Die Wirkung stellt somit (zusammen mit dem Faktor  $\hbar$ ) einen *Phasenwinkel* dar. Ihre Dimension ist Energie mal Zeit, die Plancksche Konstante hat dieselbe Dimension. Diese Zahl  $6.6263 \cdot 10^{-34}/(2\pi)$  J\*s prägt jetzt die Lösung in einem größeren Maße als man denken möge. Die Frage, die sich nämlich stellt, ist: "Tragen *alle* Wege in *gleichem* Maße zu der Gesamtamplitude bei?"

Die Antwort ist erstaunlich: Nein! Der Winkel  $S/\hbar$  kann nämlich so interpretiert werden, als dass  $S$  in Einheiten von  $\hbar$  gemessen wird. Die klassische Näherung entspricht dann dem Fall, dass  $S \gg \hbar$  ist. Okay, dass kann man sich ja halbwegs vorstellen. Wenn die Wirkung nun aber *groß* ist, so erhält man deswegen einen *sehr großen* Winkel. Wobei jede Verrückung um  $\delta x$ , also eine *kleine* Änderung auf der *klassischen* Skala, zu einer *großen* Verschiebung der Phase führt. In anderen Worten: *kleine* Änderungen des Pfades führen zu *großen* Veränderungen der Phase.

Die Exponentialfunktion kann aber bekanntlich in Ausdrücke von Cosinus und Sinus geschrieben werden<sup>4</sup>. Daraus erkennt man, dass die großen Unterschiede im Winkel (für die infinitesimalen Abweichungen) zu einer starken Oszillation des Vorzeichens führen. Die Konsequenz: Die *Gesamtbeiträge* heben sich in diesem Bereich auf, man erhält *destruktive* Interferenz.

Im Bereich wo die Wirkung *stationär* ist, sind alle Beiträge der Pfade *in Phase*. Sie löschen sich somit *nicht* aus, es kommt zur *konstruktiven* Interferenz. Das ist eine direkte Folgerung aus dem Hamiltonschen Prinzip (siehe 3 auf Seite 8)! Im Gegensatz zum klassischen Fall muss man offenbar auch die *Umgebung* des (minimalsten<sup>5</sup>) Pfades mit einbeziehen. Nichtsdestoweniger können wir in unserer Theorie das klassische Verhalten wiedererkennen. Wenngleich nur als Näherung.

Im atomaren Bereich ist  $S$  vergleichbar mit  $\hbar$ . In diesem Fall muss man über *alle* Möglichkeiten aufsummieren, keine einzige ist von besonderer Bedeutung und Gleichung (5) muss keine gute Näherung mehr sein.

Wir haben jetzt eine halbwegs formale Darstellung des Doppelspaltexperiments. Das ist schön. Schließlich ist es ja grundlegend für das Verständnis der Quantenmechanik. Eine

<sup>4</sup>  $e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$

<sup>5</sup> wiederum hinsichtlich der Wirkung

Wahrscheinlichkeit	$\uparrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow$
$P$	$ \phi_{AB}(1, 2) - \phi_{AB}(2, 1) ^2 = 0$	$ \phi_{AB}(1, 2) ^2 +  \phi_{AB}(2, 1) ^2 = 2p$

Tabelle 2: *Das Ergebnis für Fermionen*

$P$ ...Wahr. das A zur Pos. 1 und B zur Pos. 2 gestreut wird.

$$A \text{ nach } 1, B \text{ nach } 2 \implies P = |\phi_{AB}(1, 2)|^2$$

$$A \text{ nach } 2, B \text{ nach } 1 \implies P = |\phi_{AB}(2, 1)|^2$$

Wahrscheinlichkeit	$\uparrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow$
$P$	$ \phi_{AB}(1, 2) + \phi_{AB}(2, 1) ^2 = 4p$	$ \phi_{AB}(1, 2) ^2 +  \phi_{AB}(2, 1) ^2 = 2p$

Tabelle 3: *Das Ergebnis für Bosonen*

Die Definition der Größen ist gleich dem Fall der Fermionen

Anmerkung sei gestattet. Man kann das Experiment nämlich noch *erweitern*. Mit Sinn. Dazu tut man einen isolierenden Behälter zwischen die beiden Spalte. In diesem fließe ein Magnetfeld, wobei der Vektor der magnetischen Feldstärke normal zur Ebene Quelle-Spalte-Schirm steht. Aufgrund der Isolierung existiert das  $\vec{B}$ -Feld im Aussenraum nicht. Klassisch betrachtet, ist es also egal, ob es das Feld gibt oder nicht. Auf dass, was aus der Quelle herauskommt, wirkt keine Kraft. Na schön. Leider bzw. gottseidank (wie auch immer) sagt das Experiment etwas *anderes*. Die Teilchen verspüren das Magnetfeld sehr wohl, sofern sie geladen sind. Man nennt dass den *Aharonov-Bohm-Effekt*, den wir uns später noch ein wenig genauer anschauen werden.

### 2.2.2 Ein Streuexperiment

Bevor wir uns weitere Gedanken zur Definition des Pfadintegrals machen, schauen wir uns kurz ein anderes Beispiel für die Eigenheiten der Quantenmechanik an. Ein Streuexperiment. Wie schon beim Doppelspaltexperiment geben wir nur das Ergebnis an. In der Hoffnung, dass SIE, sollten sie es nicht ganz verstehen, sich geeignete Bücher<sup>6</sup> zur Hand nehmen werden. Aber betrachten Sie zunächst einmal die Skizze (Abbildung 3) und das Ergebnis, welches für *Fermionen* in Tabelle 2 und für *Bosonen* in Tabelle 3 angegeben wird.

Wieso bloß, besteht ein Unterschied im Ergebnis zwischen den beiden Teilchenarten?

<sup>6</sup> z.B. *The Feynman lectures on Physics*, Vol. 3, FEYNMAN, A.O.

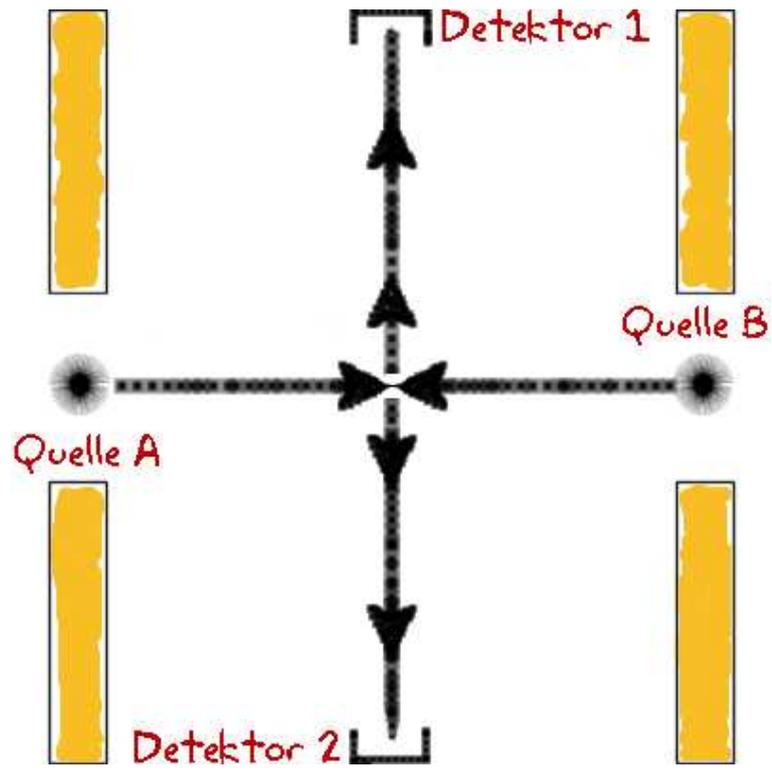


Abbildung 3: Skizze zum Streuexperiment  
( $\theta_{Streu} = \pi/2$ )

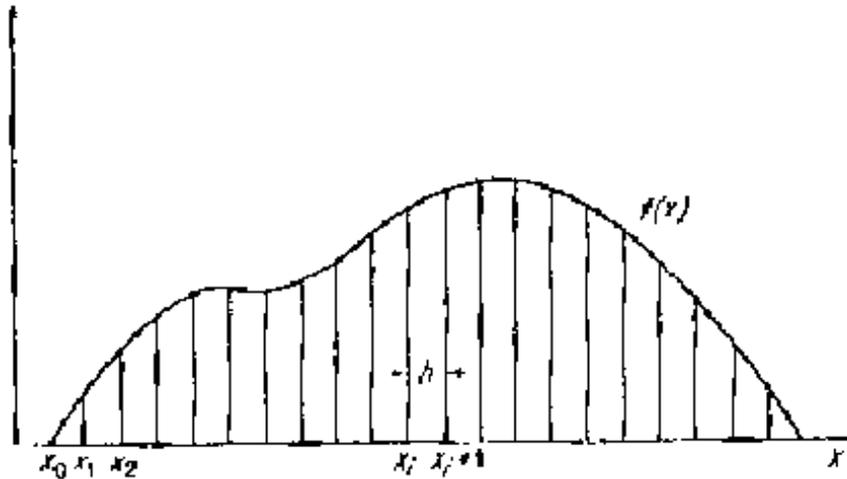


Abbildung 4: Zur Definition des Riemannsches Integrals.

