

Das Feynman'sche Pfadintegral

Sebastian Will

Seminararbeit im Rahmen des
Seminars zur Theoretischen Physik für Fortgeschrittene
(Probleme aus der Quantenmechanik)

WS 2004/2005

D. Drechsel, S. Scherer und L. Tiator

15. Dezember 2004

Zusammenfassung

Gegen Ende der zwanziger Jahre des vergangenen Jahrhunderts wurde eine der erfolgreichsten Theorien der Physik entwickelt - die Quantenmechanik. Bereits in der Anfangszeit entstand ihre bis heute am häufigsten anzutreffende Formulierung als Wellenmechanik, deren zentraler Ausgangspunkt die omnipräsente Schrödinger-Gleichung darstellt. Dabei handelt es sich jedoch nicht um die einzige mögliche Formulierung der Theorie: Im Jahre 1948 stellte Richard P. Feynman mit der Pfadintegral-Methode einen alternativen Zugang vor.

Diese Seminararbeit soll ausgehend von den bekannten Prinzipien der Schrödinger-Formulierung der Quantenmechanik einen einfachen Einstieg in die Idee des Feynman'schen Pfadintegrals ermöglichen. Wir werden zeigen, dass sich das Feynman'sche Pfadintegral sinnvoll sowohl in die bekannten Strukturen der klassischen Mechanik als auch der Schrödinger-Quantenmechanik einfügt. Als interessante Anwendungsbeispiele werden wir das freie Teilchen und den harmonische Oszillator besprechen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Motivation	3
2	Grundlagen der Quantenmechanik	3
2.1	Der Propagator	3
2.2	Das Heisenberg-Bild	4
3	Der Weg zum Pfadintegral	5
3.1	Basiszustände	5
3.2	Operator-Ordnung	6
3.3	Weyl-Ordnung	7
3.4	Berechnung des Propagators	7
3.5	Gewöhnliche Darstellung des Pfadintegrals	9
4	Grundlegende Anwendungen des Pfadintegrals	11
4.1	Der klassische Grenzfall	11
4.2	Äquivalenz zur Schrödinger-Gleichung	12
4.3	Rechnen mit dem Pfadintegral: Das freie Teilchen	13
5	Der harmonische Oszillator	15
5.1	Das Pfadintegral für den harmonischen Oszillator	15
5.2	Lösung durch Fourier-Entwicklung.	16
6	Abschlussbemerkungen	18

1 Einleitung und Motivation

Die Quantenmechanik zählt zu den erfolgreichsten Theorien der modernen Physik. Sie wurde Ende der zwanziger Jahre des vergangenen Jahrhunderts von Heisenberg, Pauli, Dirac, Born, Jordan und nichtzuletzt von Schrödinger entwickelt und ausgearbeitet. Insbesondere letzterem, Schrödinger, gelang mit der Aufstellung der heute als *Schrödinger-Gleichung* bezeichneten Wellengleichung eine kompakte Formulierung der neuen Theorie. Mit Hilfe eines Korrespondenzprinzips kann sie aus der klassischen Hamilton-Mechanik abgeleitet werden und enthält mit dem Hamilton-Operator das Analogon zur Hamilton-Funktion der klassischen Mechanik. Gegen Ende der vierziger Jahre entwickelte Richard Feynman, angeregt durch eine Randbemerkung in einer Veröffentlichung Diracs, eine alternative Beschreibung der Quantenmechanik, die so genannte *Pfadintegralmethode*, die er erstmals 1948 vorstellte [1].

In dieser Seminararbeit wollen wir die grundlegenden Ideen der Pfadintegralmethode nachvollziehen. Wir werden feststellen, dass einerseits dieser „neue“ Zugang zur Quantenmechanik zunächst etwas ungewohnt und darum schwieriger erscheinen mag. Andererseits werden wir aber auch sehen, dass der Pfadintegralmethode eine eingängige Anschauung zugrunde liegt und sich bestimmte Prinzipien und Symmetrien sehr einfach erklären lassen. Nach einem kurzen Überblick über grundlegende Konzepte aus der Quantenmechanik (Kap. 2) führen wir bereits das Pfadintegrals ein (Kap. 3). Um zu sehen, wie der neue Formalismus arbeitet, werden grundlegende Anwendungen des Pfadintegrals besprochen (Kap. 4), darunter die Äquivalenz zur Schrödinger-Gleichung und die Dynamik eines freien Teilchens. Während die Lösung des Problems des freien Teilchens mit der Pfadintegralmethode noch sehr unhandlich und unübersichtlich erscheinen mag, werden wir sehen, dass sich die Dynamik des harmonischen Oszillators mit dem neuen Formalismus vergleichsweise übersichtlich herleiten lässt (Kap. 5).

2 Grundlagen der Quantenmechanik

In diesem Kapitel wollen wir kurz grundlegende Eigenschaften der Quantenmechanik in Erinnerung rufen.

2.1 Der Propagator

Die Dynamik eines Systems in der klassischen Mechanik ist bestimmt durch die Hamilton-Funktion. Ist die Hamilton-Funktion H bekannt, so ist die Dynamik des Systems festgelegt, und die Bewegungsgleichungen sind, falls nicht analytisch, so doch immer numerisch lösbar. Der Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik wird vollzogen, indem man die klassischen Observablen durch unter Umständen nicht-kommutierende Operatoren ersetzt. Die Dynamik der quantenmechanischen Zustände wird dann bestimmt durch die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (1)$$

die in dieser Form im abstrakten Hilbert-Raum operiert. H bezeichnet nun nicht mehr die Hamilton-Funktion, sondern den Hamilton-Operator. Im eindimensio-

nalen Ortsraum wird Gl. (1) zu

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

wobei wir benutzen, dass $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$ mit $|x\rangle$ als Ortsbasiszustand.

