Die Pfadintegraldarstellung in der Quantenmechanik

Martin-I. Trappe Boris Houska

31. März 2006

(Vortrag im Dezember 2004)

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Im Jahre 1942 entwickelte Richard P. Feynman den Pfadintegralformalismus der Quantenmechanik, der sich durch seine Anschaulichkeit, insbesondere gegenüber der Schrödingertheorie, auszeichnet. Das große Interesse an dem Feynman'schen Formalismus resultiert aber vielmehr aus dem breiten Anwendungsspektrum der Pfadintegrale in verschiedensten Bereichen und der wachsenden Bedeutung numerischer Berechnungen.
Feynmans Grundidee bei der Entwicklung des Pfadintegralformalismus war anzunehmen, dass ein Teilchen in der Quantenmechanik nicht einen, durch das Prinzip der stationären Wirkung ausgezeichneten, klassischen Weg, sondern vielmehr alle möglichen Wege (Pfade) einschlagen kann, welche aber unterschiedlich stark gewichtet werden. Die Summe der Beiträge aller gewichteten Pfade zwischen zwei Orten ergibt dann die Amplitude der Gesamtwahrscheinlichkeit des Ortsübergangs (Propagation) in einer vorgegebenen Zeit. Genau diese Summe der Wahrscheinlichkeitsamplituden über alle Pfade, die im Grenzübergang als Integral dargestellt werden kann, wird über das Feynman'sche Pfadintegral berechnet. Als Gewicht wird jedem Pfad eine Phase zugeordnet, welche durch die Wirkung des Pfades gemessen in der quantenmechanischen Einheit $\hbar$ bestimmt ist. Dies führt zu einer stärkeren Berücksichtigung von Pfaden nahezu gleicher Wirkung (konstruktive Interferenz bei stationärer Wirkung bzw. Phase). Insbesondere bei den makroskopischen Systemen der Newton'schen Mechanik führen die sehr großen Wirkungen (gemessen in $\hbar$) dann dazu, dass praktisch nur ein ausgezeichneter Pfad beiträgt - nämlich der klassische Pfad. Das Pfadintegral eignet sich darüber hinaus sehr gut für numerische Berechnungen in der Thermodynamik, Statistik, Quantenfeldtheorie, etc. - im Gegensatz zu der Differentialgleichung der Schrödingertheorie. Der nichtrelativistische Pfadintegralformalismus ist letztlich zur Schrödingertheorie äquivalent. Die Vorteile ergeben sich jedoch aus der Integraldarstellung.
In diesem Skript werden wir zunächst das Pfadintegral aus der Schrödingergleichung ableiten und einige anschauliche Aspekte dieser Darstellung diskutieren, wobei wir uns ausschließlich auf den nichtrelativistischen Fall beschränken. Danach werden wir den Pfadintegralformalismus am Beispiel des freien Teilchens vorführen und eine weitere Vorgehensweise zum Lösen von Pfadintegralen anhand des quantenharmonischen Oszillators skizzieren. Zum Schluss haben wir noch einmal den Aharonov-Bohm-Effekt mit Hilfe des Pfadintegralformalismus dargestellt. Mit dieser Auswahl an Beispielen kann natürlich nur ein sehr kleiner Bereich der zahlreichen Anwendungen des Pfadintegrals behandelt werden, die wir am Ende unseres Skriptes in einem Ausblick zusammenfassen.

2 Der Propagator der Schrödingergleichung

Definition 2.1 (Propagator) *Wir betrachten zunächst ganz allgemein die zeitabhängige Schrödingergleichung für eine Zustandsfunktion* $\psi : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$*:*

$$(i\hbar\partial_t - H)\ \psi(x,t) = 0. \tag{1}$$

Analog zur Greensfunktion, die schon aus der Elektrodynamik-Vorlesung bekannt ist, führen wir hier eine Funktion (darf i.a. aber auch eine δ *- Distribution sein)*

$$K : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$$

ein, welche über die folgende Differentialgleichung definiert wird und der Greensfunktion der Schrödingergelichung entspricht (Diese Funktion wird auch als Propagator der Schrödingergleichung bezeichnet):

$$(i\hbar\partial_t - H)\ K(x,t,x_0,t_0) = i\hbar\delta^3(x-x_0)\delta^3(t-t_0).$$

Unter geeigneten Voraussetzungen an K (Differenzierbarkeit, Randbedingungen) , auf die wir hier nicht näher eingehen wollen, ist K zusammen mit der Anfangsbedingung $K(x,t_0,x_0,t_0) = \delta^3(x-x_0)$ *wohldefiniert.*

Anmerkung Für die oben definierte Funktion K sind auch δ-Distributionen zulässig. Man sieht auch bereits an der Anfangsbedingung, dass K im allgemeinen eine Distribution sein kann, da dies zumindest am Zeitpunkt t_0 schon mal der Fall ist.

Satz 2.1 (Lösung der Schrödingergleichung) *Eine Zustandsfunktion* $\psi : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$*, die eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung (1) ist, lässt sich mit dem zugehörigen Propagator* $K : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$*, der in Definiton 2.1 eingeführt wurde, in der Form*

$$\psi(x,t) = \int_{\mathbb{R}^3} K(x,t,x_0,t_0)\psi(x_0,t_0)d^3x_0 \tag{2}$$

schreiben, wobei $\psi(x_0,t_0)$ *eine Zustandsfunktion zu einem Anfangszeitpunkt* t_0 *ist.*

Beweis Es gilt:

$$\begin{aligned}(i\hbar\partial_t - H)\,\psi(x,t) &= (i\hbar\partial_t - H)\int_{\mathbb{R}^3} K(x,t,x_0,t_0)\psi(x_0,t_0)d^3x_0 \\ &= i\hbar\int_{\mathbb{R}^3} \delta^3(x-x_0)\delta(t-t_0)\psi(x_0,t_0)d^3x_0 \\ &= i\hbar\delta(t-t_0)\psi(x,t_0) = 0 \quad , \textit{für } t \neq t_0 \end{aligned} \tag{3}$$

Das heißt für $t \neq t_0$ erfüllt (2) die Schrödingergleichung. Speziell für $t = t_0$ gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^3} K(x,t_0,x_0,t_0)\psi(x_0,t_0)d^3x_0 = \int_{\mathbb{R}^3} \delta^3(x-x_0)\psi(x_0,t_0)d^3x_0 = \psi(x,t_0) \tag{4}$$

Damit ist die Behauptung für alle t gezeigt. □

Satz 2.2 (Der Propagator als Matrixelement) *Sei K der oben definierte Propagator, $U(t,t_0) := e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$ der Zeitentwicklungsoperator und $|x\rangle$ bzw. $|x_0\rangle$ Ortseigenfunktionen. Dann gilt:*

$$K(x,t,x_0,t_0) = \langle x| \, U(t,t_0) \, |x_0\rangle$$

Beweis Seien $\varphi_n : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{C}$ die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators $\hat{H}$ und $E_n \in R$ die zugehörigen Eigenwerte. Dann lösen die Funktionen

$$\phi_n : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}\,, \; \phi_n(x,t) := \varphi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{5}$$

die zeitabhängige Schrödingergleichung und bilden eine vollständige orthonormierte Basis. Der Propagator K kann bezüglich dieser Basis dargestellt werden durch

$$K(x,t,x_0,t_0) = \sum_n a_n(x_0,t_0)\varphi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{6}$$