Es wird eine Reihe von Ordinaten von der Abzisse zur Kurve gezeichnet. Im Abstand  $h$ . Dann wird das Integral (Fläche zwischen Kurve und Abzisse) durch  $h$ -mal die Summe der Ordinaten approximiert.

Eine analoge Definition kann für die Pfadintegrale verwendet werden. Das Maß, welches im Grenzübergang Null wird, ist das Zeitintervall  $\epsilon$  zwischen diskreten Punkten des Pfades.

(nach *Quantum mechanics und path integrals* (FEYNMAN, HIBBS), McGraw-Hill Book Company, 1965)

### 2.2.3 Die allgemeine Definition

Die Definition der Gesamtamplitude ( 5 auf Seite 12) ist noch ein wenig unbefriedigend. Das Problem ist unmittelbar einsichtig. Was geschieht nun wirklich, wenn  $S$  in der Größenordnung von  $\hbar$  ist? Oder anders formuliert, je feiner wir das Gitter machen, desto mehr Wege "entstehen". Setzt man diese Prozedur sehr, sehr oft fort, so werden sich einzelne Wege nur mehr um infinitesimale Stückchen unterscheiden. Aus der *Summe* wird dann ein *Integral*, über dessen Form wir uns jetzt ein paar Gedanken machen wollen. Was ist zu tun? Wir müssen die Analogie zur mathematischen Definition des Integrals herstellen. Zur *Riemannsches Definition*. Die Fläche  $A$  unter einer Kurve ist proportional zu der Summe der Ordinaten. Konkret betrachtet man nun eine Teilmenge der Ordinaten, und zwar diejenigen, die einen fixen Abstand  $h$  zueinander aufweisen. Formal schreibt man dies folgendermaßen

$$A \propto \sum_i f(x_i) \quad (6)$$

Salopp formuliert, folgt die genaue Definition der Fläche jetzt einfach aus einer Grenzwertbildung, d.h. der Abstand soll unendlich klein werden. Dazu müssen wir aber noch eine von  $h$  abhängige Normalisierungskonstante einführen. Im Falle des Riemann-Integrals

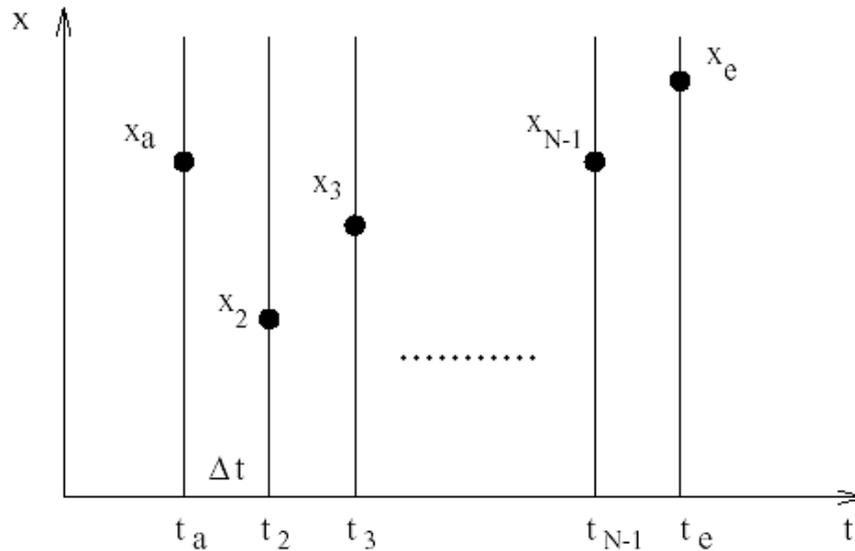


Abbildung 5: Die Unterteilung des Zeitintervalls zwischen  $t_a$  und  $t_b$  (aus *Quantenmechanik* (BESTEHORN))

ist dies  $h$  selber

$$A = \lim_{h \rightarrow 0} [h \sum_i f(x_i)]$$

Um jetzt daraus eine Definition für die Summe über Pfade zu basteln, unterteilt man die Zeitvariable  $t$  in kleine Stücke  $\epsilon$ . Damit erhalten wir  $t_i$  Werte zwischen der Zeit  $t_a$  und der Zeit  $t_b$ . Zudem ordnen wir jedem *Zeitpunkt*  $t_i$  einen *Raumpunkt*  $x_i$  zu (vgl. Abbildung 5). Diese verbinden wir und erhalten einen Polygonzug bzw. unseren Pfad. Die Summe über alle Pfade wird somit zu einem vielfachen Integral über alle Werte  $x_i$   $i = 1, 2, \dots$  mit

$$\begin{aligned} N\epsilon &= t_a - t_b \\ \epsilon &= t_{i+1} - t_i \\ t_0 &= t_a \\ t_N &= t_b \\ x_0 &= x_a \\ x_N &= x_b \end{aligned}$$

Das Ergebnis für die Gesamtamplitude lautet deswegen

$$K(b, a) \propto \int \int \dots \int \phi[x(t)] dx_1 dx_2 \dots dx_{n-1} \quad (7)$$

Wir integrieren nicht über  $x_0$  oder  $x_N$ , da diese Punkte den (fixen) Endpunkten  $x_a$ ,  $x_b$  entsprechen. Aufgrund der formalen Ähnlichkeit zwischen dieser Gleichung und Gleichung

chung (6), ist der nächste Schritt offensichtlich. Man muss einen geeigneten Normalisierungsfaktor einführen, welcher von  $\epsilon$  abhängt!

Für das Teilchen der Masse  $m$ , das sich im Potential  $V(x, t)$ <sup>7</sup> bewegt, ist diese Konstante gleich:

$$A = \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m}\right)^{1/2} \quad (8)$$

Der Faktor ergibt sich z.B. bei der Herleitung der Schrödingergleichung im Pfadintegralformalismus<sup>8</sup> Wenn wir jedoch eine Normierungskonstante finden können, so existiert auch der Grenzwert...

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = K(b, a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \int \dots \int e^{(i/\hbar)S[b,a]} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A} \quad (9)$$

$$\text{wobei } S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(\dot{x}, x, t) dt$$

Es gibt aber viele Wege eine Teilmenge aller Pfade zwischen  $A$  und  $B$  zu definieren. Die hier verwendete Möglichkeit muss nicht immer die Günstigste sein. Hängt die Lagrange-Funktion zum Beispiel von der Beschleunigung ab, so ist, für die hier benützte Konstruktion des Pfades, die Geschwindigkeit unstetig an den verschiedenen Punkten  $(x_i, t_i)$ . Die Beschleunigung ist dann dort unendlich.<sup>9</sup> Es ist deswegen besser eine allgemeine Notation zu verwenden...

$$K(b, a) = \int_a^b e^{(i/\hbar)S[b,a]} \mathcal{D}x(t) \quad (10)$$

Schaut doch ziemlich wie ein "normales" Integral aus, oder? Naja, zumindest die *Dimension* ist anders. Die Dimension des Differentials  $dx$  ist die Länge; die von  $\mathcal{D}x$  ist  $1/[\text{Länge}]$ .  $K[b, a]$  hat somit im  $d$ -dimensionalen Konfigurationsraums die Dimension  $1/[\text{Länge}]^n$ .

An beiden Definitionen ist jedoch noch etwas anderes augenscheinlich. Uns fehlt ein *Bezug* zur klassischen Physik, und dass obwohl ja durchaus "klassische" Größen vorkommen. Die Begründung ist denkbar einfach. Im klassischen Fall ergibt sich z.B. die Bewegungsgleichung ja auch nicht "direkt" aus der Wirkung. Vielmehr aus dem Extremalprinzip bzw. der daraus abgeleiteten Euler-Lagrange-Gleichung.

Wir haben im Moment somit nur etwas abstraktes, nämlich Pfade mit zugeordneten Amplituden.

<sup>7</sup> Zur Erinnerung:  $\mathcal{L} = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x, t)$

<sup>8</sup> Das kommt z.B. in 2.2.7 auf Seite 24.

<sup>9</sup> Bislang hat sich für diese Klasse von Problemen die Substitution  $\ddot{x} = \frac{1}{\epsilon^2}(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1})$  als zielführend erwiesen, aber wer weiß...

### 2.2.4 Die Greensche Funktion in der Quantenmechanik

Wir müssen uns nun ein klareres Bild verschaffen. Von der physikalischen Bedeutung von Gleichung (10).

