Die Pfadintegral-Quantisierung

Die gesamte bisherige Formulierung der Quantenmechanik beruhte auf der Methode der kanonischen Quantisierung, im Zuge derer man, ausgehend vom Hamilton-Formalismus der theoretischen Mechanik, die Koordinaten und Impulse zu Operatoren erhebt.
Hier geht es nun um eine alternative Methode, die auf dem Lagrange-Formalismus aufbaut und in der die Koordinaten und Geschwindigkeiten einfache Funktionen bleiben. Vorteil dabei ist die anschauliche Interpretation sowie eine tiefgreifende Verbindung zur statistischen (Quanten-) Mechanik.

Wir betrachten die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, ein Teilchen, das zur Zeit t_0 am Orte q_0 anzutreffen war, zur Zeit t_f am Orte q_f anzutreffen:

$$K(q_f, q_0; t_f, t_0) = \langle q_f, t_f | q_0, t_0 \rangle .$$

Es seien die $|q_i, t_i\rangle$ Eigenzustände des Ortsoperators zur Zeit t_i, $q(t_i)\,|q_i, t_i\rangle = q_i\,|q_i, t_i\rangle$, und normiert,

$$\mathbb{1} = \int dq\; |q, t\rangle\langle q, t| \quad .$$

Außerdem soll im Folgenden gelten $t_0 < t_1 < \ldots < t_N \equiv t_f$.

Wir beginnen, die Übergangsamplitude durch das Einschieben von Eins-Operatoren in beliebig viele Zeitschritte aufzuteilen,

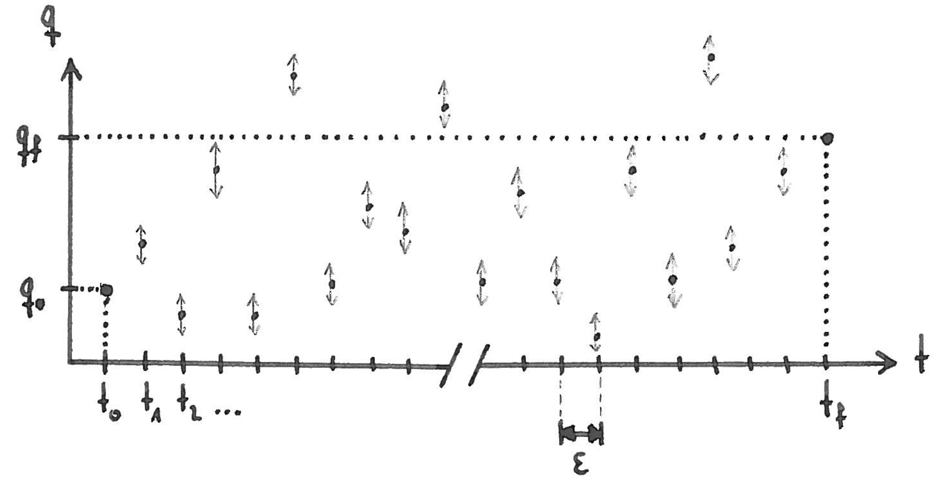
$$K(q_f, q_0; t_f, t_0) = \langle q_f, t_f | q_0, t_0 \rangle$$

$$= \int dq_1\, \langle q_f, t_f | q_1, t_1 \rangle \langle q_1, t_1 | q_0, t_0 \rangle$$

$$= \int dq_1 \int dq_2 \, \langle q_f, t_f | q_2, t_2 \rangle \langle q_2, t_2 | q_1, t_1 \rangle \langle q_1, t_1 | q_0, t_0 \rangle$$

$$= \int dq_1 \int dq_2 \cdots \int dq_{N-1} \prod_{m=0}^{N-1} \langle q_{m+1}, t_{m+1} | q_m, t_m \rangle \,,$$

und wählen die Zeitschritte äquidistant, $t_m = t_0 + m \cdot \varepsilon$, $t_f - t_0 = N \cdot \varepsilon$. Offenbar berechnen wir hier N Übergangsamplituden zwischen diskreten Punkten, wobei über die jeweiligen Ortskoordinaten abintegriert wird.



Abspaltung der Zeitentwicklung von den Zuständen:

$$|q_m, t_m\rangle = e^{iHt_m} |q_m\rangle \qquad (\hbar = 1)$$

$$\longrightarrow \quad \langle q_{m+1}, t_{m+1} | q_m, t_m \rangle = \langle q_{m+1} | e^{-iHt_{m+1}} e^{iHt_m} | q_m \rangle = \langle q_{m+1} | e^{-iH\varepsilon} | q_m \rangle$$

$$= \int dp_m \, \langle q_{m+1} | p_m \rangle \langle p_m | e^{-iH\varepsilon} | q_m \rangle$$