Die Schrödinger-Gleichung löst man mit dem Ziel, die Dynamik des quantenmechanischen Systems explizit zu bestimmen. Mit anderen Worten: Man sucht nach dem Zeitentwicklungsoperator (auch: Propagator), der den quantenmechanischen Zustand zur *früheren* Zeit t_2 in den *zukünftigen* Zeitpunkt t_1 transformiert:

$$|\psi(t_1)\rangle = U(t_1, t_2) |\psi(t_2)\rangle. \quad (3)$$

Aus Gl. (1) sehen wir, dass im Falle eines nicht explizit von der Zeit abhängigen Hamilton-Operators H der Propagator für $t_1 > t_2$ formal gegeben ist durch

$$U(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) e^{-\frac{i}{\hbar}(t_1 - t_2)H}, \quad (4)$$

wobei $\theta(t)$ die *Heaviside'sche Sprungfunktion* ist, die hier eine *kausale* Zeitentwicklung sicherstellt. Der Propagator ist explizit berechenbar, indem man die Matrixelemente in einer gegebenen Basis bestimmt. Im Ortsraum können wir dementsprechend schreiben:

$$\langle x_1 | U(t_1, t_2) | x_2 \rangle = U(t_1, x_1; t_2, x_2). \quad (5)$$

Mit Hilfe von Gl. (5) ist die Zeitentwicklung der Wellenfunktion gegeben durch

$$\psi(x_1, t_1) = \int dx_2 U(t_1, x_1; t_2, x_2) \psi(x_2, t_2). \quad (6)$$

2.2 Das Heisenberg-Bild

Im vorangegangenen Abschnitt 2.1 arbeiteten wir im so genannten *Schrödinger-Bild*, in dem die Quantenzustände $|\psi(t)\rangle$ als Lösungen der Schrödinger-Gleichung zeitabhängig und die Operatoren zeitunabhängig sind. Ebenso gut kann man aber auch ein System benutzen, in dem die Quantenzustände zeitunabhängig, aber die Operatoren *zeitabhängig* sind. Man nennt diese Sichtweise das *Heisenberg-Bild*, und die Quantenzustände sind hier gegeben durch

$$|\psi\rangle_H = |\psi(t=0)\rangle_S = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} |\psi(t)\rangle_S. \quad (7)$$

Es wird also die Dynamik des Zustandes $|\psi(t)\rangle_S$, die durch die Gln. (3) und (4) beschrieben wird, durch Multiplikation mit dem Faktor $e^{+\frac{i}{\hbar}Ht}$ wieder entfernt. Wir haben es also hier mit einer unitären linearen Transformation¹ zu tun, bei der nicht nur die Zustände, sondern auch die Operatoren transformiert werden müssen. Der Ortsoperator zum Beispiel lautet im Heisenberg-Bild

$$\hat{x}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \hat{x} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}, \quad (8)$$

wobei die Eigenzustände des Ortsoperators die folgende Eigenwert-Gleichung erfüllen:

$$\hat{x}_H(t) |x; t\rangle_H = x |x; t\rangle_H \quad \rightsquigarrow \quad |x; t\rangle_H = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} |x\rangle \quad (9)$$

¹Die Transformation ist unitär wegen der Hermitizität des Hamilton-Operators $H = H^\dagger$.

Bemerkenswert ist hier die Zeitabhängigkeit der Zustände $|x; t\rangle_H$, die jedoch verständlich wird, wenn man bedenkt, dass es sich *nicht* um Lösungen der Schrödinger-Gleichung, sondern um Eigenzustände eines Operators handelt. Mit Hilfe von Gl. (9) sehen wir nun, dass

$$\begin{aligned} {}_H\langle x_1, t_1 | x_2, t_2 \rangle_H &= \langle x_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} H t_1} e^{\frac{i}{\hbar} H t_2} | x_2 \rangle \\ &= \langle x_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} H (t_1 - t_2)} | x_2 \rangle \\ &= \langle x_1 | U(t_1, t_2) | x_2 \rangle \\ &= U(x_1, t_1; x_2, t_2). \end{aligned} \quad (10)$$

Dieses Ergebnis bedeutet, dass der Propagator nichts anders ist, als die Übergangsamplitude zwischen zwei Ortsbasiszuständen im Heisenberg-Bild.

3 Der Weg zum Pfadintegral

Ziel dieses zentralen Kapitels ist es, eine besondere Integraldarstellung für den Propagator $U(x_f, t_f; x_i, t_i)$ zu finden. Diese werden wir später als Pfadintegral bezeichnen und entsprechend interpretieren können. Zur Vereinfachung der Rechnungen wollen wir ein eindimensionales Quantensystem betrachten; die Erweiterung auf höhere Dimensionen ist problemlos möglich.

3.1 Basiszustände

Die Eigenzustände des Ortsoperators \hat{x} müssen die Eigenwertgleichung

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (11)$$

erfüllen. Sie bilden eine orthonormale Basis, was mathematisch durch die Beziehungen

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x'), \quad (12)$$

$$\int dx |x\rangle \langle x| = I \quad (13)$$

ausgedrückt wird. Analoges gilt für die Eigenzustände des Impulsoperators \hat{p} :

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad (14)$$

$$\langle p | p' \rangle = \delta(p - p'), \quad (15)$$

$$\int dp |p\rangle \langle p| = I. \quad (16)$$

Zwischen den Orts- und den Impulsbasiszuständen besteht die Beziehung

$$\langle p | x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p x} = \langle x | p \rangle^*, \quad (17)$$

durch die die Fourier-Transformation zwischen Orts- und Impulsraum definiert wird. Für die Ortsbasiszustände im Heisenberg-Bild kann man Relationen herleiten, die vergleichbar mit Gl. (13) sind. Mit $|x, t\rangle_H = e^{\frac{i}{\hbar} H t} |x\rangle$ folgen

$${}_H\langle x, t | x', t \rangle_H = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} e^{\frac{i}{\hbar} H t} | x' \rangle = \langle x | x' \rangle = \delta(x - x') \quad (18)$$

sowie

$$\int dx |x, t\rangle_{HH} \langle x, t| = \int dx e^{\frac{i}{\hbar}Ht} |x\rangle \langle x| e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} I e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = I. \quad (19)$$

Wir bemerken aber den wichtigen Unterschied, dass die Orthogonalität und die Vollständigkeit der Ortsbasiszustände im Heisenberg-Bild nur für gleiche Zeiten gegeben sind.