Dazu betrachten wir ein nichtrelativistisches Teilchen in einem eindimensionalen Potential  $V(x)$ . Die Schrödingergleichung lautet dann

$$H\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}$$

oder

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H)\psi(x, t) = 0.$$

Die Schrödingergleichung ist eine *lineare* Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit. Kennen wir die Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  zu einer speziellen Zeit  $t$  und für alle  $x$ , so bestimmt dies eindeutig die Wellenfunktion für alle Zeiten  $t'$ . Zwischen  $\psi(x, t')$  und  $\psi(x, t)$  besteht ein linearer Zusammenhang, sodass...

$$\boxed{\psi(x', t') = \int K(x', t'; x, t)\psi(x, t)dx} \quad (11)$$

$K$  nennt man die zum Hamilton-Operator  $H$  korrespondierende *Greensche Funktion* bzw. *Propagator*. Mit Hilfe dieser Funktion und dem Anfangswert ist es uns möglich, die Wellenfunktion an allen Raumpunkten  $x'$  und zu allen Zeiten  $t'$  zu bestimmen. Natürlich gelangt man auf eine "ähnliche" Weise zu Lösungen z.B. in der Elektrodynamik. Es handelt sich ja nur um ein mathematisches Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen.

Um physikalisch *sinnvolle* Ergebnisse zu erhalten, unterwirft man die Greensche Funktion noch der Bedingung

$$K(x', t', x, t) = 0 \text{ für } t' < t$$

Die Forderung garantiert eine kausale Entwicklung der Funktion, die sogenannte *retardierte* Lösung.

Eine wichtige Relation für die Greensche Funktion ist die *Eigenfunktionsdarstellung*. Zur Ableitung betrachtet man zeitunabhängige Hamilton-Operatoren. Mit einem Ansatz für die Wellenfunktion und der Darstellung von Funktionen im Eigensystem des Operators folgt nach ein wenig Rechnerei

$$K(x', t'; x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x')\phi_n^*(x)e^{(-i/\hbar)E_n(t'-t)} \text{ für } t' > t. \quad (12)$$

Die  $\phi_n(x_i)$  stellen hierbei die Basisfunktionen dar. Wem das jetzt ein wenig zu schnell gegangen ist, der werfe einen Blick z.B. auf das bereits erwähnte Skriptum

*Quantenfeldtheorie* (SOFF)<sup>10</sup>. An dieser Stelle geben wir nur noch die Darstellung im bra-ket-Formalismus an

$$\begin{aligned} K(x', t'; x, t) &= \sum_n \langle n|x' \rangle e^{-(i/\hbar)E_n(t'-t)} \langle x|n \rangle \\ &= \sum_n \langle n|e^{-(i/\hbar)\hat{H}t'}|x' \rangle \langle x|e^{+(i/\hbar)\hat{H}t}|n \rangle \\ K(x', t'; x, t) &= \sum_n \langle x'|e^{-(i/\hbar)\hat{H}(t'-t)}|x \rangle \equiv \langle x'|\hat{U}(t', t)|x \rangle \end{aligned}$$

Der Propagator ist somit nichts anderes als der *Zeitentwicklungsoperator*

$$\hat{U}(t', t) = e^{-(i/\hbar)\hat{H}(t'-t)}$$

in der Ortsdarstellung. Keine allzu große Überraschung! Oftmals wird  $K(x', t'; x, t)$  auch geschrieben als

$$K(x', t'; x, t) = \langle x'|e^{-(i/\hbar)\hat{H}(t'-t)}|x \rangle \equiv \langle x't'|xt \rangle$$

Diese Notation entspricht der Darstellung im *Heisenbergbild*. In dieser sind die Zustandsvektoren zeitunabhängig und die Operatoren selbst tragen die ganze Zeitabhängigkeit. Im *Schrödingerbild* ist das genau umgekehrt. Dort schaut z.B. der Ortsoperator  $\hat{x}$  so aus

$$x_H(t') = e^{(i/\hbar)\hat{H}t'} \hat{x} e^{-(i/\hbar)\hat{H}t'}$$

und

$$x_H|x't' \rangle = x'|x't' \rangle \quad \text{mit} \quad |x't' \rangle = e^{(i/\hbar)\hat{H}t'}|x' \rangle.$$

### 2.2.5 Zur Pfadintegraldarstellung der Greenschen Funktion

Aber wozu haben wir uns das angeschaut? Nun, wir wollten es schon durch die Notation ausdrücken. Man kann die Greensche Funktion auch durch Pfadintegrale *darstellen*. Anders formuliert, das Pfadintegral stellt einen *Ausdruck* für den *Propagator*  $K$  dar, der als Operator formal auf den *Ausgangszustand* wirkt und die *zeitentwickelte Amplitude* des Systems liefert.

Um diesen Zusammenhang zu sehen, gehen wir von der Eigenfunktionsdarstellung der Greenschen Funktion (12) aus. Wir haben das auch als

$$K(x', t'; x, 0) = \langle x'|\hat{U}(t', t)|x \rangle$$

angeschrieben.

Mit der Identität  $e^H = (e^{H/(N+1)})^{N+1}$  und  $\lambda = it/\hbar$  ergibt sich

$$K(x', t'; x, 0) = \langle x'| (e^{-\lambda(T+V)/(N+1)})^{N+1} |x \rangle$$

<sup>10</sup><http://www.physik.tu-dresden.de/studdocs.htm>

Durch einige Überlegungen<sup>11</sup> kann dies zur sogenannten *Trotter-Produktformel* umgeschrieben werden

$$K(x', t'; x, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x' | (e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)})^{N+1} | x \rangle.$$

Unser Operatorausdruck wirkt  $N+1$ -mal auf unseren Zustand  $|x\rangle$ . Dieser ändert sich somit zwischen  $x'$  und  $x$  in *diskreten* Zeitabschnitten, die wir  $x_j$  nennen wollen, daher

$$\langle x' | (e^{\dots})^{N+1} | x \rangle = \prod_{j=0}^N \langle x_{j+1} | e^{\dots} | x_j \rangle.$$

wobei  $x = x_0$ ,  $x' = x_{N+1}$

Fügen wir jetzt noch eine *Vollständigkeitsrelation*,  $\mathbf{1} = \int |x_j\rangle \langle x_j| dx_j$  ( $j = 1, \dots, N$ ), ein, so erhalten wir

$$K(x', t'; x, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=0}^N \langle x_{j+1} | e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)} | x_j \rangle dx_1 \dots dx_N. \quad (13)$$

Wir betrachten nun die einzelnen Operatoren etwas genauer.

- $e^{\dots V}$  : Der Multiplikationsoperator  $V$  ist diagonal im Ortsraum, da  $V = f(x)$

$$e^{-\lambda V/(N+1)} |x_j\rangle = |x_j\rangle e^{-\lambda V(x_j)/(N+1)}. \quad (14)$$

Zu beachten ist, dass  $V(x_j)$  nur mehr eine Zahl ist, nämlich der Eigenwert von  $V$  an der Stelle  $x_j$ .

- $e^{\dots T}$  : Bei unserer kinetischen Energie haben wir nicht soviel Glück. Schließlich hängt sie ja vom Impuls ab, und der vertauscht nicht mit der Ortsvariable. Deswegen fügen wir wiederum, an geeigneten Stellen,  $N$ -mal Einsen aus Eigenwerten des  $T$ -Operators, also  $\mathbf{1} = \int |p_i\rangle \langle p_i| dp_i$ . Mit

$$\langle p | x_j \rangle = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} e^{-(ipx_j)/\hbar}.$$

ergibt sich...

$$\begin{aligned} \langle x_{j+1} | e^{-\lambda T/(N+1)} | x_j \rangle &= \int \langle x_{j+1} | e^{-\lambda T/(N+1)} | p_j \rangle \langle p_j | x_j \rangle dp_j \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda p_j^2/(2m(N+1))} e^{ip_j(x_{j+1}-x_j)/\hbar} dp_j \end{aligned}$$

Zu beachten ist, dass  $x_{j+1}$  ein *positives* Vorzeichen hat, da man das bra im Integral komplex konjugieren muss.

<sup>11</sup> Details...siehe *Quantenfeldtheorie* (SOFF) bzw *Das Pfadintegral in der Quantenmechanik* (DÖRING)

Da für Gaußsche Integrale  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2+by} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/(4a)}$  gilt, erhält man weiters, durch Integration,

$$\langle x_{j+1} | e^{-\lambda T/(N+1)} | x_j \rangle = \sqrt{\frac{m(N+1)}{2\pi\lambda\hbar^2}} e^{-m(N+1)(x_{j+1}-x_j)^2/(2\lambda\hbar^2)} \quad (15)$$

Setzen wir (14) und (15) in (13) ein!

$$K(x', t'; x, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\frac{m(N+1)}{2\pi\lambda\hbar^2}\right)^{(N+1)/2} \times \prod_{j=0}^N e^{-\frac{m(x_{j+1}-x_j)^2(N+1)}{2\lambda\hbar^2} - \frac{\lambda V(x_j)}{N+1}} dx_1 \dots dx_N.$$

Mit  $\varepsilon = t/(N+1) = (\hbar\lambda)/i(N+1)$  und zusammenfassen...

$$K(x', t', x, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{(N+1)/2} \times e^{i\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^N \left[\frac{1}{2}m\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2 - V(x_j)\right]} dx_1 \dots dx_N \quad (16)$$

Das ist schon der Pfadintegralausdruck für den Propagator! Die weitere Interpretation kennen wir bereits. Die verschiedenen Punkte  $x, x_1, \dots, x_N, x'$  sind durch Geraden miteinander zu verbinden. Ein Polygonzug entsteht. Im Grenzübergang wird die Summe in der Exponentialfunktion wieder zur Riemannschen Summe eines bestimmten Integrals

$$\sum_{j=0}^N \varepsilon \left[ \frac{1}{2} m \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_j) \right] \rightarrow \int_0^t \left[ \frac{1}{2} m \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^2 - V(x) \right] d\tau.$$

Wir stoßen daher wieder auf unsere Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^2 - V(x).$$

Wieso wohl?