Dabei sollen $a_n : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$ die entsprechenden Koeffizienten der Darstellung sein. Die Anfangsbedingung lautet

$$K(x,t_0,x_0,t_0) = \sum_n a_n(x_0,t_0)\varphi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t_0} = \delta^3(x-x_0) \tag{7}$$

Hier erkennt man, dass die rechte Seite der Gleichung nicht von t_0 abhängt. Das bedeutet es existiert eine Funktion $b : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{C}$, so dass $a_n(x_0,t_0) = b_n(x_0)e^{\frac{i}{\hbar}E_n t_0}$ erfüllt ist. Einsetzen ergibt:

$$\delta^3(x-x_0) = \sum_n b_n(x_0)\varphi_n(x) \tag{8}$$

Diese Gleichung wird durch $b_n(x_0) = \varphi_n^*(x_0)$ erfüllt (Vollständigkeitsrelation). Damit haben wir eine Darstellung von K

$$\begin{aligned} K(x,t,x_0,t_0) &= \sum_n a_n(x_0,t_0)\varphi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \\ &= \sum_n \varphi_n^*(x_0)\varphi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \end{aligned} \tag{9}$$

welche die Gleichung (2) samt Anfangsbedingung erfüllt. Nun braucht man nur noch weiter umzuformen:

$$\begin{aligned}
K(x,t,x_0,t_0) &= \sum_n \varphi_n^*(x_0)\varphi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \\
&= \sum_n \langle x|\, E_n\rangle \langle E_n|\, x_0\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \\
&= \sum_n \langle x|\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\, |E_n\rangle \langle E_n|\, x_0\rangle \\
&= \sum_n \langle x|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\, |E_n\rangle \langle E_n|\, x_0\rangle \\
&= \langle x|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\, |x_0\rangle \\
&= \langle x|\, U(t,t_0)\, |x_0\rangle
\end{aligned} \tag{10}$$

Damit ist die Behauptung gezeigt. □

Satz 2.3 (Kompositionsgesetz für den Propagator) *Sei K der oben definierte Propagator, $(t_k)_{k\in N}$ eine beliebige reelle Folge mit $t_0 := t_0, t_{k+1} > t_k$ für $k = 0,1...N\text{-}1$ und $t_N := t$ (also ein Zeitgitter) sowie $x_N := x \in \mathbb{R}^3$ und $x_0 := x_0 \in \mathbb{R}^3$ fest. Dann gilt:*

$$K(x,t,x_0,t_0) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_{N-1} ... \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \prod_{k=0}^{N-1} K(x_{k+1},t_{k+1},x_k,t_k)$$

Beweis

$$\begin{aligned}
K(x,t,x_0,t_0) &= \langle x|\, U(t,t_0)\, |x_0\rangle \\
&= \langle x|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\, |x_0\rangle
\end{aligned} \tag{11}$$

Da [H,H]=0 gilt, darf man die Funktionalgleichung für die e - Funktion folgendermaßen anwenden :

$$\begin{aligned}
e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_N-t_0)} \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}((t_N-t_{N-1})+.......+(t_1-t_0))} \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_N-t_{N-1})-.......-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_1-t_0)} \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_N-t_{N-1})}.......e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_1-t_0)} \\
&= \prod_{k=0}^{N-1} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_{k+1}-t_k)}
\end{aligned} \tag{12}$$

Jetzt kann die Gleichung (12) in die Gleichung (11) eingesetzt und anschließend die Vollständigkeitsrelation für die Ortsfunktionen (N-1) - mal eingeschoben werden :

$$
\begin{aligned}
K(x,t,x_0,t_0) &= \langle x| \prod_{k=0}^{N-1} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_{k+1}-t_k)} |x_0\rangle \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_{N-1} ... \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \prod_{k=0}^{N-1} \langle x_{k+1}| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_{k+1}-t_k)} |x_k\rangle \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_{N-1} ... \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \prod_{k=0}^{N-1} K(x_{k+1}, t_{k+1}, x_k, t_k) \qquad (13)
\end{aligned}
$$

Damit ist die Behauptung gezeigt. □

3 Die Pfadintegralformel von Feynman

Im folgenden soll das Ergebnis aus Satz 2.3 (Kompositionsgesetz) weiter ausgewertet werden. Aber zuerst betrachten wir kurz zur Wiederholung die Impulseigenfunktionen $\psi_p : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{C}$ und die dazugehörigen Eigenwerte $p \in \mathbb{R}^3$ in der Ortsdarstellung, welche die Eigenwertgleichung $\hat{p}\psi_p(x) = p\psi_p(x)$ erfüllen müssen:

Lemma 3.1 (Impulseigenfunktionen) *Mit den obigen Bezeichnungen gilt* $\psi_p(x) = h^{-\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p,x)}$. *Dabei ist* $(.,.) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}$ *das euklidische Skalarprodukt.*

Beweis Der Impulsoperator lautet $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$. Einsetzen ergibt:

$$
\begin{aligned}
\hat{p}\psi_p(x) = p\psi_p(x) \quad &\Leftrightarrow \quad \frac{\hbar}{i}\nabla\psi_p(x) = p\psi_p(x) \\
&\Rightarrow \quad \psi_p(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(p,x)} \qquad (14)
\end{aligned}
$$

Dabei ist $A \in \mathbb{C}$ eine Konstante, die sich z.B. aus der Vollständigkeitsrelation ergibt:

$$
\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^3} d^3p\psi_p^*(x)\psi_p(y) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3pA^*Ae^{\frac{i}{\hbar}(p,(x-y))} \\
&= h^3\, A^*A \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i(k,(x-y))} \quad , mit\ p = \hbar k \\
&= \delta^3(x-y) \qquad (15)
\end{aligned}
$$

Aus dieser Bedingung erhält man $A = h^{-\frac{3}{2}}$ und damit

$$\psi_p(x) = \langle x|\, p\rangle = h^{-\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p,x)} \qquad (16)$$

Das entspricht der Behauptung. □

Neben dem obigen Lemma werden wir im folgenden auch noch eine Formel benötigen, die auf Baker, Campbell und Hausdorff zurückgeht :

Lemma 3.2 (Baker-Campbell-Hausdorff - Formel) *Für zwei lineare Operatoren A und B sowie $0 \leq \epsilon \in \mathbb{R}$ gilt*

$$e^{\epsilon A + \epsilon B} = e^{\epsilon A} e^{\epsilon B} e^{\epsilon^2 X},$$

wobei $X = \frac{1}{2}[B, A] - \epsilon \left(\frac{1}{6}[B, [B, A]] - \frac{1}{6}[[B, A], A] + ...)...\right)$ ein Operator ist, dessen Taylorreihenentwicklung Kommutatoren von A und B enthält.