3.2 Operator-Ordnung

Wir bemerkten bereits zu Beginn, dass beim Übergang von der klassischen Hamilton-Funktion zum quantenmechanischen Hamilton-Operator,

$$H(x, p) \rightsquigarrow H(\hat{x}, \hat{p}), \quad (20)$$

die klassischen Observablen durch Operatoren ersetzt werden, die nicht notwendigerweise miteinander kommutieren. In diesem Zusammenhang ist die Frage zu klären, wie man mit Produkten der Art $xp = px$ umgeht. Im klassischen Fall spielt die Reihenfolge der Variablen keine Rolle, da die Multiplikation von Zahlen kommutativ ist. Es ist aber a priori nicht klar, in welcher Reihenfolge die Operatoren im quantenmechanischen Hamilton-Operator erscheinen sollen. Tatsächlich gibt es kein wohldefiniertes Prinzip, durch das die Reihenfolge der Operatoren festgelegt wird. Dies überrascht nicht, denn die klassische Mechanik ist ein Grenzfall der Quantenmechanik - und nicht umgekehrt! Aus der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik zu gelangen, ist somit logisch die verkehrte Richtung. Wie die Ordnung im Hamilton-Operator sein muss, entscheidet im Einzelfall der Vergleich der theoretischen Resultate mit dem Experiment. Dennoch gibt es einige gebräuchliche Ordnungsvorschriften, darunter die

- a) **Normal-Ordnung:** Produkte von Ortskoordinaten und Impulsen werden so umgeordnet, dass die Impulse links von den Ortskoordinaten stehen. Beispiele:

$$\begin{aligned} xp &\xrightarrow{\text{N.O.}} px \\ px &\xrightarrow{\text{N.O.}} px \\ x^2p &\xrightarrow{\text{N.O.}} px^2 \\ xpx &\xrightarrow{\text{N.O.}} px^2 \end{aligned}$$

- b) **Weyl-Ordnung:** Produkte von Ortskoordinaten und Impulsen werden symmetrisiert, das heißt, alle möglichen Reihenfolgen der Produkte werden mit gleicher Gewichtung aufaddiert. Beispiele:

$$\begin{aligned} xp &\xrightarrow{\text{W.O.}} \frac{1}{2}(xp + px) \\ xpx &\xrightarrow{\text{W.O.}} \frac{1}{3}(x^2p + xpx + px^2) \end{aligned}$$

3.3 Weyl-Ordnung

Ab jetzt sollen x und p (ohne Hut) stets den Orts- bzw. Impulsoperator symbolisieren. Zudem werden wir im Folgenden nur die Weyl-Ordnung verwenden, und sie als Einsetzungsvorschrift betrachten, die eine elegante Formulierung des Pfadintegrals ermöglicht². Um zu sehen wie sie sich auf einen allgemeinen Hamilton-Operator auswirkt, betrachten wir zunächst

$$(\alpha x + \beta p)^N = \sum_{m+n=N} \frac{N!}{n!m!} \alpha^n \beta^m (x^n p^m)^{\text{W.O.}}, \quad (21)$$

wobei $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ beliebig. Weyl-geordnete Produkte aus x und p ergeben sich hier also ganz natürlich durch ausmultiplizieren der linken Seite. Betrachten wir nun die Taylor-Entwicklung des Terms

$$e^{\alpha x + \beta p}, \quad (22)$$

so kommen darin alle Potenzen der Art $(\alpha x + \beta p)^n$ (für alle $n \in \mathbb{N}$) vor. Mit Hilfe der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel $e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}$ und mit $[x, p] = i\hbar$, leiten wir her, dass

$$e^{\frac{\alpha x}{2}} e^{\beta p} e^{\frac{\alpha x}{2}} = e^{\frac{\alpha x}{2}} e^{(\beta p + \frac{\alpha x}{2} - \frac{i\hbar\alpha\beta}{4})} = e^{(\alpha x + \beta p - \frac{i\hbar\alpha\beta}{4} + \frac{i\hbar\alpha\beta}{4})} = e^{(\alpha x + \beta p)}. \quad (23)$$

Mit der Relation (23) lässt sich nun leicht das Matrixelement von (22) berechnen:

$$\begin{aligned} \langle x' | e^{\alpha x + \beta p} | x \rangle &= \langle x' | e^{\frac{\alpha x}{2}} e^{\beta p} e^{\frac{\alpha x}{2}} | x \rangle = \int dp \langle x' | e^{\frac{\alpha x}{2}} e^{\beta p} | p \rangle \langle p | e^{\frac{\alpha x}{2}} | x \rangle \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}p(x-x')} e^{\frac{\alpha(x+x')}{2} + \beta p}. \end{aligned} \quad (24)$$

Gl. (24) erlaubt nun den Schluss, dass für das Matrixelement eines Weyl-geordneten Hamilton-Operators

$$\langle x' | H^{\text{W.O.}} | x \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}p(x-x')} H\left(\frac{x+x'}{2}, p\right) \quad (25)$$

gilt, falls sich der Hamilton-Operator als Summe aus Termen der Form $(\alpha x + \beta p)^n$ mit $n \in \mathbb{N}$ schreiben lässt. Diese Einschränkung ist praktisch bedeutungslos, da sich alle physikalisch relevanten Hamilton-Operatoren derart entwickeln lassen. In Gl. (25) sehen wir, dass das Matrixelement des Weyl-geordneten Hamilton-Operators von dem Mittelwert $(x + x')/2$ abhängt. Diese Struktur nennt man „mid-point prescription“³.

3.4 Berechnung des Propagators

Wir haben nun die Vorarbeit geleistet, um die gesuchte Integraldarstellung für den Propagator herzuleiten. Wir erinnern uns, dass für $t_f > t_i$ der Propagator im Heisenberg-Bild durch

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = {}_H \langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle_H \quad (26)$$

²Eine schlüssige Antwort auf die Frage, welche Operator-Ordnung korrekt ist, wird natürlich einzig und allein durch den Vergleich der Theorie mit dem Experiment gegeben.

³In Deutsch etwa als „Mittelpunktvorschrift“ übersetzbar.

gegeben ist. Nun unterteilen wir das Zeitintervall $[t_i, t_f]$ in N Stücke mit infinitesimaler Länge ϵ ,

$$\epsilon = \frac{t_f - t_i}{N} \quad \text{und} \quad t_n = t_i + n\epsilon \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad (27)$$

das heißt, wir diskretisieren zunächst das Zeitintervall, sind aber zum Ende unserer Berechnung am Grenzwert $\epsilon \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$ interessiert. Im Sinne dieser Diskretisierung benutzen wir die Vollständigkeitsrelation der Ortsbasiszustände im Heisenberg-Bild, Gl. (19), und fügen sie für jeden Zeitpunkt t_n ($n = 1, 2, \dots, N-1$) in Gl. (26) ein. Wir blähen den Ausdruck also zunächst mit Identitäten auf, werden jedoch sehen, dass diese Erweiterung zu einer sehr interessanten Interpretation führt:

$$\begin{aligned} U(x_f, t_f; x_i, t_i) &= {}_H\langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle_H \\ &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} {}_H\langle x_f, t_f | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle_H \times \\ &\quad \times {}_H\langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_{N-2}, t_{N-2} \rangle_H \cdots {}_H\langle x_1, t_1 | x_i, t_i \rangle_H. \end{aligned} \quad (28)$$