Fällt Ihnen noch etwas auf? *Richtig*, ganz unbefangen sind wir zu unserem *Vorfaktor A* gekommen!

### 2.2.6 Anmerkungen zum Pfadintegral

Da wir nun schon soviel mit dem Hamilton-Operator zu tun hatten, wollen wir das Pfadintegral auch für die Hamilton-Funktion bzw. den Hamilton-Formalismus angeben. Das geht aber ganz einfach! Gleichung (4 auf Seite 10) stellt die Wirkung im Hamilton-Formalismus dar. Die Wirkung  $S$  wird halt zu einem  $S[q, p]$  anstatt  $S[q]$ . Die Definition

des Pfadintegrals (siehe Gleichung 10) ergibt sich deswegen zu

$$K(q_b, t_b; q_a, t_a) \equiv \sum_{\substack{\text{alle Pfade von} \\ q_a \text{ nach } q_b}} e^{(i/\hbar)S[p,q]} \Rightarrow$$

$$K(q_b, t_b; q_a, t_a) \equiv \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=1}^N dq_n \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \frac{dp_{n-1}}{2\pi\hbar} \times e^{i/\hbar \sum_{n=1}^{N+1} \varepsilon [p_n \frac{q_n - q_{n-1}}{\varepsilon} - \frac{1}{2}(H(p_n, q_{n-1}, t_n))]} \Rightarrow$$

$$K(q_b, t_b; q_a, t_a) \equiv \int \mathcal{D}q \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} e^{(i/\hbar)S[q,p]}.$$

wobei

$$\mathcal{D}q = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \prod_{n=1}^N dq_n \quad \text{und} \quad \mathcal{D}p = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \prod_{n=1}^N dp_n.$$

Wir integrieren offensichtlich über alle Phasenraumvolumenelemente  $dq_n dp_n$ , gemessen in Einheiten des Planckschen Wirkungsquantum  $h = 2\pi\hbar$ . Da unser Propagator jetzt in Ausdrücken der verallgemeinerten Koordinaten und Geschwindigkeiten vorliegt, sehen wir noch etwas sehr deutlich. Da, gemäß Voraussetzung, Anfangs- und Endpunkt vollkommen *festgelegt* sein müssen, sind die jeweiligen dazugehörigen Impulse komplett *unbestimmt*. Das liegt an der *Unschärferelation*.

Jetzt wollen wir noch einen anderen grundlegenden Punkt behandeln. Was geschieht, wenn man es mit zwei aufeinanderfolgende Ereignissen zu tun hat? Dazu gehen wir von  $t_a < t_c < t_b$  aus.  $t_c$  hat jedoch keinen "exakten" Wert sondern ist halt eine Variable. Die Wirkung kann man aufspalten in

$$S[b, a] = S[b, c] + S[c, a].$$

Setzt man dies in (10) ein, so folgt

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int e^{(i/\hbar)(S[b,c]+S[c,a])} \mathcal{D}'x(t)$$

Man erkennt sofort, dass auf der rechten Seite das *Produkt* zwischen  $K(c, a)$  und  $K(b, c)$  steht. Zu dem unbekanntem  $t_c$  gibt's natürlich wieder einen ebenso unbestimmten Raumpunkt  $x_c$ . Offenbar verbleibt genau die Integration über diese Variable, d.h.

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x_c} K(x_b, t_b; x_c, t_c) K(x_c, t_c; x_a, t_a) dx_c. \quad (17)$$

Die Verallgemeinerung liegt auf der Hand und führt zu einer Aufspaltung in einzelne Teilintervalle

$$K(b, a) = \int_{x_1} \int_{x_2} \dots \int_{x_{N-1}} K(b, N-1) K(N-1, N-2) \dots K(i+1, i) \dots K(1, a) dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1}$$

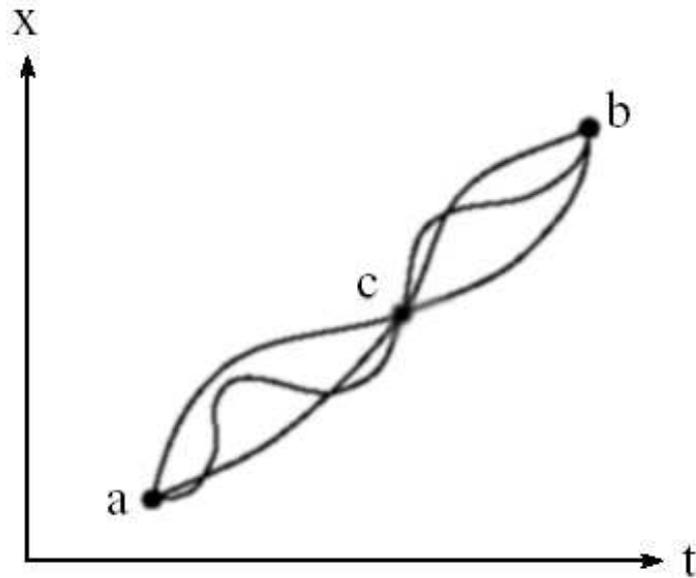


Abbildung 6: Um die Summe über alle Pfade zu erhalten, summiert man zuerst über die Wege auf, welche durch den Raum-Zeitpunkt  $(x_c, t)$  gehen. Darauf folgt die Integration über die Punkte  $x_c$ . Die Amplitude zu jedem Weg, der von  $a$  über  $c$  nach  $b$  geht, ist ein Produkt zweier Faktoren: (1) einer Amplitude die von  $a$  nach  $c$ , und (2) einer Amplitude die von  $c$  nach  $b$  geht. Da dies somit auch für die Summe gilt, ergibt sich die Gesamtamplitude zu  $K(b, c)K(c, a)$ . (nach *Quantum mechanics und path integrals* (FEYNMAN, HIBBS), McGraw-Hill Book Company, 1965)

Für ein infinitesimales Zeitintervall  $\epsilon$  zwischen zwei aufeinanderfolgenden Punkten können wir schreiben

$$K(i+1, i) = \frac{1}{A} e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathcal{L}\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\epsilon}, \frac{x_{i+1}+x_i}{2}, \frac{t_{i+1}+t_i}{2}\right)} \quad (18)$$

Dieser Ausdruck gilt in erster Ordnung in  $\epsilon$ . Für die Gesamtamplitude folgt somit

$$K(b, a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{i=0}^{N-1} K(i+1, i).$$

### 2.2.7 Die Ableitung der Schrödingergleichung aus der Pfadintegraldarstellung der Greenschen Funktion

Die Gültigkeit der Gleichung (11 auf Seite 18) kann als eine Konsequenz von (17) angesehen werden. Sie lautete

$$\psi(x', t') = \int_{-\infty}^{\infty} K(x', t'; x, t) \psi(x, t) dx. \quad (19)$$

Man kann das übrigens auch als *Definitionsgleichung* für die Greensche Funktion auffassen. Ihre Bedeutung reflektieren wir noch einmal: Kennen wir die Funktion zum Zeitpunkt  $t$  (mit  $x$ ) sowie die Wellenfunktion, so kennen wir auch die Lösung für  $t'$  (und  $x'$ ). Präziser, das *Betragsquadrat* der Greenschen Funktion gibt die *Übergangswahrscheinlichkeit* an.  $t_2$  möge sich jetzt nur um ein infinitesimales  $\epsilon$  von  $t_1$  unterscheiden. Aus (19) folgt unter Verwendung von (18)

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathcal{L}\left(\frac{x-y}{\epsilon}, \frac{x+y}{2}, t + \frac{1}{2}\epsilon\right)} \psi(y, t) dy$$

Dabei haben wir unser  $x_{i+1}$ , der Abwechslung halber, zu  $y$  umgetauft. Wieder betrachten wir unser "Lieblingsbeispiel": die Bewegung eines Teilchens in einem Potential  $V(x, t)$ . In einer Richtung. Die Lagrange-Funktion ist also durch  $\mathcal{L} = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x, t)$  gegeben. Dies führt zu

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-y)^2}{2\epsilon}} e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon V\left(\frac{x+y}{2}, t + \frac{1}{2}\epsilon\right)} \times \psi(y, t) dy. \quad (20)$$

Der Exponent  $(x - y)^2/2$  tritt im Argument der ersten Exponentialfunktion auf. Da  $x$  und  $y$  sehr nahe beieinander liegen, können wir auch  $y = x + \eta$  schreiben. Durch Einsetzen in (20) bekommt man

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/(2\hbar\epsilon)} e^{-(i\epsilon/\hbar)V[(2x+\eta)/2, t+\epsilon/2]} \psi(x + \eta, t) d\eta.$$

Wir entwickeln nun  $\psi$  in eine Potenzreihe, wobei wir nur Terme der Ordnung  $\epsilon^{12}$  berücksichtigen wollen. Deswegen können wir zunächst einmal  $\epsilon V[(2x + \eta)/2, t + \epsilon/2]$  durch  $\epsilon V(x, t)$  ersetzen. Unsere Gleichung nimmt, wegen der Reihendarstellung, die Gestalt

$$\psi(x, t) + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/2\hbar\epsilon} \left[ 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x, t) \right] \times \left[ \psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{2} \eta^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 x} \right] d\eta \quad (21)$$

an.