Beweis : Der Beweis kann einfach direkt geführt werden, indem man die entsprechenden Taylorreihen der auftretenden e - Funktionen bildet und ausmultipliziert. Wir führen dies hier bis zur Ordnung 2 in ϵ vor (Einen exakten Beweis findet man in [7]). Die Entwicklung der rechten Seite der Gleichung lautet:

$$e^{\epsilon A + \epsilon B} = 1 + \epsilon(A + B) + \frac{\epsilon^2}{2}(A^2 + AB + BA + B^2) + ... \tag{17}$$

Für die linke Seite gilt entsprechend:

$$\begin{aligned} e^{\epsilon A} e^{\epsilon B} e^{\epsilon^2 X} &= (1 + \epsilon A + \frac{\epsilon^2}{2!}A^2 + ...)(1 + \epsilon B + \frac{\epsilon^2}{2!}B^2 + ...)(1 + \frac{\epsilon^2}{2}[B, A] + ...) \\ &= 1 + \epsilon A + \epsilon B + \frac{\epsilon^2}{2!}[B, A] + \frac{\epsilon^2}{2!}B^2 + \frac{\epsilon^2}{2!}A^2 + \epsilon^2 AB + ... \\ &= 1 + \epsilon(A + B) + \frac{\epsilon^2}{2!}(A^2 + B^2 + 2AB + [B, A]) + ... \\ &= 1 + \epsilon(A + B) + \frac{\epsilon^2}{2!}(A^2 + AB + BA + B^2) + ... \end{aligned} \tag{18}$$

Ein Vergleich der Gleichungen (17) und (18) liefert die Behauptung. □

Die Idee der weiteren Vorgehensweise ist, die Sätze 2.2 und 2.3 (Propagator als Matrixelement des Zeitentwicklungsoperators bzw. das Kompositionsgesetz für den Propagator) zu verwenden, um einen Ausdruck für den Propagator ableiten zu können. Der folgende Satz ist etwas technisch - die Bedeutung wird aber dann im weiteren noch deutlich werden.

Satz 3.1 *Sei K der Propagator der Schrödingergleichung mit dem Hamiltonoperator $\hat{H} = T + V$ und den Operatoren T für die kinetische Energie bzw. V für das Potential, wobei T nur von dem Impulsoperator p und V nur von dem Ortsoperator x abhängen soll, und m die Masse eines Punktteichens, dann gilt unter geeigneten Voraussetzung an $\hat{H} = T + V$:*

$$K(x_{k+1}, t_{k+1}, x_k, t_k) \approx \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p_k e^{\frac{i}{\hbar} p_k (x_{k+1} - x_k)} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k \left(\frac{p_k^2}{2m} + V(x_k) \right)} \right) e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)}$$

mit $\epsilon_k = t_{k+1} - t_k \neq 0, \forall k$.

Anmerkung Wir haben die Formulierung, dass der Satz "unter geeigneten Voraussetzungen an $\hat{H} = T + V$ " gilt, deshalb gewählt, weil (zumindest uns) nicht bekannt ist, unter welchen scharfen Voraussetzungen der Satz gilt. Wir können allerdings erwähnen, dass die Forderung, dass H nach unten beschränkt ist, hinreichend ist. Wir bringen jetzt keinen mathematisch sauberen Nachweis dafür, dass diese hinreichende Bedingung wirklich gilt, sind aber dennoch bestrebt dies zumindest zu motivieren. Daher haben wir uns (für die leider etwas unsaubere, aber recht intuitive) Schreibweise mit "$\mathcal{O}(\epsilon_k^2)$" entschieden. Eine sehr gute mathematische Begründung des Pfadintegralformalismus findet man z.B. in einem Habilitationsvortrag von M.Pflaum [6] mit dem Titel "Gibt es in der Mathematik ein Pfadintegral ?".

Beweis Nach Satz 2.2 gilt (U ist wie in Satz 2.2 der Zeitentwicklungsoperator)

$$\begin{aligned} K(x_{k+1}, t_{k+1}, x_k, t_k) &= \langle x_{k+1}| \, U(t_{k+1}, t_k) \, |x_k\rangle = \langle x_{k+1}| \, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon_k} \, |x_k\rangle \\ &= \langle x_{k+1}| \, e^{-\frac{i}{\hbar}T\epsilon_k - \frac{i}{\hbar}V\epsilon_k} \, |x_k\rangle \end{aligned} \tag{19}$$

Nun ist leider im allgemeinen $[T, V] \neq 0$, weswegen man die Funktionalgleichung für die e - Funktion nicht anwenden kann. Vielmehr gilt nach Lemma 3.2

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(T+V)\epsilon_k} = e^{-\frac{i}{\hbar}T\epsilon_k} e^{-\frac{i}{\hbar}V\epsilon_k} e^{-\frac{i}{\hbar}X\epsilon_k^2}, \tag{20}$$

wobei $X = \frac{1}{2}[-\frac{i}{\hbar}T, -\frac{i}{\hbar}V] - \epsilon_k \left(\frac{1}{6}[-\frac{i}{\hbar}T, [-\frac{i}{\hbar}T, -\frac{i}{\hbar}V]] - \frac{1}{6}[[-\frac{i}{\hbar}T, -\frac{i}{\hbar}V], -\frac{i}{\hbar}V] + ...)...\right)$ ist. Einsetzen in Gleichung (19) ergibt :

$$\begin{aligned} K(x_{k+1}, t_{k+1}, x_k, t_k) &= \langle x_{k+1}| \, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon_k} \, |x_k\rangle \\ &= \langle x_{k+1}| \, e^{-\frac{i}{\hbar}T(\hat{p})\epsilon_k} e^{-\frac{i}{\hbar}V(\hat{x})\epsilon_k} e^{-\frac{i}{\hbar}X\epsilon_k^2} \, |x_k\rangle \\ &\approx \langle x_{k+1}| \, e^{-\frac{i}{\hbar}T(\hat{p})\epsilon_k} e^{-\frac{i}{\hbar}V(\hat{x})\epsilon_k} \, |x_k\rangle \, e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)} \end{aligned} \tag{21}$$

Wie schon in der obigen Anmerkung beschrieben wurde, arbeiten wir hier nicht streng mathematisch. Man kann sich aber - wie gesagt - für nach unten beschränkte Operatoren überlegen, dass man auch konsequent argumentieren kann. Im folgenden wird mit Gleichung (21) weitergerechnet, wobei die Vollständigkeitsrelation für die Impulseigenfunktionen sowie Lemma 3.1 benutzt wird :

$$
\begin{aligned}
K(x_{k+1},t_{k+1},x_k,t_k) &\approx \langle x_{k+1}|\, e^{-\frac{i}{\hbar}T(\hat{p})\epsilon_k} e^{-\frac{i}{\hbar}V(\hat{x})\epsilon_k}\,|x_k\rangle\, e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)} \\
&= \langle x_{k+1}|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k T(\hat{p})}\,|x_k\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k V(x_k)} e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)} \\
&= \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3p_k\, \langle x_{k+1}|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k \frac{\hat{p}^2}{2m}}\,|p_k\rangle\, \langle p_k\, |x_k\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k V(x_k)}\right) e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)} \\
&= \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3p_k\, \langle x_{k+1}\, |p_k\rangle\, \langle p_k\, |x_k\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k\left(\frac{p_k^2}{2m}+V(x_k)\right)}\right) e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)} \\
&= \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3p_k h^{-\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_k,x_{k+1})} h^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_k,x_k)} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k\left(\frac{p_k^2}{2m}+V(x_k)\right)}\right) e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)} \\
&= \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3p_k e^{\frac{i}{\hbar}p_k(x_{k+1}-x_k)} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k\left(\frac{p_k^2}{2m}+V(x_k)\right)}\right) e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)} \qquad (22)
\end{aligned}
$$

Damit ist die Behauptung gezeigt. □

Basierend auf Satz 3.1 kommen wir zusammen mit dem Kompositionsgesetz für den Propagator zu folgendem Satz:

Satz 3.2 (Integraldarstellung des Propagators) *Sei $V : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}$ ein gegebenes Potential. Weiter sei*

$$
S : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} \quad , \qquad S(x,p,t_0,t) := \int_{t_0}^{t} dt'[(p,\dot{x}) - H(x,p)]
$$

die klassische Wirkung für ein Teilchen der Masse m im Potential V, wobei

$$
H : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H(x,p) := \frac{p^2}{2m} + V(x)
$$

die zugehörige klassische Hamiltonfunktion ist. Wenn nun K der Propagator jener Schrödingergleichung ist, die obiges Teilchen im Potential V quantenmechanisch beschreibt, dann gilt unter geeigneten Voraussetzungen an V :

$$
K(x,t,x_0,t_0) = \left(\underset{N\to\infty}{lim}\prod_{k=1}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_k\right]\right)\left(\underset{N\to\infty}{lim}\prod_{k=0}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3p_k}{(2\pi\hbar)^3}\right]\right) e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}(x,p,t_0,t)}
$$

Beweis Man beginne mit dem Kompostitionsgesetz (Satz (2.3)) und verwende anschließend den Satz (3.1), um einen Ausdruck für den Propagator K zu bekommen (dabei werden die Bezeichnungen aus den Sätzen (2.3) und (3.1) weiterverwendet):

$$\begin{aligned}
K(x,t,x_0,t_0) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_{N-1} ... \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \prod_{k=0}^{N-1} K(x_{k+1},t_{k+1},x_k,t_k) \\
&= \left(\prod_{k=1}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_k\right]\right)\prod_{k=0}^{N-1} K(x_{k+1},t_{k+1},x_k,t_k) \\
&\approx \left(\prod_{k=1}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_k\right]\right)\prod_{k=0}^{N-1}\left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3p_k e^{\frac{i}{\hbar}p_k(x_{k+1}-x_k)} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k\left(\frac{p_k^2}{2m}+V(x_k)\right)} e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)}\right) \\
&= \left(\prod_{k=1}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_k\right]\right)\prod_{k=0}^{N-1}\left(\left[\int_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3p_k}{(2\pi\hbar)^3}\right]\left(e^{\frac{i}{\hbar}p_k(x_{k+1}-x_k)} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k\left(\frac{p_k^2}{2m}+V(x_k)\right)}\right) e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)}\right) \\
&= \left(\prod_{k=1}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_k\right]\right)\prod_{k=0}^{N-1}\left(\left[\int_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3p_k}{(2\pi\hbar)^3}\right] e^{\frac{i}{\hbar}\left[p_k(x_{k+1}-x_k)-\epsilon_k\left(\frac{p_k^2}{2m}+V(x_k)\right)\right]} e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)}\right) \\
&= \left(\prod_{k=0}^{N-1} e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)}\right)\left(\prod_{k=1}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_k\right]\right)\prod_{k=0}^{N-1}\left(\left[\int_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3p_k}{(2\pi\hbar)^3}\right] e^{\frac{i\epsilon_k}{\hbar}\left[p_k\frac{(x_{k+1}-x_k)}{\epsilon_k}-\left(\frac{p_k^2}{2m}+V(x_k)\right)\right]}\right) \\
&= \left(\prod_{k=0}^{N-1} e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)}\right)\left(\prod_{k=1}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_k\right]\right)\left(\prod_{k=0}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3p_k}{(2\pi\hbar)^3}\right]\right) e^{\sum_{k=0}^{N-1}\frac{i\epsilon_k}{\hbar}\left[p_k\frac{(x_{k+1}-x_k)}{\epsilon_k}-\left(\frac{p_k^2}{2m}+V(x_k)\right)\right]}
\end{aligned} \tag{23}$$

Bei der letzten Umformung wurde noch die Funktionalgleichung für die e - Funktion genutzt, was natürlich möglich ist, da im Exponenten nur komplexe Zahlen stehen. Man beachte, dass wir das Zeitgitter bzw. die Folge (ϵ_k) beliebig gewählt hatten. Die einzige Bedingung an diese Folge war, dass $\sum_{k=0}^{N-1}\epsilon_k = t - t_0$ gelten soll. Es hindert uns also nichts daran das Zeitgitter beliebig fein werden zu lassen - d.h. wir lassen die Feinheit $\epsilon_{max} := \underset{k}{max}\{\epsilon_k\}$ gegen 0 gehen. Es soll nun beobachtet werden, was mit den einzelnen Termen in Gleichung (23) passiert, wenn man den Grenzübergang durchführt. Wir beginnen mit dem Ausdruck :

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon_{max}\to 0}\prod_{k=0}^{N-1} e^{\mathcal{O}(\epsilon_k^2)} &= \lim_{\epsilon_{max}\to 0} e^{\sum_{k=0}^{N-1}\mathcal{O}(\epsilon_k^2)} = \lim_{\epsilon_{max}\to 0} e^{\mathcal{O}(\sum_{k=0}^{N-1}\epsilon_k^2)} \\
&= \lim_{\epsilon_{max}\to 0} e^{\mathcal{O}(\epsilon_{max}\sum_{k=0}^{N-1}\epsilon_k)} = \lim_{\epsilon_{max}\to 0} e^{\mathcal{O}(\epsilon_{max}(t-t_0))} \\
&= \lim_{\epsilon_{max}\to 0} e^{\mathcal{O}(\epsilon_{max})} = 1
\end{aligned} \tag{24}$$

Nun muss noch betrachtet werden, wie sich der Exponent des Integranden in Gleichung (23) unter dem Grenzprozess verhält :

$$\lim_{\epsilon_{max}\to 0}\sum_{k=0}^{N-1}\frac{i\epsilon_k}{\hbar}\left[p_k\frac{(x_{k+1}-x_k)}{\epsilon_k}-\left(\frac{p_k^2}{2m}+V(x_k)\right)\right] \tag{25}$$

Zunächst gilt nach dem Mittelwertsatz

$$\lim_{\epsilon_{max}\to 0} \frac{(x_{k+1}-x_k)}{\epsilon_k} = \dot{x}_k \tag{26}$$

Außerdem würden wir gerne die Definition des Riemannintegrals einsetzen - dann wird aus der Summe über k ein Integral über t. Es bleibt nur noch fraglich, ob wir gleichzeitig den Grenzübergang aus Gleichung (26) und den Grenzübergang von der Summe zum Integral machen dürfen. Aus der Mathematik ist bekannt, dass dies über kompakten Intervallen möglich ist - wir haben aber hier ein kompaktes Intervall $[t_0, t]$, über das wir integrieren möchten. Daher gilt :

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon_{max}\to 0} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{i\epsilon_k}{\hbar} \left[p_k \frac{(x_{k+1}-x_k)}{\epsilon_k} - \left(\frac{p_k^2}{2m} + V(x_k) \right) \right] &= \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \left[p\dot{x} - \left(\frac{p^2}{2m} + V(x) \right) \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} S[x, p, t_0, t] \end{aligned} \tag{27}$$

Einsetzen der Gleichung (24) und (27) in die Gleichung (23) ergibt

$$K(x,t,x_0,t_0) \approx \left(\lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N-1} \left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_k \right] \right) \left(\lim_{N\to\infty} \prod_{k=0}^{N-1} \left[\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3p_k}{(2\pi\hbar)^3} \right] \right) e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}(x,p,t_0,t)} \tag{28}$$

Wenn alle Grenzwerte existieren bleibt zu hoffen, dass man das “≈“ durch ein “=“ ersetzen kann. Wie bereits weiter oben erwähnt lässt sich für nach unten beschränkte Hamiltonoperatoren zeigen, dass dies gerechtfertigt ist (vgl. [6]).
Damit ist die Behauptung gezeigt. □

Bevor wir jetzt zur angestrebten Pfadintegraldarstellung kommen, führen wir noch eine sehr sinnvolle Definition ein, die zunächst zur übersichtlicheren Darstellung der kommenden Formeln dienen und später dann auch eine anschauliche Form der Pfadintegraldarstellung liefern wird, die die wesentlichen Terme hervorhebt und eine physikalische Interpretation leichter machen soll.