Wir stellen fest, dass in Gl. (28) zwar N Skalarprodukte, aber nur $N-1$ Integrationen stehen. Die Skalarprodukte können wir mit Hilfe von

$$\begin{aligned} {}_H\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle_H &= \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar} H t_n} e^{\frac{i}{\hbar} H t_{n-1}} | x_{n-1} \rangle \\ &= \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar} H \epsilon} | x_{n-1} \rangle \\ &= \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_n (x_n - x_{n-1}) - \frac{i}{\hbar} \epsilon H\left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2}, p_n\right)} \end{aligned} \quad (29)$$

expliziter ausschreiben, wobei im letzten Schritt Gl. (25) berücksichtigt wurde. Gl. (28) wird nun zu

$$\begin{aligned} U(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \cdots \\ &\quad \cdots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left(p_n (x_n - x_{n-1}) - \epsilon H\left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2}, p_n\right) \right)}, \end{aligned} \quad (30)$$

wobei wir $x_0 \equiv x_i$ und $x_N \equiv x_f$ definieren. Dies ist bereits eine Vorstufe des *Feynman'schen Pfadintegrals*. Die Integration über Ortskoordinaten *und* Impulse zeigt, dass diese Vorstufe im Phasenraum operiert. In der gewöhnlichen Darstellung des Pfadintegrals werden wir lediglich Integrationen über Ortskoordinaten vorfinden. Dennoch lohnt es schon jetzt der Mühe, den Exponenten aus Gl. (30) im Grenzfall $\epsilon \rightarrow 0$ zu betrachten. Wir erhalten

$$\begin{aligned} &\lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left(p_n (x_n - x_{n-1}) - \epsilon H\left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2}, p_n\right) \right) \\ &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left(p_n \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right) - H\left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2}, p_n\right) \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt (p\dot{x} - H(x, p)) \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt L, \end{aligned} \quad (31)$$

wobei wir im vorletzten Schritt die Definition des Riemann-Integrals benutzten. Wir sehen also, dass der Exponent proportional zur Wirkung S ist, wobei S auf dieser Stufe in Abhängigkeit von x und p auszudrücken ist.

3.5 Gewöhnliche Darstellung des Pfadintegrals

Die gewöhnliche Darstellung des Pfadintegrals enthält die Lagrange-Funktion, die nicht im Phasen-, sondern im *Konfigurationsraum* operiert. Den Übergang zum Konfigurationsraum vollziehen wir, indem wir in Gl. (30) die Integration über die Impuls-Koordinaten explizit ausführen. Dies geht besonders einfach für solche Hamilton-Funktionen, die quadratisch in den Impulsen sind. Wir betrachten also Hamilton-Funktionen der Form

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (32)$$

und bemerken, dass eine große Klasse physikalisch relevanter Hamilton-Funktionen genau dieser Form entspricht. Einsetzen von Gl. (32) in Gl. (30) ergibt nun

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \cdots \\ \cdots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left(p_n \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right) - \frac{p_n^2}{2m} - V \left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2} \right) \right)}. \quad (33)$$

Wie wir sehen, sind die verbleibenden Impuls-Integrale nichts anderes als Gauß-Integrale, die sich direkt berechnen lassen:

$$\int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \left(\frac{p_n^2}{2m} - \frac{p_n(x_n - x_{n-1})}{\epsilon} \right)} = \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i\epsilon}{2m\hbar} \left(p_n^2 - \frac{2mp_n(x_n - x_{n-1})}{\epsilon} \right)} \\ = \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i\epsilon}{2m\hbar} \left[\left(p_n - \frac{m(x_n - x_{n-1})}{\epsilon} \right)^2 - \left(\frac{m(x_n - x_{n-1})}{\epsilon} \right)^2 \right]} \\ = \frac{1}{2\pi\hbar} \left(\frac{2\pi m\hbar}{i\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{im\epsilon}{2\hbar} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2} \\ = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{im\epsilon}{2\hbar} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2}. \quad (34)$$

Setzen wir nun das Ergebnis aus Gl. (34) in Gl. (33) ein, so erhalten wir das **Feynman'sche Pfadintegral** der Quantenmechanik:

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = \\ = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 - V \left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2} \right) \right)} \\ = A \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right)} \\ = A \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}, \quad (35)$$

wobei A eine Konstante ist, die nicht von der Dynamik des beschriebenen Systems abhängt, und

$$S[x] \equiv \int_{t_i}^{t_f} L(x, \dot{x}) \quad (36)$$

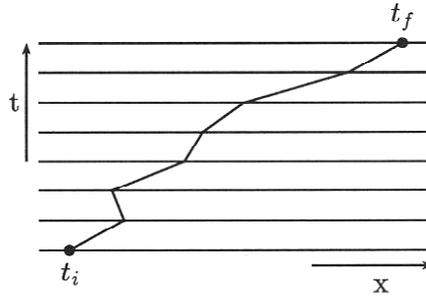


Abbildung 1: Veranschaulichung der zeitlichen Diskretisierung einer Trajektorie.

das klassische Wirkungsfunktional (kurz: die Wirkung) des Systems ist. An dieser Stelle weisen wir darauf hin, dass die hier hergeleitete Darstellung des Pfadintegrals nicht nur für Hamilton-Funktionen der Form aus Gl. (32) gilt, sondern ganz allgemein, das heißt für beliebige Hamilton-Funktionen. Um Gl. (35) korrekt zu interpretieren, sind einige Bemerkungen notwendig:

- a) **Vorfaktor A :** Das Pfadintegral erhält durch das formale Ausführen des Grenzübergangs $\epsilon \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$ seine kompakte kontinuierliche Form, wie der letzte Schritt von Gl. (35) zeigt. Bei genauer Betrachtung sehen wir, dass der Vorfaktor $m/2\pi i\hbar\epsilon$ beim Grenzübergang divergieren müsste, und so die Identifikation mit einer Konstanten A nicht gerechtfertigt erscheint. In den noch folgenden Berechnungen zum freien Teilchen und zum harmonischen Oszillator werden wir jedoch sehen, dass die Singularität des Vorfaktors durch Multiplikation mit dem Ergebnis des explizit berechneten Integrals über $dx_1 \cdots dx_{N-1}$ gerade verschwindet. Dies verhält sich in vielen Fällen so. Zudem zeigt die Praxis, dass die Berechnung physikalisch interessanter Größen häufig über einen Quotienten führt, der ein Pfadintegral mit dem gleichen Vorfaktor sowohl im Zähler als auch im Nenner führt. Durch einfaches Wegkürzen verschwindet dann das Problem der Singularität beim Grenzübergang. In jedem Fall ist es wichtig zu beachten, dass die kontinuierliche Form des Pfadintegrals lediglich den Status einer formalen Schreibweise hat. Um konkrete Berechnungen durchzuführen, muss man stets mit der diskretisierten Form arbeiten.
- b) **Integralmaß $\mathcal{D}x$:** Die Anfangs- und Endpunkte der Integration bleiben fest bei (x_i, t_i) , (x_f, t_f) , während über *alle* räumlichen Konfigurationen des Systems zwischen diesen festen Endpunkten integriert wird. Jede erdenkliche Konfiguration entspricht gerade einer potentiellen Trajektorie des Systems (Abb. (1)). Die Integration über das Integralmaß $\mathcal{D}x$ soll also die Summation über alle *Pfade* symbolisieren, die den Anfangs- und Endpunkt verbinden.
- c) **Gewichtungsfaktor $e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}$:** Die Pfade, über die integriert wird, werden mit dem Faktor $e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}$ gewichtet, den man sich als Zeiger auf den Einheitskreis der komplexen Zahlenebene vorstellen kann. Die Richtung dieses Zeigers wird durch den Wert der Wirkung $S[x]$ für einen bestimmten Pfad festgelegt. Dies bedeutet, dass in der Quantenmechanik die potentiellen Pfade zwar gewichtet werden, aber dennoch *alle* zum Propagator beitragen. Hier sehen wir einen wichtigen Unterschied zur klassischen Mechanik, in der das Wirkungs-

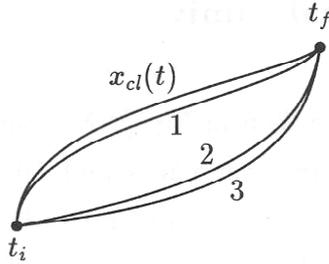


Abbildung 2: Klassische Trajektorie und weitere potentielle Pfade.

funktional $S[x]$ *deterministisch* die Dynamik eines Systems bestimmt, das heißt, nur einen einzigen Pfad, die klassische Trajektorie, zulässt.

4 Grundlegende Anwendungen des Pfadintegrals

Nun wollen wir anhand einfacher Rechnungen zeigen, dass der Pfadintegral-Formalismus mit der klassischen Mechanik und der herkömmlichen Schrödinger-Quantenmechanik konsistent ist und die gleichen Ergebnisse liefert.

4.1 Der klassische Grenzfall

Es ist interessant, die Frage zu stellen, ob auch im Pfadintegral-Formalismus die klassische Trajektorie eine besondere Rolle spielt, wenn man den klassischen Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ betrachtet. Um diese Frage wenigstens qualitativ zu beantworten, betrachten wir Gl. (35). In der diskretisierten Form des Pfadintegrals stellen wir fest, dass unter der Annahme $x_n \gg x_{n-1}$ der Term $x_n - x_{n-1}/\epsilon$ sehr groß wird, falls $\epsilon \rightarrow 0$. Dies hat zur Folge, dass der Gewichtungsfaktor „leicht“ sein Vorzeichen wechselt. Damit ist gemeint, dass es für jedes x_n ein infinitesimal nahes x'_n gibt, so dass sich beide Wege beim Integrieren herausmitteln und somit nicht zum Wert des Integrals beitragen. Es sind also nur kontinuierliche Wege physikalisch sinnvoll.

Betrachten wir nun verschiedene kontinuierliche Wege von x_i nach x_f , darunter auch die klassische Trajektorie, im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$. Der Gewichtungsfaktor $e^{\frac{i}{\hbar}S[x]}$ enthält als Phase die Wirkung $S[x]$ multipliziert mit einer großen Zahl, denn $\hbar \rightarrow 0$. Man kann also nachvollziehen, dass die entscheidenden Integralbeiträge aus Wegen resultieren, die $S[x]$ extremal machen, das heißt

$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = 0. \quad (37)$$

Dies ist aber nichts anderes als das bekannte Prinzip der kleinsten Wirkung, dessen Lösung gerade auf die klassische Trajektorie führt. Aus Abb. (2) sollten also wesentlich x_{cl} und der naheliegende Pfad 1 zum Pfadintegral beitragen. Denn betrachten wir nun Pfad 3, der weit von der klassischen Trajektorie entfernt liegt, so ist das Wirkungsfunktional nicht mehr stationär. Es gibt einen infinitesimal nahen Pfad, zum Beispiel Pfad 2, der einen Gewichtungsfaktor mit genau entgegengesetztem Vorzeichen hat. Beim Ausführen der Integration tragen im klassischen Grenzfall solche weit entfernten Pfade nicht bei. Wie wir sehen,

spielt auch im Pfadintegral-Formalismus die klassische Trajektorie des Systems eine prominente Rolle.

4.2 Äquivalenz zur Schrödinger-Gleichung

In Kap. 3 haben wir das Pfadintegral ausgehend von der Schrödinger-Quantenmechanik hergeleitet. Nun wollen wir überprüfen, ob wir umgekehrt aus dem Pfadintegral auch wieder zur Schrödinger-Gleichung gelangen können. Gelingt uns dies, können wir sicher sein, keine Informationen, die in der Schrödinger-Quantenmechanik enthalten sind, auf dem Weg zum Pfadintegral verloren zu haben.