Der Term, der sich bei einem "normalen" Multiplikationsschema als erstes ergibt, lautet

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/2\hbar\epsilon} d\eta = \frac{1}{A} \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m}}.$$

Damit beide Seiten im Grenzübergang  $\epsilon \rightarrow 0$  übereinstimmen<sup>13</sup>, muss

$$A = \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m}}.$$

Nanu! Das ist doch genau *der* Faktor, den wir aus (8 auf Seite 17) bereits kennen! Jetzt haben wir also noch eine weitere Begründung für ihn gefunden! Auf diese Weise wird das auch bei komplizierteren Problemen gemacht.  $A$  muss so gewählt sein, als dass die Gleichung für  $\epsilon \rightarrow 0$  korrekt bleibt.

Für Gleichung (21) müssen wir noch folgende unbestimmte Integrale berechnen bzw. in Integraltafeln nachschlagen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/2\hbar\epsilon} \eta d\eta = 0 \text{ bzw. } \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/2\hbar\epsilon} \eta^2 d\eta = \frac{i\hbar\epsilon}{m}$$

Setzen wir alles in (21) ein, so bekommen wir

$$\psi + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi - \frac{i\epsilon}{\hbar} V \psi - \frac{\hbar\epsilon}{2im} \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 x}.$$

Schauen wir uns das nur bis zur ersten Ordnung ( $\epsilon = 1$ ) an...

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 x} + V(x, t) \psi.$$

Das ist aber natürlich nix anderes als die Schrödingergleichung für unser Problem. Wem das nicht genug sein sollte, der kann den Zusammenhang auf die gleiche Art und Weise für komplexere Probleme nachweisen. Wir wollen uns hier nur noch einmal vergegenwärtigen, dass wir uns jetzt die *Gleichwertigkeit* der Schrödinger-Theorie bzw. der Pfadintegralmethode gut vorstellen können.

<sup>12</sup> d.h. Terme die quadratisch in  $\eta$  sind

<sup>13</sup> wobei nur dieser Term stehen bleibt

## 2.3 Beispiele

### 2.3.1 Die klassische Wirkung für den harmonischen Oszillator bzw. das freie Teilchen

Unsere ersten beiden Beispiele sind das freie Teilchen und der harmonischer Oszillator. Augenscheinlich ist natürlich, dass der Schwierigkeitsgrad der Aufgabe mit der "Art" der Lagrange-Funktion zusammenhängt. Das ist aber auch in der klassischen Mechanik so. Ein Mehrteilchenproblem ist halt schwieriger zu lösen als das freie Teilchen oder ein Teilchen in einem Potential.

Zunächst einmal wollen wir unsere Beispiele klassisch behandeln. Für den harmonischen Oszillator lautet die Lagrange-Funktion

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

Im Grenzübergang  $\omega \rightarrow 0$  wird dies zu jener des freien Teilchens.

Um den klassischen Pfad  $x_{kl}$  für den Fall  $\omega \neq 0$  zu erhalten, muss die aus (22) abgeleitete Bewegungsgleichung

$$\ddot{x} + \omega x = 0 \quad (23)$$

mit den Randwerten  $x(t_a) = x_a$  und  $x(t_b) = x_b$  integriert werden. Es ergibt sich die Lösung

$$x(t) = c_1 \sin \omega t + c_2 \cos \omega t$$

wobei

$$c_1 = \frac{x_b \cos \omega t_a - x_a \cos \omega t_b}{\sin \omega T} \quad \text{und} \quad c_2 = \frac{x_b \sin \omega t_b - x_a \sin \omega t_a}{\sin \omega T}$$

$T$  gibt die zeitliche Differenz an, also  $T = t_b - t_a$ .

Mit Hilfe von  $\sin(\alpha + \beta) = \sin \alpha \cos \beta + \cos \alpha \sin \beta$  erhält man

$$x(t) = [x_b \sin \omega(t - t_a) + x_a \sin \omega(t - t_b)] / \sin(\omega T). \quad (24)$$

Jetzt setzen wir in die Definition der Wirkung ( 2 auf Seite 8) unsere Lagrange-Funktion (22) ein

$$S_{kl} = \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L} dt = \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt = \frac{m}{2} \left[ \int_{t_a}^{t_b} \left( \frac{dx}{dt} \right) \left( \frac{dx}{dt} \right) dt - \int_{t_a}^{t_b} \omega^2 x^2 dt. \right]$$

Partielle Integration führt auf...

$$S_{kl} = \frac{m x \dot{x}}{2} \Big|_{t_a}^{t_b} - \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} x (\ddot{x} + \omega^2 x) dt.$$

Im Vergleich mit (23) sieht man, dass der zweite Term verschwindet. Es folgt somit

$$S_{kl} = \frac{m}{2}[x(t_b)\dot{x}(t_b) - x(t_a)\dot{x}(t_a)].$$

Wenn wir nun (24) bzw. die Ableitung einsetzen, kriegen wir

$$S_{kl} = \frac{m}{2}[x_b\omega(x_b \cos \omega T - x_a) - x_a\omega(x_b - x_a \cos \omega T)]/\sin \omega T$$

also schlussendlich

$$S_{kl} = \frac{m\omega}{2\sin \omega T}[(x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_ax_b]$$

Der Grenzübergang  $\omega \rightarrow 0$  führt zur Wirkung des freien Teilchens

$$S_{kl} = \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{T}.$$

### 2.3.2 Das freie Teilchen im Pfadintegralformalismus

Wir wollen nun nun das freie Teilchen anschauen. Die Lagrange-Funktion lautet ja

$$\mathcal{L} = \frac{m\dot{x}^2}{2}.$$

Einsetzen in ( 16 auf Seite 21) liefert

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{-\frac{N+1}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \sum_{i=1}^{N+1} (x_i - x_{i-1})^2} dx_1 \dots dx_N.$$

Wie schon sooft haben wir es mit einem Satz von Gauß-Integralen der Form  $\int e^{-ax^2+bx} dx$  zu tun. Das Integral einer Gaußschen Funktion führt wieder auf eine Gaußsche Funktion. Damit können wir ein Integral nach dem anderen ausführen. Mit der Formel (Beweis siehe *Quantenfeldtheorie* (SOFF)<sup>14</sup>)

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{a(x_1-x)^2} e^{b(x_2-x)^2} dx = \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}} e^{\frac{ab}{a+b}(x_1-x)^2}$$

ergibt sich

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{-2/2} e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} [(x_2-x_1)^2 + (x_1-x_0)^2]} dx = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \cdot 2\varepsilon}} e^{\frac{im}{2\hbar(2\varepsilon)}(x_2-x_0)^2}.$$

<sup>14</sup> <http://www.physik.tu-dresden.de/studdocs.htm>

## Pfadintegrale

Multiplikation mit  $\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}} e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon}(x_3-x_2)^2}$  und Integration über  $x_2$  führt zu

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon \cdot 3\epsilon}} e^{\frac{im}{2\hbar(3\epsilon)}(x_3-x_0)^2}$$

Das folgt unmittelbar aus der ersten Integration, wenn man  $(x_2-x_0)^2 \rightarrow (x_3-x_0)^2$  bzw.  $2\epsilon \rightarrow 3\epsilon$  substituiert. Machen wir das jetzt  $N$ -mal, so erhalten wir

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \cdot (N+1)\epsilon}} e^{\frac{im}{2\hbar(N+1)\epsilon}(x_{N+1}-x_0)^2}$$

Wir erinnern uns, dass  $(N+1)\epsilon = t_b - t_a$  ist. Somit bekommen wir für die Amplitude

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b - t_a)}} e^{\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}}$$

$K$  entspricht genau der Greenschen Funktion für ein freies Teilchen, die auch im Rahmen der Schrödinger-Theorie abgeleitet werden kann. Die Wahrscheinlichkeit entspricht dem Absolutbetragsquadrat, also

$$P(t_b, t_a) = \frac{m}{2\pi\hbar(t_b - t_a)} dx$$

Fassen wir unsere Rechnung noch einmal kurz zusammen!