Definition 3.1 (Pfadintegral) *Sei $\mathcal{L}$ die Menge aller endlichen Folgen mit Elementen aus $\mathbb{R}$, wobei $\epsilon_{max} := \max_k\{\epsilon_k\}$ die Feinheit einer solchen Folge (ϵ_k) sein soll und $0 < m \in \mathbb{R}$. Weiterhin sei $F : \mathcal{L} \times \mathcal{L} \longrightarrow \mathbb{C}$ eine Funktion, so dass der Grenzwert*

$$\lim_{\epsilon_{max}\to 0} \left(\prod_{k=0}^{N-1} \left[\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3x_k}{\left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_k\hbar}\right)^{-\frac{3}{2}}} \right] \right) F((x_0, x_1, ..., x_N), (\epsilon_0, ..., \epsilon_{N-1}))$$

für alle Folgen $(\epsilon_0, ..., \epsilon_{N-1})$, *mit* $\sum_{i=1}^{N-1} \epsilon_k = t - t_0 \in \mathbb{R}$, *existiert und eindeutig ist. Dann definieren wir*

$$\int_{(x_0,t_0)\to(x,t)} \mathcal{D}x \; F := \lim_{\epsilon_{max}\to 0} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon_0 \hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\prod_{k=1}^{N-1} \left[\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 x_k}{\left(\frac{m}{2\pi i \epsilon_k \hbar}\right)^{-\frac{3}{2}}} \right] \right) F$$

Wir kommen nun endlich zur Feynman'schen Pfadintegralformel, die sich mit der obigen Definition in einer eleganten Form aufschreiben lässt :

Satz 3.3 (Pfadintegraldarstellung von Feynman) *Sei* $V : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}$ *ein gegebenes Potential. Weiter sei*

$$S : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} \quad , \qquad S(x, \dot{x}, t_0, t) := \int_{t_0}^{t} dt' \mathcal{L}(x, \dot{x}) \tag{29}$$

die klassische Wirkung für ein Teilchen der Masse m im Potential V, wobei

$$L : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R} \quad , \quad L(x, \dot{x}) := \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x)$$

die zugehörige klassische Lagrangefunktion ist. Wenn nun K der Propagator jener Schrödingergleichung ist, die obiges Teilchen im Potential V quantenmechanisch beschreibt, dann gilt unter geeigneten Voraussetzungen an V :

$$K(x, t, x_0, t_0) = \int_{(x_0,t_0)\to(x,t)} \mathcal{D}x \; e^{\frac{i}{\hbar} S(x, \dot{x}, t_0, t)} \tag{30}$$

Anmerkung Man beachte, dass die Wirkung S hier wirklich von x und $\dot{x}$ abhängt und über die Lagrangefunktion definiert ist - im vorigen Satz war S allerdings noch von x und p abhängig.

Beweis : Ausgehend von Satz 3.2 (Integraldarstellung des Propagators) sollen die Integrationen über die p_k (Bezeichnungen wie in Satz 3.2) explizit durchgeführt werden :

$$\begin{aligned} K(x, t, x_0, t_0) &= \left(\lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N-1} \left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_k \right] \right) \left(\lim_{N\to\infty} \prod_{k=0}^{N-1} \left[\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p_k}{(2\pi\hbar)^3} \right] \right) e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}(x,p,t_0,t)} \\ &= \lim_{\epsilon_{max}\to 0} \prod_{k=1}^{N-1} \left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_k \right] \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p_{N-1}}{(2\pi\hbar)^3} ... \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p_0}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon_k \left((p_k, \dot{x}_k) - \left(\frac{p_k^2}{2m} + V(x_k) \right) \right)} \\ &= \lim_{\epsilon_{max}\to 0} \prod_{k=1}^{N-1} \left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_k \right] \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p_{N-1}}{(2\pi\hbar)^3} ... \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p_0}{(2\pi\hbar)^3} e^{\sum_{k=0}^{N-1} \left(-\frac{i\epsilon_k}{2m\hbar} p_k^2 + \frac{i\epsilon_k (\dot{x}_k, p_k)}{\hbar} - \frac{i\epsilon_k V(x_k)}{\hbar} \right)} \end{aligned} \tag{31}$$

Um das Integral

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3p_{N-1}}{(2\pi\hbar)^3} ... \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3p_0}{(2\pi\hbar)^3} e^{\sum_{k=0}^{N-1}\left(-\frac{i\epsilon_k}{2m\hbar}p_k^2+\frac{i\epsilon_k(\dot{x}_k,p_k)}{\hbar}-\frac{i\epsilon_k V(x_k)}{\hbar}\right)}$$

zu berechnen, benutzen wir die folgende Formel für das Integral

$$\int_{\mathbb{R}^3} e^{-(a(x,x)+2(b,x)+c)} d^3x = \left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{(b,b)}{a}-c}, \tag{32}$$

die für $a, c \in \mathbb{C}$, $b \in \mathbb{C}^3$ und $x \in \mathbb{R}^3$ gilt. Durch sukzessives Anwenden von (32) findet man:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3p_{N-1}}{(2\pi\hbar)^3} ... \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3p_0}{(2\pi\hbar)^3} e^{\sum_{k=0}^{N-1}\left(-\frac{i\epsilon_k}{2m\hbar}p_k^2+\frac{i\epsilon_k(\dot{x}_k,p_k)}{\hbar}-\frac{i\epsilon_k V(x_k)}{\hbar}\right)}$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3p_{N-1}}{(2\pi\hbar)^3} ... \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3p_1}{(2\pi\hbar)^3} e^{\sum_{k=1}^{N-1}\left(-\frac{i\epsilon_k}{2m\hbar}p_k^2+\frac{i\epsilon_k(\dot{x}_k,p_k)}{\hbar}-\frac{i\epsilon_k V(x_k)}{\hbar}\right)} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{\pi}{\frac{i\epsilon_0}{2m\hbar}}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\frac{\epsilon_0^2\dot{x}_0^2}{4\hbar^2}}{\frac{i\epsilon_0}{2m\hbar}}-\frac{i\epsilon_0 V(x_0)}{\hbar}}$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3p_{N-1}}{(2\pi\hbar)^3} ... \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3p_1}{(2\pi\hbar)^3} e^{\sum_{k=1}^{N-1}\left(-\frac{i\epsilon_k}{2m\hbar}p_k^2+\frac{i\epsilon_k(\dot{x}_k,p_k)}{\hbar}-\frac{i\epsilon_k V(x_k)}{\hbar}\right)} \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_0\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon_0\left(\frac{m\dot{x}_0^2}{2}-V(x_0)\right)}$$

$$= ....$$

$$= \left(\prod_{k=0}^{N-1}\left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_k\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\left(\frac{m\dot{x}_k^2}{2}-V(x_k)\right)} \tag{33}$$

Wenn man dies in Gleichung (31) einsetzt, erhält man

$$K(x,t,x_0,t_0) = \lim_{\epsilon_{max}\to 0} \prod_{k=1}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_k\right] \left(\prod_{k=0}^{N-1}\left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_k\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\left(\frac{m\dot{x}_k^2}{2}-V(x_k)\right)} \tag{34}$$