Der Hamilton-Operator ist hier noch eine Funktion des Orts- und des Impulsoperators, $H = H(q,p)$. Nach rechts angewand auf den Eigenzustand wird daraus eine Funktion der Eigenwerte,

$$e^{-i\varepsilon H(q,p)} |q_m\rangle = e^{-i\varepsilon H(q_m, p_m)} |q_m\rangle \,.$$

$$\langle q_{m+1}, t_{m+1} | q_m, t_m \rangle = \int dp_m \; e^{-i\varepsilon H(q_m, p_m)} \underbrace{\langle q_{m+1} | p_m \rangle}_{e^{i q_{m+1} p_m}} \underbrace{\langle p_m | q_m \rangle}_{e^{-i q_m p_m}}$$

$$= \int dp_m \; \exp\left[-i\varepsilon\left(H(q_m, p_m) - p_m \frac{q_{m+1} - q_m}{\varepsilon}\right)\right]$$

Alles zusammen und mit $\prod_i e^{a_i} = e^{\sum_i a_i}$:

$$K(q_f, q_0; t_f, t_0) = \int dp_0 \int dq_1 \int dp_1 \dots \int dq_{N-1} \int dp_{N-1} \; \exp\left[-i\varepsilon \sum_{m=0}^{N-1} \left(H(q_m, p_m) - p_m \frac{q_{m+1} - q_m}{\varepsilon}\right)\right].$$

Jetzt wird der Grenzfall $\varepsilon \to 0$, $N \to \infty$ vollzogen; dabei geht der Differenzenquotient in eine Ableitung und die Summe in ein Integral über,

$$\sum_{m=0}^{N-1} \left(H(q_m, p_m) - p_m \frac{q_{m+1} - q_m}{\varepsilon}\right) \xrightarrow[N \to \infty]{\varepsilon \to 0} \int_{t_0}^{t_f} dt \left(H(q, p) - p \dot{q}\right),$$

wobei $q = q(t)$, $p = p(t)$ einfache Funktionen sind — keine Operatoren. Außerdem definieren wir das „Integralmaß"

$$\mathcal{D}q\, \mathcal{D}p := \lim_{\varepsilon \to 0} \left(\mathcal{N}(\varepsilon) \; dp_0 \; dq_1 dp_1 \; dq_2 dp_2 \dots dq_{N-1} dp_{N-1} \right), \quad \mathcal{N}(\varepsilon): \text{ Normierung.}$$

$$\Rightarrow \quad \underline{K(q_f, q_0; t_f, t_0) = \int_{q(t_0) = q_0}^{q(t_f) = q_f} \mathcal{D}q\, \mathcal{D}p \; e^{i \int_{t_0}^{t_f} dt \, (p\dot{q} - H(q, p))}}$$

Für den Fall, dass die Hamilton-Funktion die einfache Form

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

hat, lässt sich das Integral über p ausführen (Gauß'sches Integral) und man erhält

$$K(q_f, q_0; t_f, t_0) = \int_{q_0}^{q_f} \mathcal{D}q \; e^{iS[q,\dot{q}]}$$

mit der klassischen Wirkung

$$S[q,\dot{q}] = \int_{t_0}^{t_f} dt \; L(q,\dot{q})$$

und der Lagrange-Funktion

$$L(q,\dot{q}) = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q) .$$

<u>Interpretation</u>: Man erhält die quantenmechanische Übergangsamplitude durch Summation über alle möglichen Pfade von q_0 nach q_f, jeweils gewichtet mit der Wirkung entlang dieser Pfade.
Im klassischen Limes werden die Pfade in der Nähe der klassischen Trajektorie mit dem größten Anteil in die Summe eingehen.

Die obige Herleitung lässt sich verallgemeinern auf die Erwartungswerte zeitgeordneter Operatoren, bspw.

$$\langle q_f, t_f | \mathcal{T}(q(t_1)\, q(t_2) \ldots q(t_n)) | q_0, t_0 \rangle = \int_{q(t_0)=q_0}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}q \; q(t_1)\, q(t_2) \ldots q(t_n) \; e^{iS[q,\dot{q}]} .$$

<u>Bem.</u>
- Es ist ein bis heute ausstehendes Problem, das überabzählbare Integral $\int \mathcal{D}q$ mathematisch sauber im Rahmen der Maßtheorie zu definieren.
- Man kann sich eine tiefgreifende, fundamentale Verbin-

dung zur statistischen Physik ausmalen, wenn man die obige Pfadintegral-Darstellung des Propagators mit der kanonischen Zustandssumme,

$$Z_\beta \sim \int dp^f \, dq^f \; e^{-\beta H(q,p)} ,$$

in Zusammenhang zu bringen versucht.