Wir haben die Lagrange-Funktion für unser Problem gekannt. Daraus haben wir uns die Wirkung gebastelt. Mit der Pfadintegralmethode haben wir dann unsere Greensche Funktion berechnet. Aus dieser konnten wir wiederum die Übergangswahrscheinlichkeit ableiten. Diese spielt im Allgemeinen eine sehr wichtige Rolle, z.B. bei Streuprozessen.

Als aufmerksamer Leser, der Sie nun einmal sind, werden Sie sich hoffentlich nur noch fragen: "Worin besteht der Unterschied zwischen der klassischen und der quantenmechanischen Betrachtung?" Im klassischen Fall haben wir  $S$  zu  $m(x_b - x_a)^2/2T$  bestimmt. In unserer jetzigen Rechnung war die Wirkung

$$S = \frac{m}{2\epsilon} \sum_{i=1}^{N+1} (x_i - x_{i+1})^2.$$

Offenbar entspricht dies genau der klassischen, wenn wir  $\epsilon$  in erster Ordnung nähern. Das ist doch eine *bessere* Abschätzung des Übergangs, als "S ist viel größer als  $\hbar$ " (vgl. Abschnitt 2.2.1), finden Sie nicht?

Es sei dem klugen Leser überlassen, herauszufinden *warum* hier die *gleiche* Näherung  $\epsilon = 1$  zum Ziel führt, die wir ja auch schon bei der Ableitung der Schrödingergleichung benutzt haben.

### 2.3.3 Der harmonische Oszillator

Als ein weiteres Beispiel betrachten wir den harmonischen Oszillator. Dieser gehört zu einer allgemeinen Klasse von Problemen, die auf *Gaußsche Integrale* führen. Die entsprechende Lagrange-Funktion lautet

$$\mathcal{L}(\dot{x}, x, t) = a(t)\dot{x}^2 + b(t)\dot{x}x + c(t)x^2 + e(t)x + f(t)$$

Unser freies Teilchen steckt da natürlich auch drinnen. Noch weitere Beispiele gefällig? Der *verschobene* harmonische Oszillator (Doppelmuldenpotential) bzw. geschwindigkeitsabhängige Potentiale.

Der Propagator lautet (vgl. 10 auf Seite 17)

$$K(b, a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(\dot{x}, x, t) dt} \mathcal{D}x(t). \quad (25)$$

Wir spalten jetzt jeden Weg in einen *klassischen* Anteil  $x_{kl}$ <sup>15</sup> und in einen Anteil  $y$  auf.

$$x = x_{kl} + y.$$

In der diskretisierten Version gilt offensichtlich  $dx_i = dy_i$  bzw. allgemein  $\mathcal{D}'x(t) = \mathcal{D}'y(t)$ . Für das Wirkungsfunktional folgt

$$S[x(t)] = S[x_{kl}(t) + y(t)] = \int_{t_a}^{t_b} [a(t)(\dot{x}_{kl}^2 + 2\dot{x}_{kl}\dot{y} + \dot{y}^2) + b(t)(\dot{x}_{kl}x_{kl} + \dot{x}_{kl}y + \dot{y}x_{kl} + \dot{y}y) + \dots] dt.$$

Die Terme die keine  $y$ -Abhängigkeit aufweisen, ergeben in Summe die Wirkung des *klassischen* Weges, also  $S[x_{kl}(t)] = S_{kl}$ . Terme die *linear* in  $y$  bzw.  $\dot{y}$  sind, *verschwinden* nach Integration.<sup>16</sup> Man bekommt...

$$S[x(t)] = S_{kl} + \int_{t_a}^{t_b} [a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2] dt.$$

Wir haben unsere Wirkung somit *separiert*. Einsetzen in (25) ergibt schlussendlich für die Greensche Funktion

$$K(b, a) = e^{\frac{i}{\hbar} S_{kl}} \int_0^0 e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2]} \mathcal{D}y(t) \quad (26)$$

<sup>15</sup> also jener Weg, der in der klassischen Berechnung  $a$  und  $b$  verbindet.

<sup>16</sup> Das kann anhand der Ableitung der Euler-Lagrange Gleichungen aus dem Wirkungsprinzip plausibel gemacht werden, wo nach partieller Integration ein Term  $\delta q \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q}$  auftritt der aufgrund von  $\delta q = 0$  (für die Endpunkte  $q_a, q_b$ ) verschwindet.

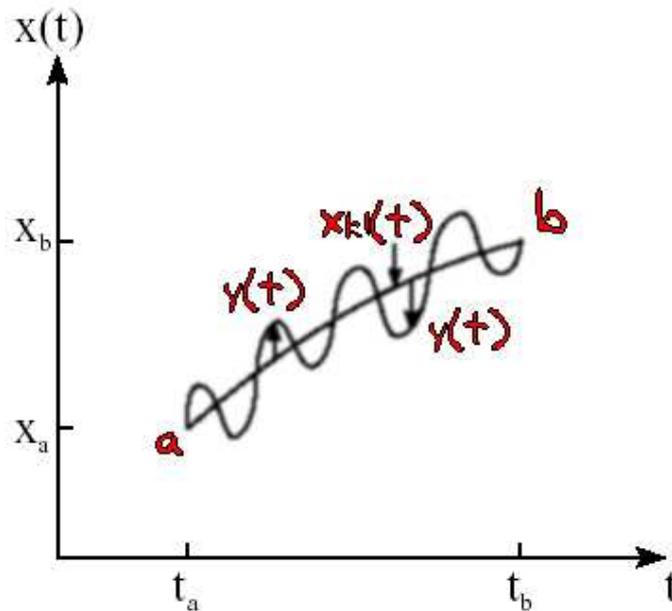


Abbildung 7: Zur Separation von  $x$   
 Aufgetragen sind  $x_{kl}$  und  $x(t)$  wobei die Differenz eben  $y(t)$  ist (nach  
*Quantenfeldtheorie (SOFF)*)

Dieses Ergebnis ist durchaus bemerkenswert. Klar ist vorerst nur, warum der klassische Weg als Konstante auftritt. Aber wieso sollen wir, wie wir es angeschrieben haben, von  $0$  nach  $0$  integrieren? (Antwort siehe Fußnote<sup>17</sup>) Da das Integral somit nur von  $t_a$  und  $t_b$  abhängt, schreibt man auch

$$K(b, a) = e^{\frac{i}{\hbar} S_{kl}} F(t_a, t_b).$$

Übrigens, man kann das Verfahren auch auf *noch allgemeinere* Lagrange-Funktionen anwenden.

Wir wollen aber unsere Berechnung des harmonischen Oszillators fortsetzen. Dazu müssen wir zunächst einmal die klassische Wirkung einsetzen

$$K(b, a) = F(T) e^{\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} + [(x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b]}. \quad (27)$$

Nun gilt es die Funktion  $F(T)$  zu bestimmen, die ja durch

$$F(T) = \int_0^0 e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{1}{2} m (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt} \mathcal{D}y(t) \quad (28)$$

<sup>17</sup>Das liegt an der Forderung, dass *jeder* Pfad durch die Endpunkte gehen muss. Dort kann deswegen auch keine Abweichung  $y$  auftreten!

gegeben ist. Dabei verwenden wir ein sehr wichtiges Verfahren. Da alle Pfade  $y(t)$  von  $\theta$  bei  $t = 0$  nach  $\theta$  bei  $t = T$  gehen, ist

$$y(t) = \sum_n a_n \sin \frac{n\pi t}{T}$$

(d.h. die Darstellung als Fourier-Sinusreihe) ein vernünftiger Ansatz. Die verschiedenen Pfade können dabei als Funktion der Entwicklungskoeffizienten  $a_n$  aufgefasst werden.

Wir setzen unsere Reihe in das Wirkungsintegral ein. Für den ersten Term erhalten wir offenbar

$$\int_0^T \dot{y}^2 dt = \sum_n \sum_m \frac{n\pi}{T} \frac{m\pi}{T} a_n a_m \int_0^T \cos\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \cos\left(\frac{m\pi t}{T}\right) dt.$$

$$\text{Mit } \int_0^{2\pi} \cos(m\pi) \cos(n\pi) dx = \pi \delta_{mn} \quad (m, n \neq 0.) \text{ folgt}$$

$$\int_0^T \dot{y}^2 dt = \frac{T}{2} \sum_n \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 a_n^2.$$

Auf ähnliche Weise ergibt sich  $\int_0^T y^2 dt = \frac{1}{2} \sum_n a_n^2$ .