Wie schon in Satz 3.2 (Integraldarstellung des Propagators) wird die Summe im Exponenten des Integranden im Grenzübergang wieder zu einem Integral. Dabei ergibt sich

$$\begin{aligned} K(x,t,x_0,t_0) &= \lim_{\epsilon_{max}\to 0} \prod_{k=1}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_k\right] \left(\prod_{k=0}^{N-1}\left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_k\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\left(\frac{m\dot{x}^2}{2}-V(x)\right)} \\ &= \lim_{\epsilon_{max}\to 0} \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_0\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \prod_{k=1}^{N-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3x_k}{\left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_k\hbar}\right)^{-\frac{3}{2}}}\right] e^{\frac{i}{\hbar}S(x,\dot{x},t_0,t)} \\ &= \int_{(x_0,t_0)\to(x,t)} \mathcal{D}x\, e^{\frac{i}{\hbar}S(x,\dot{x},t_0,t)} \end{aligned} \tag{35}$$

Damit ist die Behauptung gezeigt. □

4 Physikalische Interpretation des Pfadintegrals

Bedeutung des Propagators Der in Definition 2.1 eingeführte Propagator K lässt - wie in Satz 2.1 gezeigt - die direkte Berechnung der Lösung $\psi(x,t)$ der zeitabhängigen Schrödingergleichung zu, K "propagiert" den Anfangszustand in den Endzustand. Mit $\psi(x,t)$ lassen sich dann natürlich wie gewohnt die Eigenwerte beliebiger Observablen berechnen. Man besitzt mit $K(x,t,x_0,t_0)$ und $\psi(x_0,t_0)$ also alle Informationen über das betrachtete System.

Physikalische Motivation für die Umformungen in Kapitel 3 In Satz 2.3 (Kompositionsgesetz) führen wir ein Zeitgitter ein. Wir diskretisieren also zuerst die Zeitachse, führen dann einige Berechnungen durch, die auf diese Weise einfacher werden und machen schließlich wieder den Grenzübergang zum Zeitkontinuum. Der zerlegte Propagator K wird auf $\psi(x_0,t_0)$ angewandt, indem die durch die Zerlegung von K entstandenen Integrale nacheinander ausgewertet werden.
Natürlich kann das Teilchen den Weg zwischen zwei Zeitpunkten und zwei festen Orten auf verschiedenste Art zurücklegen. Hier ist ein anschauliches Gedankenexperiment angebracht:
Wird ein Doppelspalt mit Spalten A und B von einer Einzelelektronenquelle beschossen, so werden die einzelnen Wahrscheinlichkeitsamplituden ϕ_A, ϕ_B, die durch beide Wege über die Spalten A und B charakterisiert sind, zur Gesamtwahrscheinlichkeitsamplitude $\phi = \phi_A + \phi_B$ addiert. Stellt man dahinter einen weiteren Doppelspalt auf, so ergeben sich vier Wege, also vier Wahrscheinlichkeitsamplituden, die zu addieren sind. Nun kann man so viele Doppelspalte aufstellen, wie man möchte. Anstatt der Doppelspalte kann man sich jetzt ein Gitter mit N Spalten vorstellen, und man kann sich sogar beliebig viele Spalte in einem Gitter vorstellen. Schließlich kann man den Grenzübergang durchführen und man erhält ein Integral "über alle Wege".

Interpretation der Pfadintegraldarstellung Die Pfadintegraldarstellung des Propagators in Gleichung (30) kann als ein solches "Integral über alle Wege" interpretiert werden. Sie liefert dabei eine anschauliche Verbindung zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik. Entscheidend ist hierbei die Gewichtung der einzelnen Wege durch den Phasenfaktor $e^{\frac{i}{\hbar}S[x,\dot{x},t_0,t]}$ mit der klassischen Wirkung im Exponenten.
Für die klassische Trajektorie nimmt $S[x,\dot{x},t_0,t]$ ein Minimum an, die Funktionalableitung $\frac{\delta S}{\delta x}$ ist an dieser Stelle Null. Wege, die der klassischen Bahn unmittelbar benachbart sind, tragen also in etwa genauso zum Pfadintegral bei wie die klassische Bahn selbst. Betrachtet man die Gewichtungen der anderen Wege, so wird die Wirkung größer sein, als die des klassischen Weges. Für einen beliebigen dieser Wege C_1 gibt es dann auch einen Weg C_2, dessen Wirkung um $\hbar\pi$ größer ist als die Wirkung von C_1. Damit erhält man dann:

$$e^{\frac{i}{\hbar}S(C_1)} = e^{\frac{i}{\hbar}S(C_2)+i\pi} = -e^{\frac{i}{\hbar}S(C_2)}.$$

Diese beiden Beiträge zum Pfadintegral heben sich also auf, genauso wie sich auch alle weiteren Beiträge von Wegen (nahezu) aufheben, die deutlich von der klassischen Bahn

abweichen. Im klassischen Grenzfall liefert also auch nur der klassische Weg einen Beitrag zum Pfadintegral. Insofern kann man auch umgekehrt argumentieren, dass sich das klassische Hamiltonsche Prinzip der kleinsten Wirkung aus dem Pfadintegralformalismus als Grenzfall ableiten lässt.
Bei quantenmechanischen Systemen, deren Wirkungen im Bereich von $\hbar\pi$ liegen, spielen die Beiträge der Wege aus der Umgebung der klassischen Bahn allerdings eine entscheidende Rolle.

5 Anwendungen des Pfadintegralformalismus an konkreten Beispielen

Satz 5.1 (Das freie Teilchen) *Sei $0 < m \in \mathbb{R}$ die Masse eines Teilchens im Potential $V = 0$ - die Lagrangefunktion ist dann also durch $\mathcal{L} = \frac{m\dot{x}^2}{2}$ gegeben. Wenn $t_0, t \in \mathbb{R}$ und $x_0, x \in \mathbb{R}^3$ ist, dann gilt für den Propagator des freien Teilchens*

$$K(x,t,x_0,t_0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x-x_0)^2}{t-t_0}}$$

Beweis : Wenn man die Lagrangefunktion für das freie Teilchen in Satz 3.3 einsetzt, bekommt man :

$$K(x,t,x_0,t_0) = \int_{(x_0,t_0)\longrightarrow(x,t)} \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \frac{m\dot{x}^2}{2}} \tag{36}$$

Um dieses Integral auszuwerten benötigt man zunächst eine reelle Folge (ϵ_k), die die Bedingung $\sum_{k=0}^{N-1} \epsilon_k = t - t_0$ erfüllt. Mit einer solchen Folge findet man dann zusammen mit der Definition 3.1 durch Einsetzen :

$$\begin{aligned} K(x,t,x_0,t_0) &= \lim_{\epsilon_{max}\to 0} \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_0\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left[\prod_{k=1}^{N-1}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3x_k}{\left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_k\hbar}\right)^{\frac{-3}{2}}}\right] e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \frac{m\dot{x}^2}{2}} \\ &= \lim_{\epsilon_{max}\to 0} \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_0\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left[\prod_{k=1}^{N-1}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3x_k}{\left(\frac{m}{2\pi i\epsilon\hbar}\right)^{\frac{-3}{2}}}\right] e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\frac{m}{2}\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon_k}\right)^2} \end{aligned} \tag{37}$$

Im letzten Umformungsschritt wurde das Integral im Exponenten wieder als Summe geschrieben, wobei im Prinzip die Umformungsschritte aus den Gleichungen (34) und (35) aus der Herleitung des Pfadintegrals wieder rückgängig gemacht wurden. Man kann nun die auftretenden Integrale mit dem Prinzip der vollständigen Induktion nach N berechnen. Dazu definiert man eine Funktionenfolge

$$I_N : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \quad ; \quad I_N := \left[\prod_{k=1}^{N-1}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3x_k}{\left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_k\hbar}\right)^{\frac{-3}{2}}}\right] e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\frac{m}{2}\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon_k}\right)^2}$$

für $N \in \{n \in \mathbb{N} | n \geq 2\}$.