Die Schrödinger-Gleichung ist eine Differentialgleichung und beschreibt als solche explizit infinitesimale Änderungen in der Wellenfunktion. Als Ausgangspunkt bietet es sich deshalb an, das Pfadintegral für infinitesimale zeitliche Änderungen zu betrachten, das heißt

$$U(x_f, t_f = \epsilon; x_i, t_i = 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_f - x_i}{\epsilon} \right)^2 - V \left(\frac{x_f + x_i}{2} \right) \right)}. \quad (38)$$

Die infinitesimal geänderte Wellenfunktion kann man mit

$$\psi(x, \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' U(x, \epsilon; x', 0) \psi(x', 0) \quad (39)$$

direkt berechnen. Setzen wir Gl. (38) in Gl. (39) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \psi(x, \epsilon) &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon} \left((x-x')^2 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V \left(\frac{x+x'}{2} \right) \right)} \psi(x', 0) \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon} \left(\eta^2 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V \left(x + \frac{\eta}{2} \right) \right)} \psi(x + \eta, 0) \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon} \eta^2} \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V \left(x + \frac{\eta}{2} \right) \right) \psi(x + \eta, 0) \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon} \eta^2} \left(\psi(x, 0) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) \psi(x, 0) + \right. \\ &\quad \left. + \eta \psi'(x, 0) + \frac{\eta^2}{2} \psi''(x, 0) + \mathcal{O}(\eta^3, \epsilon\eta, \epsilon^3) \right), \quad (40) \end{aligned}$$

wobei wir im zweiten Schritt die Substitution $\eta = x' - x$ einführen⁴ und im dritten Schritt den Integranden bis zur 1. Ordnung in ϵ Taylor-entwickelten. Höhere Ordnungen sind bedeutungslos, da ϵ infinitesimal ist. Die Integration

⁴Es ist zu beachten, dass η zwar selbst nicht infinitesimal ist, aber das Integral im Wesentlichen nur für $\eta \rightarrow 0$ beiträgt. Darum kann $\psi(x + \eta, 0)$ auch in niedrigen Ordnungen von η entwickelt werden.

über η ist mit Hilfe der Integrale

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{\hbar\epsilon}\eta^2} &= \left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \eta e^{\frac{im}{\hbar\epsilon}\eta^2} &= 0 \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \eta^2 e^{\frac{im}{\hbar\epsilon}\eta^2} &= \frac{i\hbar\epsilon}{m} \left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\end{aligned}\quad (41)$$

elementar ausführbar, und wir erhalten

$$\begin{aligned}\psi(x, \epsilon) &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\psi(x, 0) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x)\psi(x, 0)\right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{i\hbar\epsilon}{m} \left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \psi''(x, 0) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right] \\ &= \psi(x, 0) + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \psi''(x, 0) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x)\psi(x, 0) + \mathcal{O}(\epsilon^2).\end{aligned}\quad (42)$$

Dies führt unmittelbar zu

$$\frac{\psi(x, \epsilon) - \psi(x, 0)}{\epsilon} = -\frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, 0) + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (43)$$

und wir erhalten im Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0$ die bekannte zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t). \quad (44)$$

Das zeigt uns, dass der Pfadintegral-Formalismus nicht nur aus der Schrödinger-Quantenmechanik folgt, sondern dass beide Formulierungen in diesem Sinne *äquivalent* sind.

4.3 Rechnen mit dem Pfadintegral: Das freie Teilchen

Wir werden als erstes veritables Anwendungsbeispiel den Propagator des freien Teilchens über das Pfadintegral ausrechnen. Dazu benötigen wir die Lagrange-Funktion des eindimensionalen freien Teilchens

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2, \quad (45)$$

die besonders einfach handhabbar ist, weil ein - eventuell unbequemer - Potentialterm nicht vorhanden ist. Das diskrete Pfadintegral für dieses Problem lautet also

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} e^{\frac{im}{\hbar\epsilon} \sum_{n=1}^N (x_n - x_{n-1})^2}. \quad (46)$$

Zur Berechnung dieses Integrals setzen wir die Substitution

$$y_n = \left(\frac{m}{2\hbar\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} x_n \rightsquigarrow \frac{dy_n}{dx_n} = \left(\frac{m}{2\hbar\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (47)$$

ein und erhalten dann

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{2\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{N-1}{2}} \int dy_1 \cdots dy_{N-1} e^{i \sum_{n=1}^N (y_n - y_{n-1})^2}. \quad (48)$$

Im Wesentlichen handelt es sich hier um ein modifiziertes Gauß-Integral. Wie man durch vollständige Induktion leicht zeigen kann, ist der Wert des Integrals allgemein gegeben durch

$$\int dy_1 \cdots dy_{N-1} e^{i \sum_{n=1}^N (y_n - y_{n-1})^2} = \left(\frac{(i\pi)^{N-1}}{N}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{N}(y_N - y_0)^2}. \quad (49)$$

Einsetzen in Gl. (48) führt zu

$$\begin{aligned} U(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{2\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{N-1}{2}} \left(\frac{(i\pi)^{N-1}}{N}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{N}(y_N - y_0)^2} \\ &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m}\right)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{\frac{im}{2\hbar N \epsilon}(x_N - x_0)^2} \\ &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar N \epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar N \epsilon}(x_f - x_i)^2} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_f - t_i)}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m(x_f - x_i)^2}{2(t_f - t_i)}}, \end{aligned} \quad (50)$$

wobei im zweiten Schritt resubstituiert und im vorletzten Schritt $N\epsilon = t_f - t_i$ benutzt wurde. Wie wir sehen, erübrigt sich dadurch das Ausführen des Grenzüberganges und das in Abschnitt 3.5 angesprochene Problem der unendlichen Konstante A taucht hier tatsächlich nicht auf. Wir bemerken, dass sich das hier berechnete Ergebnis richtig in dem Sinne verhält, dass

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) \rightarrow \delta(x_f - x_i) \quad \text{für} \quad t_f \rightarrow t_i, \quad (51)$$

denn bei Funktionen der Art $\frac{1}{\epsilon\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\epsilon^2}}$ handelt es sich um Darstellungen der Dirac'schen δ -Funktion. Des Weiteren sehen wir, dass ein zum Zeitpunkt t_i lokalisiertes Teilchen für $t_f > t_i$ zerfließt, so wie wir es erwarten.

Abschließend können wir für Gl. (50) auch einen Zusammenhang zur klassischen Trajektorie herleiten. Wie wir wissen, ist das Wirkungsfunktional

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \dot{x}^2 \quad \xrightarrow[\text{Gleichungen}]{\text{Euler-Lagrange}} \quad \frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = m \dot{x} = 0, \quad (52)$$

und die Lösung dieser Gleichung ist offensichtlich $\dot{x}_{cl}(t) = v = \text{const.}$ Somit gilt für die Wirkung der klassischen Trajektorie

$$S[x_{cl}] = \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{1}{2} m \dot{x}_{cl}^2 = \frac{1}{2} m v^2 (t_f - t_i) \quad \text{mit} \quad v = \frac{x_f - x_i}{t_f - t_i}, \quad (53)$$

das heißt

$$S[x_{cl}] = \frac{1}{2}m \left(\frac{x_f - x_i}{t_f - t_i} \right)^2 (t_f - t_i) = \frac{m}{2} \frac{(x_f - x_i)^2}{t_f - t_i}. \quad (54)$$

Vergleich mit Gl. (50) liefert das eingängige Ergebnis

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_f - t_i)} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]} \quad (55)$$

für den Propagator des freien Teilchens.