Wieder haben wir unsere Zeit diskretisiert, und zwar in Schritte der Länge  $\epsilon$ . Das entspricht der Berücksichtigung von  $(N + 1)$  Koeffizienten von  $a_n$ . Das zu lösende Pfadintegral (28) wird durch unsere Überlegungen zu

$$F(T) = \mathcal{J} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{\sum_{n=1}^{N+1} \frac{im}{2\hbar} [( \frac{n\pi}{T} )^2 - \omega^2] a_n^2} \frac{da_1}{A} \frac{da_2}{A} \dots \frac{da_{N+1}}{A}$$

wobei  $A = \sqrt{2\pi i \hbar / m}$  und  $\mathcal{J}$  ist die Jakobi-Determinante von den einzelnen  $y_i$  auf die  $a_i$ . Wir haben es wiederum mit Gauß-Integralen zu tun, und zwar

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im}{2\hbar} ( \frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2 ) a_n^2} \frac{da_n}{A} = \left( \frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-1/2}.$$

das Pfadintegral ist somit proportional zu

$$\prod_{n=1}^{N+1} \left( \frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-1/2} = \left[ \prod_{n=1}^{N+1} \left( \frac{n^2\pi^2}{T^2} \right)^{-1/2} \right] \left[ \prod_{n=1}^{N+1} \left( 1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2\pi^2} \right)^{-1/2} \right] = ab.$$

- **a** :  $a$  hängt nicht von  $\omega$  ab. Wir fassen ihn deshalb mit der Jakobi-Determinante sowie anderen Faktoren zu der Konstanten  $\mathcal{C}$  zusammen.

- **b** : Der Grenzwert von  $b$  lautet

$$\sqrt{\frac{\omega T}{\sin(\omega T)}} \text{ für } N \rightarrow \infty, \text{ d.h. } \epsilon \rightarrow 0.$$

Damit bekommen wir für  $F(T)$

$$F(T) = \mathcal{C} \sqrt{\frac{\omega T}{\sin(\omega T)}}.$$

Im Grenzfall müssen wir wieder auf das freie Teilchen kommen, und zwar auf  $F(T) = \sqrt{m/(2\pi i\hbar T)}$ .  $\mathcal{C}$  ergibt sich deswegen zu

$$\mathcal{C} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}$$

sodass  $F(T)$  zu

$$F(T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}}$$

wird.

Setzen wir unser Ergebnis in Gleichung ( 27 auf Seite 30) ein, so erhalten wir insgesamt

$$K(b, a) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} \times e^{\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega T)} [(x_a^2 + x_b^2) \cos(\omega T) - 2x_a x_b]}. \quad (29)$$

Man kann übrigens auch hier sehr schön die Gleichwertigkeit zum Schrödinger-Formalismus sehen. erinnert man sich daran, dass sich die Greensche Funktion durch die Eigenfunktionen und Eigenwerte der Energie darstellen lässt, nämlich

$$K(x_2, T, x_1, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n T} \phi_n(x_2) \phi_n^*(x_1)$$

so folgt durch geschicktes Umformeln bzw. durch Reihenentwicklung von (29) und Koeffizientenvergleich

$$\begin{aligned} \phi_0(x) &= \sqrt[4]{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \\ \phi_1(x) &= \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \phi_0(x) \\ \phi_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1 \right) \phi_0(x) \\ &\dots \end{aligned}$$

Insofern erkennen wir auch, dass die Greensche Funktion alle notwendigen Informationen enthält, um Eigenfunktionen und Erwartungswerte ableiten zu können. Sehr beruhigend!

Eine weitere Bemerkung sei uns auch gestattet. Wir haben ja zunächst von einer allgemeinen Klasse gesprochen, nämlich den quadratischen Lagrange-Funktionen. Es ist somit klar, dass die von uns gefundene Lösung des harmonischen Oszillators auch in der *allgemeinen* Lösung des Problems enthalten sein muss. Zwar ist Induktion, ohne weitere Überlegungen, nie sehr ratsam, aber in diesem Falle führt sie auf ein intuitiv nachvollziehbares Ergebnis... Die quadratische Lagrangefunktion

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + b(t)x\dot{x} - \frac{1}{2}c(t)x^2 - e(t)x$$

hat die Pfadintegraldarstellung

$$K(b, a) = e^{\frac{i}{\hbar}S_{kl}(b,a)} F(t_b, t_a)$$

wobei

$$F(t_b, t_a) = \int_0^1 e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left( \frac{m\dot{y}^2}{2} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n V}{\partial x^n} \Big|_{x=x_{kl}} y^n \right) dt} \mathcal{D}'y$$

### 2.3.4 Der Aharonov-Bohm-Effekt

Wir haben beim Doppelspaltexperiment (vgl. Abschnitt 2.2.1 auf Seite 12) von einer interessanten Erweiterung gesprochen, dem Aharonov-Bohm-Effekt. Wir wollen ihn noch einmal definieren. Er stellt die *Beeinflussung* des Interferenzmusters aufgrund eines Magnetfeldes dar, wobei dieses eigentlich *nicht* auf die Teilchen wirkt. Dass schauen wir uns jetzt genauer an (Abbildung 8). Das Magnetfeld wird durch ein *Vektorpotential*  $\vec{A}$  festgelegt bzw. genauer durch  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ . Die Lagrange-Funktion verändert sich bei Anwesenheit des Feldes folgendermaßen

$$\mathcal{L}(\dot{\vec{q}}, q) \rightarrow \mathcal{L}'(\dot{\vec{q}}, \vec{q}) = \mathcal{L}(\dot{\vec{q}}, \vec{q}) - e\vec{v}\vec{A}(\vec{q})$$

Für die Wirkung hat dies die folgende Konsequenz

$$S \rightarrow S' = S - e \int \vec{v}\vec{A}(\vec{q})dt \rightarrow \Delta S = -e \int \vec{A}(\vec{q}(t)) \frac{d\vec{q}(t)}{dt} dt$$

also z.B. für einen der beiden Wege

$$S'[\vec{q}_1] = S[\vec{q}_1] - e \int_{q_1(t)} \vec{A}(\vec{q})d\vec{q}.$$

Unsere Gesamtamplitude ergibt sich aus der Interferenz beider Wege, wobei wir den Fall mit eingeschaltetem Magnetfeld betrachten

$$K'(b, a) = e^{(i/\hbar)S'[\vec{q}_1]} + e^{(i/\hbar)S'[\vec{q}_2]} = e^{(i/\hbar)S'[\vec{q}_1]}(1 + e^{(i/\hbar)(S'[\vec{q}_2]-S'[\vec{q}_1])}) = e^{(i/\hbar)S'[\vec{q}_1]}(1 + e^{i\varphi'_{12}}),$$

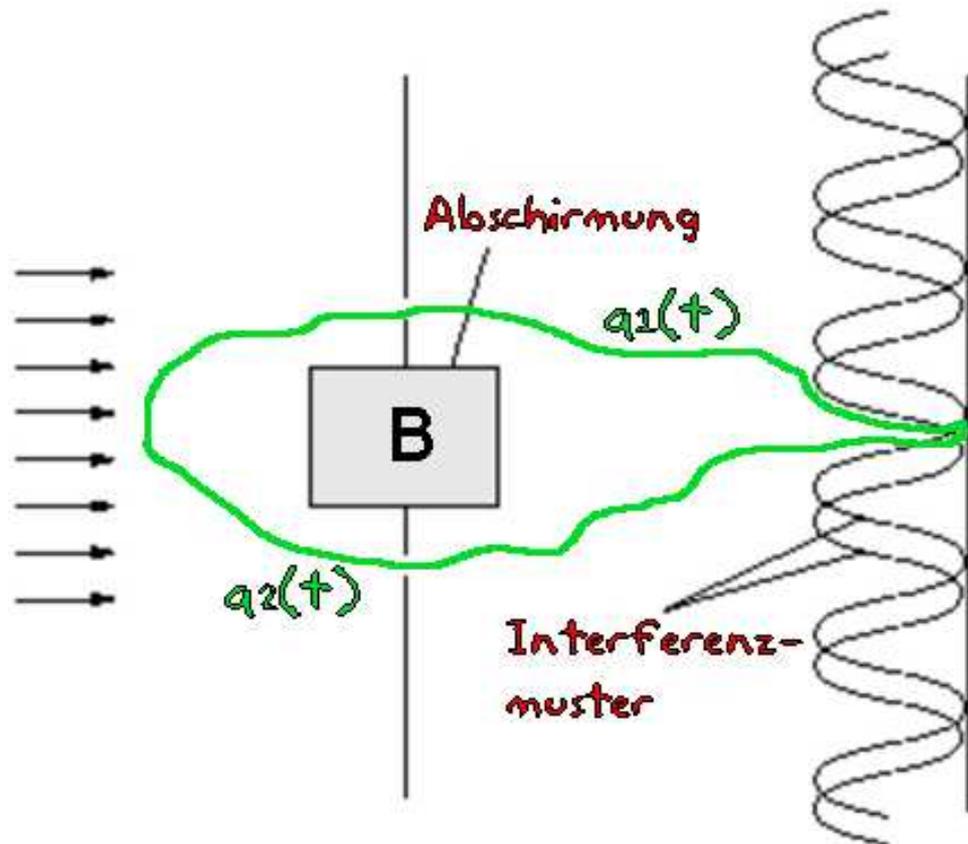


Abbildung 8: Skizze zum Aharonov-Bohm-Effekt (aus *Path Integral Methods and Applications* (MACKENZIE))

wobei

$$\varphi'_{12} = \varphi_{12} - \frac{e}{\hbar} \left( \int_{\vec{q}_2(t)} \vec{A}(\vec{q}) d\vec{q} - \int_{\vec{q}_1(t)} \vec{A}(\vec{q}) d\vec{q} \right). \quad (30)$$

Die Differenz entspricht aber genau einem Umlaufintegral

$$\int_{\vec{q}_2(t)} \vec{A}(\vec{q}) d\vec{q} - \int_{\vec{q}_1(t)} \vec{A}(\vec{q}) d\vec{q} = \oint \vec{A}(\vec{q}) d\vec{q} = \Phi$$

wobei  $\Phi \dots$  magnetischer Fluss.