Induktionsbehauptung : Es gilt

$$I_N = \left(\sum_{k=0}^{N-1} \frac{\epsilon_k}{\epsilon_0}\right)^{\frac{-3}{2}} e^{\left(\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\right)^{-1} \frac{im}{2\hbar}(x_N - x_0)^2}$$

Induktionsanfang: N = 2 Für N = 2 gilt nach der obigen Definition von I_2 :

$$I_2 = \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_1\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 e^{\frac{im}{2\epsilon_0\hbar}(x_1-x_0)^2 + \frac{im}{2\epsilon_1\hbar}(x_2-x_1)^2} \tag{38}$$

Zur Auswertung kann wieder die Formel (32) genutzt werden :

$$\begin{aligned}
I_2 &= \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_1\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_1^2-2(x_1,x_0)+x_0^2)}{\epsilon_0} + \frac{im}{2\hbar}\frac{(x_2^2-2(x_2,x_1)+x_1^2)}{\epsilon_1}} \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_1\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 e^{\frac{im}{2\hbar}\left[\left(\frac{1}{\epsilon_0}+\frac{1}{\epsilon_1}\right)x_1^2 - \left(\frac{2x_0}{\epsilon_0}+\frac{2x_2}{\epsilon_1}\right)x_1 + \left(\frac{x_0^2}{\epsilon_0}+\frac{x_2^2}{\epsilon_1}\right)\right]} \\
&\overset{(32)}{=} \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_1\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{-\pi}{\frac{im}{2\hbar\epsilon_0}+\frac{im}{2\hbar\epsilon_1}}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar}\left[-\left(\frac{x_0}{\epsilon_0}+\frac{x_2}{\epsilon_1}\right)^2\left(\frac{1}{\epsilon_0}+\frac{1}{\epsilon_1}\right)^{-1} + \left(\frac{x_0^2}{\epsilon_0}+\frac{x_2^2}{\epsilon_1}\right)\right]} \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_1\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{-\pi\epsilon_0\epsilon_1}{\frac{im}{2\hbar}(\epsilon_0+\epsilon_1)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar}\left[\frac{-x_0^2\epsilon_1^2-2\epsilon_0\epsilon_1x_0x_2-\epsilon_0^2x_2^2}{\epsilon_0\epsilon_1(\epsilon_0+\epsilon_1)} + \frac{\epsilon_1(\epsilon_0+\epsilon_1)x_0^2+\epsilon_0(\epsilon_0+\epsilon_1)x_2^2)}{\epsilon_0\epsilon_1(\epsilon_0+\epsilon_1)}\right]} \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_1\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{-\pi\epsilon_0\epsilon_1}{\frac{im}{2\hbar}(\epsilon_0+\epsilon_1)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar(\epsilon_0+\epsilon_1)}(x_2-x_0)^2} \\
&= \left(\frac{\epsilon_0+\epsilon_1}{\epsilon_0}\right)^{\frac{-3}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar(\epsilon_0+\epsilon_1)}(x_2-x_0)^2}
\end{aligned} \tag{39}$$

Damit ist der Induktionsanfang gezeigt. Die Behauptung gelte nun auch für N . Dann folgt:

Induktionsbeweis Nach der Definition der Funktionenfolge (I_N) zusammen mit der Induktionsvoraussetzung ergibt sich

$$
\begin{aligned}
I_{N+1} &= \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_N\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_N I_N e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon_N}(x_{N+1}-x_N)^2} \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_N\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_N \left(\sum_{k=0}^{N-1}\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0}\right)^{\frac{-3}{2}} e^{\left(\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\right)^{-1}\frac{im}{2\hbar}(x_N-x_0)^2+\frac{im}{2\hbar\epsilon_N}(x_{N+1}-x_N)^2} \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon_N\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\sum_{k=0}^{N-1}\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0}\right)^{\frac{-3}{2}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_N e^{\frac{im}{2\hbar}\left[\left(\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\right)^{-1}\left(x_N^2-2x_Nx_0+x_0^2\right)+\frac{x_{N+1}^2-2x_{N+1}x_N+x_N^2}{\epsilon_N}\right]} \\
&= \left(\frac{m\left(\sum\limits_{k=0}^{N-1}\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0}\right)^{-1}}{2\pi i\epsilon_N\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x_N e^{\frac{im}{2\hbar}\left[\left(\left(\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\right)^{-1}+\frac{1}{\epsilon_N}\right)x_N^2-\left(\frac{2x_0}{\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k}+\frac{2x_{N+1}}{\epsilon_N}\right)x_N+\left(\frac{x_0^2}{\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k}+\frac{x_{N+1}^2}{\epsilon_N}\right)\right]}
\end{aligned}
\tag{40}
$$

Analog zur Integralauswertung beim Induktionsanfang verwenden wir wieder Formel (32).

$$
\begin{aligned}
I_{N+1} &= \left(\frac{m\left(\sum\limits_{k=0}^{N-1}\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0}\right)^{-1}}{2\pi i\epsilon_N\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{\pi}{-\frac{im}{2\hbar}\left(\left(\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\right)^{-1}+\frac{1}{\epsilon_N}\right)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar}\left[-\frac{\left(\frac{2x_0}{\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k}+\frac{2x_{N+1}}{\epsilon_N}\right)^2}{\left(\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\right)^{-1}+\frac{1}{\epsilon_N}}+\left(\frac{x_0^2}{\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k}+\frac{x_{N+1}^2}{\epsilon_N}\right)\right]} \\
&= \left(\frac{1}{\frac{\epsilon_N}{\epsilon_0}\left(1+\frac{1}{\epsilon_N}\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\right)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar}\left(\sum\limits_{k=0}^{N}\epsilon_k\right)^{-1}(x_{N+1}-x_0)^2} \\
&= \left(\sum_{k=0}^{N}\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0}\right)^{\frac{-3}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar}\left(\sum\limits_{k=0}^{N}\epsilon_k\right)^{-1}(x_{N+1}-x_0)^2}
\end{aligned}
\tag{41}
$$

Damit ist der Induktionsbeweis vollbracht. Durch Einsetzen der nun bewiesenen Induktionsbehauptung in Gleichung (37) erhalten wir :

$$\begin{aligned} K(x,t,x_0,t_0) &= \lim_{\epsilon_{max}\to 0} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon_0 \hbar}\right)^{\frac{3}{2}} I_N \\ &= \lim_{\epsilon_{max}\to 0} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon_0 \hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\sum_{k=0}^{N-1} \frac{\epsilon_k}{\epsilon_0}\right)^{\frac{-3}{2}} e^{\left(\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\right)^{-1} \frac{im}{2\hbar}(x_N - x_0)^2} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \lim\limits_{\epsilon_{max}\to 0} \sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\left(\lim\limits_{\epsilon_{max}\to 0}\sum\limits_{k=0}^{N-1}\epsilon_k\right)^{-1} \frac{im}{2\hbar}(x - x_0)^2} \end{aligned} \tag{42}$$

Wir nutzen jetzt die Bedingung $\sum\limits_{k=0}^{N-1} \epsilon_k = t - t_0$ und erhalten:

$$K(x,t,x_0,t_0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t_0)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x-x_0)^2}{t-t_0}} \tag{43}$$

Damit ist die Behauptung gezeigt. □

Anmerkung Im Exponenten der e - Funktion findet sich die klassische Wirkung

$$S(x,x_0,t,t_0) = \int_{t_0}^{t} \frac{m}{2} v^2 dt' = \int_{t_0}^{t} \frac{m}{2} \left(\frac{x-x_0}{t-t_0}\right)^2 dt' = \frac{m}{2} \frac{(x-x_0)^2}{t-t_0}$$

wieder. Wir möchten an dieser Stelle ohne Beweis anmerken, dass K für eine Lagrangefunktion, die ein Polynom 2. Ordnung in x und $\dot{x}$ ist, immer von der Form

$$K(x,t,x_0,t_0) = A(t,t_0) e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{L}(x,\dot{x}) dt'}$$

ist, wobei die Funktion $A : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$ nicht mehr von $x,\ x_0$ abhängt. Dies ist auch im folgenden Abschnitt am Beispiel des harmonischen Oszillators zu sehen.