<u>Bsp.</u> Pfadintegral des freien Teilchens

Die Lagrange-Funktion des freien Teilchens ist einfach

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

wobei die Wirkung $S = \int dt\, L$ im diskreten Fall übergeht zu

$$S_\varepsilon = \sum_{m=0}^{N-1} \varepsilon \cdot \frac{m}{2}\left(\frac{x_{m+1}-x_m}{\varepsilon}\right)^2 .$$

$$\longrightarrow \quad K_\varepsilon(x_f, x_0; t_f, t_0) = \mathcal{N}(\varepsilon) \int dx_1 \int dx_2 \ldots \int dx_{N-1} \; \exp\left[\frac{im}{2\varepsilon} \sum_{m=0}^{N-1} (x_{m+1}-x_m)^2\right]$$

$$a \equiv \frac{im}{2\varepsilon} \in i\mathbb{R}$$

$$= \mathcal{N}(\varepsilon) \int dx_{N-1} \ldots \int dx_2 \; e^{a\sum_{m=2}^{N-1}(x_{m+1}-x_m)^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \; e^{a\left[(x_2-x_1)^2 + (x_1-x_0)^2\right]}}_{i\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sqrt{\frac{1}{a}}\; e^{\frac{a}{2}(x_2-x_0)^2}}$$

$$= \mathcal{N}(\varepsilon)\; i\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sqrt{\frac{1}{a}} \int dx_{N-1} \ldots \int dx_3 \; e^{a\sum_{m=3}^{N-1}(x_{m+1}-x_m)^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \; e^{a\left[(x_3-x_2)^2 - \frac{(x_2-x_0)^2}{2}\right]}}_{i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\sqrt{\frac{1}{a}}\; e^{\frac{a}{3}(x_3-x_0)^2}}$$

$$\stackrel{!}{=} \mathcal{N}(\varepsilon)\; i\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sqrt{\frac{1}{a}} \cdot i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\sqrt{\frac{1}{a}} \int dx_{N-1} \dots \int dx_4\, e^{a\sum\limits_{m=4}^{N-1}(x_{m+1}-x_m)^2} \underbrace{\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_3\; e^{a\left[(x_4-x_3)^2 + \frac{(x_3-x_0)^2}{3}\right]}}_{i\sqrt{\frac{3\pi}{4}}\sqrt{\frac{1}{a}}\, e^{\frac{a}{4}(x_4-x_0)^2}}$$

Es ist ein Muster zu erkennen: Nach der Integration über x_k verbleibt im Exponenten der Ausdruck

$$\frac{a}{k+1}(x_{k+1}-x_0)^2$$

und es entsteht ein weiterer Vorfaktor $i\sqrt{\frac{k}{k+1}\pi}\sqrt{\frac{1}{a}}$.

$$\longrightarrow \quad K_\varepsilon(x_f, x_0; t_f, t_0) = \underbrace{\mathcal{N}(\varepsilon) \prod_{k=1}^{N-1}\left(i\sqrt{\frac{k\pi}{k+1}}\sqrt{\frac{1}{a}}\right)}_{\tilde{\mathcal{N}}(\varepsilon)} e^{\frac{a}{N}(x_N-x_0)^2},$$

$$x_N \equiv x_f, \quad N = \frac{t_f - t_0}{\varepsilon}, \quad \frac{a}{N} = \frac{im}{2(t_f-t_0)}$$

$$\Rightarrow \quad K(x_f, x_0; t_f, t_0) = \lim_{\varepsilon \to 0} K_\varepsilon(x_f, x_0; t_f, t_0) = \tilde{\mathcal{N}}(t_f, t_0)\, e^{\frac{im}{2}\frac{(x_f-x_0)^2}{t_f-t_0}}$$

Normierung:

$$\tilde{\mathcal{N}}(t_f, t_0) \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_f\; e^{\frac{im}{2}\frac{(x_f-x_0)^2}{t_f-t_0}} = \tilde{\mathcal{N}}(t_f, t_0)\sqrt{\frac{2\pi i(t_f-t_0)}{m}} \stackrel{!}{=} 1$$

(Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t_f an irgendeinem Ort x_f anzutreffen, soll 1 sein.)

$$\Rightarrow \quad \underline{\underline{K(x_f, x_0; t_f, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t_f-t_0)}}\; e^{\frac{im}{2}\frac{(x_f-x_0)^2}{t_f-t_0}}}}$$

zum Vergleich: ohne Benutzung des Pfadintegrals

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad , \qquad H|k\rangle = \frac{k^2}{2m}|k\rangle \qquad (\hbar \equiv 1, \text{ immer noch})$$

Zeitentwicklungsoperator: $\quad U(t_f, t_0) = e^{-i(t_f - t_0)H}$

$$\longrightarrow \quad K(x_f, x_0; t_f, t_0) = \langle x_f | U(t_f, t_0) | x_0 \rangle$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{dk'}{2\pi} \underbrace{\langle x_f | k \rangle}_{e^{ikx_f}} \langle k | \underbrace{e^{-i(t_f - t_0)H} |k'\rangle}_{e^{-i(t_f - t_0)\frac{k'^2}{2m}} |k'\rangle} \underbrace{\langle k' | x_0 \rangle}_{e^{-ik'x_0}}$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{dk'}{2\pi} \, e^{i(kx_f - k'x_0)} \, e^{-\frac{ik'^2}{2m}(t_f - t_0)} \underbrace{\langle k | k' \rangle}_{\delta(k-k')}$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi} \, e^{ik(x_f - x_0)} \, e^{-\frac{ik^2}{2m}(t_f - t_0)}$$

$$= \underline{\underline{\sqrt{\frac{m}{2\pi i (t_f - t_0)}} \, e^{\frac{im}{2} \frac{(x_f - x_0)^2}{t_f - t_0}}}} \qquad \checkmark$$