5 Der harmonische Oszillator

In diesem abschließenden Kapitel wollen wir eine der zweifelsohne wichtigsten Strukturen der gesamten Physik mit Hilfe des Pfadintegral-Formalismus' behandeln - den harmonischen Oszillator. Auch hier wollen wir den entsprechenden quantenmechanischen Zeitentwicklungsoperator (Propagator) berechnen.

5.1 Das Pfadintegral für den harmonischen Oszillator

Um den Propagator gemäß Gl. (35) zu berechnen, benötigen wir die Lagrange-Funktion des betrachteten Systems. Im Sinne größerer Allgemeinheit betrachten wir einen eindimensionalen harmonischen Oszillator, der zusätzlich mit einer äußeren Quelle wechselwirkt. Die entsprechende Lagrange-Funktion ist

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + Jx \quad (56)$$

mit der Wirkung

$$S = \int dt L,$$

wobei der Zusatz Jx beispielsweise ein zeitabhängiges externes Feld $J(t)$ beschreiben könnte, das eine Kraft auf einen elektrisch geladenen Oszillator ausübt. Wir werden die folgenden Berechnungen mit diesem Zusatzterm ausführen. Sind wir an den Ergebnissen für den einfachen harmonischen Oszillator interessiert, so lassen wir einfach $J(t) \rightarrow 0$ gehen. Es sei noch bemerkt, dass für den Fall, dass J zeitunabhängig ist, Gl. (56) umgeschrieben werden kann zu

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + Jx \\ &= \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x - \frac{J}{m\omega^2} \right)^2 + \frac{J^2}{2m\omega} \\ &= \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 \bar{x}^2 + \frac{J^2}{2m\omega} \quad \text{mit} \quad \bar{x} = x - \frac{J}{m\omega^2}. \end{aligned} \quad (57)$$

Der Term $J^2/2m\omega^2$ beschreibt also lediglich die Verschiebung der Nullpunktenergie, so dass bei Berechnungen mit dieser Lagrange-Funktion dieselben Ergebnisse erhalten werden wie für den einfachen harmonischen Oszillator. Um

tatsächlich eine größere Klasse physikalisch interessanter Systeme zu erfassen, ist es also sinnvoll J als zeitabhängig anzunehmen.

Die klassische Bahn des hier zu untersuchenden Systems erhalten wir durch Berechnung der Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad m\ddot{x}_{cl} + m\omega^2 x_{cl} - J = 0, \quad (58)$$

während das Pfadintegral bekanntlich durch

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = A \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \quad (59)$$

gegeben ist. Wie bereits besprochen liegen die wesentlichen Beiträge zum Pfadintegral in der Umgebung von $x_{cl}(t)$. Darum definieren wir

$$x(t) = x_{cl}(t) + \eta(t), \quad (60)$$

wobei wir $\eta(t)$ als Fluktuationen um die klassische Bahn herum interpretieren können. Wir setzen Gl. (60) in das Wirkungsfunktional ein und bestimmen die Taylor-Entwicklung um x_{cl} :

$$\begin{aligned} S[x] = S[x_{cl} + \eta] &= S[x_{cl}] + \int dt \eta(t) \left. \frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} \right|_{x=x_{cl}} + \\ &+ \frac{1}{2!} \int dt_1 dt_2 \eta(t_1) \eta(t_2) \left. \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t_1) \delta x(t_2)} \right|_{x=x_{cl}}. \end{aligned} \quad (61)$$

Wegen Gl. (58) verschwindet der mittlere Summand sofort, im letzten Summanden führen wir die Funktionalableitung explizit aus und erhalten

$$S[x] = S[x_{cl}] + \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt (m\dot{\eta}^2 - m\omega^2 \eta^2), \quad (62)$$

wobei wir beachten, dass $\eta(t)$ die Randbedingungen $\eta(t_i) = \eta(t_f) = 0$ erfüllen muss.

Bedenken wir noch, dass die Summation über alle Pfade äquivalent zur Summation über alle Fluktuationen ist, dass also die Integration über $\mathcal{D}x$ einfach durch eine Integration über $\mathcal{D}\eta$ ersetzt werden kann, so hat das zu berechnende Pfadintegral des harmonischen Oszillators die Form

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = A e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]} \int \mathcal{D}\eta e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt (m\dot{\eta}^2 - m\omega^2 \eta^2)}. \quad (63)$$

Zur Berechnung gibt es nun mehrere Möglichkeiten. Ausgesprochen übersichtlich ist die

5.2 Lösung durch Fourier-Entwicklung.

Als erstes substituieren wir $t \rightarrow t - t_i$ und erhalten so

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = A e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]} \int \mathcal{D}\eta e^{\frac{i}{2\hbar} \int_0^T dt (m\dot{\eta}^2 - m\omega^2 \eta^2)}, \quad (64)$$

wobei $T = t_f - t_i$ und $\eta(0) = \eta(T) = 0$ ist. Darum liegt es nahe, die Fluktuationen η als Fourier-Reihen der Form

$$\eta(t) = \sum_n a_n \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (65)$$

zu entwickeln. Wenden wir Gl. (65) auf den Integranden aus Gl. (64) an, so sehen wir, dass

$$\begin{aligned} \int_0^T dt \dot{\eta}^2 &= \sum_{m,n} \int_0^T dt a_n a_m \left(\frac{n\pi}{T}\right) \left(\frac{m\pi}{T}\right) \cos\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \cos\left(\frac{m\pi t}{T}\right) \\ &= \frac{T}{2} \sum_n \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 a_n^2 \end{aligned} \quad (66)$$

und

$$\begin{aligned} \int_0^T dt \eta^2(t) &= \sum_{m,n} \int_0^T dt a_n a_m \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \sin\left(\frac{m\pi t}{T}\right) \\ &= \frac{T}{2} \sum_n a_n^2 \end{aligned} \quad (67)$$