Wir können Gleichung (30) somit als auch

$$\varphi'_{12} = \varphi_{12} - \frac{e}{\hbar} \Phi$$

anschreiben. Es ist dabei interessant, dass das Umlaufintegral *unabhängig* vom konkreten Weg ist, als lange es eben existiert, was wiederum an die Forderung gebunden ist, als dass *beide* Spalte offen sind.

Die Gesamtamplitude bei ausgeschaltetem Magnetfeld bezeichnen wir als  $K(b, a) = K_1 + K_2$ . Die  $K_i$ 's ergeben sich dabei durch

$$K_i = \int_{\text{Spalt } i} e^{(i/\hbar)S[\vec{q}]} \mathcal{D}\vec{q}.$$

Wir geben den Teilchen jetzt also "mehrere" Möglichkeiten durch den jeweiligen Spalt zu gehen.

Wenn wir das Magnetfeld einschalten, erhalten wir

$$K'_1 = \int_{\text{Spalt } 1} e^{(i/\hbar)(S[\vec{q}] - e \int \vec{A} d\vec{q})} \mathcal{D}\vec{q} = e^{(ie/\hbar) \int_1 \vec{A} d\vec{q}} A_1$$

bzw. insgesamt

$$K(b, a) = e^{-(ie/\hbar) \int_1 \vec{A} d\vec{q}} A_1 + e^{-(ie/\hbar) \int_2 \vec{A} d\vec{q}} A_2 = e^{-(ie/\hbar) \int_1 \vec{A} d\vec{q}} (A_1 + e^{-(ie/\hbar) \oint \vec{A} d\vec{q}} A_2)$$

$$K(b, a) = e^{-(ie/\hbar) \int_1 \vec{A} d\vec{q}} (A_1 + e^{-(ie/\hbar) \Phi} A_2).$$

Was lernen wir daraus? Das Interferenzmuster auf dem Schirm reagiert *direkt* auf den magnetischen Fluss. Wenn wir ihn verändern, so verändert sich auch das Messergebnis. Ist die Phase *const.*  $\Phi$  z.B gleich  $\pi$ , so bekommt man an den Punkten, wo man zuvor konstruktive Interferenz gehabt hat, destruktive Interferenz und umgekehrt.

Das Magnetfeld muss nicht im Aussenraum existieren, da für die Beeinflussung das Vektorpotential entscheidend ist, welches ja nirgendwo verschwindet.

## 3 Literatur

### 3.1 Wie's weitergehen könnte

So, glauben Sie jetzt alles über Pfadintegrale zu wissen? Nun ja, es tut mir leid Sie zu enttäuschen! Sie stehen vielmehr am *Anfang* dieses Gebietes. Tatsächlich haben wir hier nur über ein paar Wesentlichkeiten berichtet. Wir haben z.B. nichts Konkretes über die *Verwendung* von Pfadintegralen gesagt. Wozu man sie benützt. Oder die Verallgemeinerung auf mehrere Dimensionen. Wie geht das wohl? Nun, dass alles herauszufinden, sei Ihnen, geschätzter Leser, überlassen.

Aber um Ihnen zumindest den Einstieg zu erleichtern, sind hier noch ein paar Dokumente, also "Literatur" aufgelistet, die vielleicht für Sie ganz nützlich sein könnte. Es handelt sich dabei nicht um eine bloße Rezitierung der bereits erwähnten Werke, vielmehr wird hier "Altes" und "Neues" gemischt. In diesem Sinne...

- *Quantum mechanics and path integrals* (FEYNMAN, HIBBS), McGraw-Hill Book Company, 1965  
*Das Standardwerk schlechthin. In wesentlicher Hinsicht basieren die meisten Ausarbeitungen auf den Konzepten dieses Buches. Leider scheint es nicht mehr neu aufgelegt zu werden, sodass die Bibliothek die einzige Bezugsquelle darstellen dürfte.*  
Übrigens eine "List of errors" gibt's hier: *List of Errors* (STYER)  
(<http://www.oberlin.edu/physics/dstyer/TeachQM/Supplements.html>)
- *Quantenfeldtheorie* (SOFF) (<http://www.physik.tu-dresden.de/studdocs.htm>)  
*Großartige Darstellung des Stoffes, die vor allem durch die sehr explizite Ausarbeitung der einzelnen Gedanken besticht. Im ersten Teil orientiert sich das Skriptum stark an FEYNMAN, HIBBS. Das Werk ist sicherlich ein sehr guter Startpunkt für die Anwendung der Pfadintegrale in der QED bzw. statistischen Physik. Zudem findet man eine relativ umfangreiche Liste mit weiterführender Literatur*
- *Path Integrals In Quantum Mechanics* (MCKAY)  
(<http://www.math.utah.edu/~mckay/qftSeminar.html>)  
*Eine Einführungsschrift, die ebenfalls auf FEYNMAN, HIBBS basiert. Der Schwerpunkt liegt dabei auf dem eigenständigen Erarbeiten, d.h. es gibt sehr viele Übungen, zu denen auch Anleitungen vorhanden sind.*
- *Path Integral Methods and Applications* (MACKENZIE)  
(<http://xxx.lanl.gov/abs/quant-ph/0004090>)  
*Diese Schrift behandelt die Anwendungen der Pfadintegrale auf sehr ausführliche Art und Weise. Unter anderem findet man eine Illustration der Anwendung in der Streutheorie.*
- *Introduction To Relativistic Quantum Field Theory* (VAN HEES)  
(<http://theory.gsi.de/~vanhees>)  
*Nach einer kurzen Einführung der Pfadintegrale in der Bra-ket Schreibweise, wird hier die Quantenfeldtheorie behandelt. Sicher eher etwas für den fortgeschrittenen*

Leser.

- *Introduction to Path Integrals in Field Theory* (MOSEL)  
(<http://theorie.physik.uni-giessen.de/publications>)  
*Eine mathematisch anspruchsvollere Darstellung. Neben einer Einführung findet man in diesem Werke u.a. Streutheorie,  $\phi^4$ -Theorie bzw. Eichfelder. Natürlich wird alles auf den Pfadintegralformalismus bezogen.*
- *Path Integrals*(WIPF)<http://www.tpi.uni-jena.de/wipf/lecturenotes.html>  
*Wiederum eher etwas für den Fortgeschrittenen. In diesem Text wird auch die Anwendung der Pfadintegralmethode in der Statistischen Physik ausführlicher diskutiert.*
- *Feynman and the visualization of space-time processes* (SCHWEBER), *Reviews of Modern Physics*, Vol. 58, No. 2 (1986)  
(<http://cornell.mirror.aps.org>)  
*Eine wirklich tolle Arbeit, welche sich mit der historischen Entstehung der Pfadintegrale bzw. der Quantenelektrodynamik auseinandersetzt. Zumindest aus der Sicht von FEYNMAN. Ein imposantes Literaturverzeichnis sowie viele Bilder, z.B. handschriftliche Notizen von Feynman, runden das Werk ab. Leider muss man einen Account bei "Modern Physics" haben (wie z.B. die Uni), um es zu bekommen.*
- *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics* (FEYNMAN), *Reviews of Modern Physics*, Vol. 29, No. 2 (1957)  
(<http://cornell.mirror.aps.org>)  
*Die Originalarbeit von FEYNMAN*
- *Pfadintegrale zur Quantenmechanik* (AMELUNXEN)  
(<http://www.physik.uni-mainz.de/lehramt/lehramt/Programme/welcome.html>)  
*Wer ein wenig Entspannung sucht, sollte vielleicht hier vorbeischaun. Das kleine Programm, welches man auf der Seite findet, basiert auf "QED - The strange theory of light and matter" von FEYNMAN. Beides demonstriert, dass sich auch die moderne Physik in Worte kleiden lässt, sodass sich ein interessierter Laie etwas darunter vorstellen kann...*

## 3.2 Mail to Author

Kennen Sie vielleicht bessere Darstellungen? Links? Haben Sie in diesem Dokument einen Fehler entdeckt? Prima! Dann schreiben Sie mir doch sogleich! Bitte!  
pfanner@kfunigraz.at