sind. Nun ist die Integration über alle möglichen $\eta(t)$ äquivalent zur Integration über alle Werte für die Koeffizienten a_n . Gehen wir nun zur diskretisierten Form des Pfadintegrals über, so unterteilen wir die Trajektorie in N Intervalle, so dass es $N - 1$ „Zwischenzeitpunkte“ gibt. Da die Gesamtzahl der Freiheitsgrade des Systems sich nicht ändern kann, sind auch nur $N - 1$ Koeffizienten a_n unabhängig von einander. Wir transformieren das Pfadintegral dementsprechend um in

$$\begin{aligned} U(x_f, t_f; x_i, t_i) &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} A' e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]} \int da_1 \cdots da_{N-1} e^{\frac{i}{2\hbar} \sum_{n=1}^{N-1} \left(\frac{T}{2} \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 m a_n^2 - \frac{T}{2} m \omega^2 a_n^2\right)} \\ &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} A' e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]} \int da_1 \cdots da_{N-1} e^{\frac{imT}{4\hbar} \sum_{n=1}^{N-1} \left(\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2\right) a_n^2}, \end{aligned} \quad (68)$$

wobei ein eventueller Vorfaktor, der von der Jacobi-Determinante der Transformation $\eta \rightarrow a_n$ herrührt, in der geänderten Konstanten A' enthalten ist. Gl. (68) ist nichts anderes als ein Produkt entkoppelter Gauß-Integrale, die leicht berechnet werden können:

$$\begin{aligned} \int da_n e^{\frac{imT}{4\hbar} \left(\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2\right) a_n^2} &= \left(\frac{4\pi i \hbar}{mT}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2\right)^{-\frac{1}{2}} \\ &= \left(\frac{4\pi i \hbar}{mT}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{n\pi}{T}\right)^{-1} \left(1 - \left(\frac{\omega T}{n\pi}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (69)$$

Einsetzen in Gl. (68) ergibt

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} A'' e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]} \prod_{n=1}^{N-1} \left(1 - \left(\frac{\omega T}{n\pi}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (70)$$

und mit der Identität (Produktformel von Wallis [2])

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N-1} \left(1 - \left(\frac{\omega T}{n\pi} \right)^2 \right) = \frac{\sin \omega T}{\omega T} \quad (71)$$

folgt

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} A'' e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]} \left(\frac{\sin \omega T}{\omega T} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (72)$$

Die Konstante A'' können wir nun bestimmen, wenn wir beachten, dass für $\omega \rightarrow 0$ das diskrete Pfadintegral des harmonischen Oszillators (Gl. (68)) die Form des Pfadintegrals für ein freies Teilchen (Gl. (46)) annimmt. In Abschnitt 4.3 berechneten wir

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_f - t_i)} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]} \quad (73)$$

für das freie Teilchen. Durch Vergleich sehen wir, dass A'' gegeben ist durch

$$\lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} A'' = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (74)$$

wobei wir beachtetten, dass nach einmaliger Anwendung der Regel von l'Hospital

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \left(\frac{\sin \omega T}{\omega T} \right) = 1 \quad (75)$$

gilt. So erhalten wir für den *Propagator des verallgemeinerten harmonischen Oszillators*

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]}, \quad (76)$$

wobei wir bemerken, dass die verallgemeinerte Fassung des Problems durch den Zusatzterm Jx nur im Ausdruck $S[x_{cl}]$ zum Tragen kommt.

6 Abschlussbemerkungen

Abgesehen von den hier behandelten Anwendungen wurde lediglich das Wasserstoffproblem analytisch mit dem Pfadintegralformalismus gelöst. 1978 gelang dies nach mehrjähriger Arbeit dem deutschen Physiker H. Kleinert, der Post-doc bei Feynman gewesen war [3]. Es stellt sich offensichtlich die Frage nach den besonderen Vorzügen des Pfadintegralformalismus.

Bekanntlich erlaubt auch die Schrödinger-Quantenmechanik eine analytische Behandlung der Probleme nur in sehr wenigen Fällen. Wenn eine analytische Lösung nicht möglich ist, stehen jedoch ausgearbeitete Methoden der Störungstheorie zur Verfügung. Als Bedingung für ihre Anwendung muss man im betrachteten Hamilton-Operator einen Term identifizieren können, der nur eine kleine Störung eines vereinfachten Problems darstellt. In vielen Fällen ist dies

möglich, und man erhält durchaus zufriedenstellende Lösungen. Für kernphysikalische Berechnungen jedoch, die die starke Wechselwirkung einbeziehen, stößt man an die Grenzen der Störungstheorie. Einen Ausweg stellt der Pfadintegralformalismus gepaart mit den Möglichkeiten der heutigen computergestützten numerischen Mathematik dar. Man stellt das Pfadintegral mit dem „genauen“ Hamilton-Operator auf und diskretisiert Raum und Zeit, das heißt, man bildet ein Raum-Zeit-Gitter. Die Dynamik der Wellenfunktion kann dann mit sog. *Monte-Carlo-Methoden* berechnet werden, wobei man trotz der hohen Leistung heutiger Rechnersysteme nicht über Gittergrößen von 32^3 in den Raumdimensionen und 40 in der Zeitdimension hinauskommt. Für die Zukunft werden dennoch sehr interessante Ergebnisse aus diesem noch relativ jungen Gebiet der numerischen Theoretischen Physik, das auch als *Gitter-QCD* bezeichnet wird, erwartet.

Die in dieser Seminararbeit gegebene Einführung in das Feynman'sche Pfadintegral stützt sich im Wesentlichen auf die vorzügliche Einführung von A. Das [4]. Weitere gut verständliche Zugänge in die Welt des Pfadintegrals bieten auch R. P. Feynman [5] und J. J. Sakurai [6]. Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. Stefan Scherer, der mich mit größtem Engagement bei der Vorbereitung des Seminarvortrages und dieser Seminararbeit unterstützt hat.

Literatur

- [1] R. P. Feynman, *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics*, Rev. Mod. Phys. **20**, 367 (1948).
- [2] H. Fischer und H. Kaul, *Mathematik für Physiker, Band 2*, (Teubner, Stuttgart, 1998), S. 141.
- [3] H. Kleinert, *Pfadintegrale in Quantenmechanik, Statistik und Polymerphysik*, (BI-Wiss. Verl., Mannheim, 1993).
- [4] A. Das, *Field Theory: A Path Integral Approach*, (World Scientific, Singapore, 1993).
- [5] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [6] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics Revised Edition*, (Addison-Wesley, Reading, MA, 1994), Abschnitt 2.5.