Satz 5.2 (Der harmonische Oszillator) *Sei $0 < m \in \mathbb{R}$ die Masse eines Teilchens im Potential*

$$V : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R} \quad , \quad V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad , \quad \omega \in \mathbb{R}^+$$

- die Lagrangefunktion ist dann also durch $\mathcal{L} = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ gegeben. Wenn $t_0, t \in \mathbb{R}$ und $x_0, x \in \mathbb{R}^3$ ist, dann gilt für den Propagator des Teilchens im harmonischen Oszillator :

$$K(x,t,x_0,t_0) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar sin\left[\omega(t-t_0)\right]}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2sin[\omega(t-t_0)]}\left[(x^2+x_0^2)cos[\omega(t-t_0)]-2xx_0\right]\right)}$$

Beweisskizze Nach Satz 3.3 gilt für den gesuchten Propagator

$$K(x,t,x_0,t_0) = \int_{(x_0,t_0)\to(x,t)} \mathcal{D}x\ e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathcal{L}(x,\dot{x})dt'} = \int_{(x_0,t_0)\to(x,t)} \mathcal{D}x\ e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\frac{m\dot{x}^2}{2}-\frac{m\omega^2x^2}{2}dt'} \tag{44}$$

Um das Integral zu lösen machen wir den folgenden Ansatz :
Wir definieren $y : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^3$ durch $y(t) := x(t) - x_{kl}(t)$, wobei $x_{kl} : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^3$ die klassische Trajektorie sein soll. Damit gilt zunächst $x = x_{kl} + y$ und somit $\mathcal{D}x = \mathcal{D}y$. Durch Einsetzen in Gleichung (44) und Anwenden des Transformationssatzes für Integrale erhält man

$$K(x,t,x_0,t_0) = \int_{(x_0,t_0)\to(x,t)} \mathcal{D}y\ e^{\frac{i}{\hbar}\left[\int_{t_0}^{t}dt'\left(\frac{m\dot{x}_{kl}^2}{2}-\frac{m\omega^2x_{kl}^2}{2}\right)+\int_{t_0}^{t}dt'\left(\frac{m\dot{y}^2}{2}-\frac{m\omega^2y^2}{2}\right)+\int_{t_0}^{t}dt'(m\dot{x}_{kl}\dot{y}-m\omega^2x_{kl}y)\right]} \tag{45}$$

Durch partielle Integration des letzten Integrals im Exponenten findet man

$$\int_{t_0}^{t} dt'(m\dot{x}_{kl}\dot{y} - m\omega^2 x_{kl}y) = \left[m\dot{x}_{kl}y\right]_{t_0}^{t} - \int_{t_0}^{t} dt'(m\ddot{x}_{kl}y + m\omega^2 x_{kl}y) = \left[m\dot{x}_{kl}y\right]_{t_0}^{t} \tag{46}$$

Die letzte Umformung gilt wegen der klassischen Bewegungsgleichung $m\ddot{x}_{kl} + m\omega^2 x_{kl} = 0$. Weiterhin kann man noch $\left[m\dot{x}_{kl}y\right]_{t_0}^{t} = 0$ nutzen, weil nach der Definition von y gerade $y(t) = y(t_0) = 0$ gilt. Das heißt $\int_{t_0}^{t} dt'(m\dot{x}_{kl}\dot{y} - m\omega^2 x_{kl}y) = 0$ und damit

$$K(x,t,x_0,t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}S_{kl}(x_{kl},\dot{x}_{kl})} \int_{(x_0,t_0)\to(x,t)} \mathcal{D}y\ e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\left(\frac{m\dot{y}^2}{2}-\frac{m\omega^2y^2}{2}\right)}, \tag{47}$$

wobei $S_{kl}(x_{kl}, \dot{x}_{kl})$ die klassische Wirkung der klassischen Trajektorie ist. Wir möchten hier die klassische Wirkung für das Teilchen im harmonischen Potential nicht herleiten, sondern setzen das Ergebnis

$$S_{kl}(x_{kl}, \dot{x}_{kl}) = \frac{m\omega}{2sin\left[\omega(t-t_0)\right]}\left[(x^2+x_0^2)cos\left[\omega(t-t_0)\right] - 2xx_0\right] \tag{48}$$

als bekannt voraus. Um das noch verbleibende Pfadintegral über $\mathcal{D}y$ auszuwerten benutzt man eine trickreiche Umformung. Man zerlegt y(t) in eine Fourierreihe

$$y(\tau) = \sum_n a_n sin\left(\frac{n\pi\tau}{t-t_0}\right) \tag{49}$$

Dabei soll (a_n) eine reelle Folge sein (die Entwicklungskoeffizienten). Man kann zeigen, dass mit dieser Zerlegung

$$\int_{t_0}^{t} d\tau \dot{y}^2(\tau) = \frac{t-t_0}{2}\sum_n \left(\frac{n\pi}{t-t_0}a_n\right)^2 \quad und \quad \int_{t_0}^{t} d\tau y^2(\tau) = \frac{t-t_0}{2}\sum_n a_n^2$$

gilt. Diese Relationen können in Gleichung (47) eingesetzt werden. Danach kann das Integral analog zu der Berechnung des Propagators des freien Teilchens ausgewertet werden, wobei man wieder die Gleichung (32) nutzt. Das ist eine längere Rechnung und bringt keine neuen Aspekte, wenn man das freie Teilchen schon betrachtet hat. Daher geben wir direkt das Ergebnis an

$$\int_{(x_0,t_0)\rightarrow(x,t)} \mathcal{D}y \; e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\left(\frac{m\dot{y}^2}{2}-\frac{m\omega^2 y^2}{2}\right)} = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar sin(\omega(t-t_0))}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{50}$$

Wenn man die Gleichung (50) zusammen mit Gleichung (48) in die Gleichung (47) einsetzt, erhält man

$$K(x,t,x_0,t_0) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar sin\left[\omega(t-t_0)\right]}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2sin[\omega(t-t_0)]}\left[(x^2+x_0^2)cos[\omega(t-t_0)]-2xx_0\right]\right)}$$

Damit ist skizziert, wie man die Behauptung beweisen kann. □

Anmerkung Um das Ergebnis für den Propagator des harmonischen Oszillators zu überprüfen, kann man z.B. die Energieeigenwerte aus dem Propagator ableiten. Dazu betrachte man noch einmal die Gleichung (9) und Satz 2.2 (Propagator als Matrixelement):

$$K(x,t,x_0,t_0) = \sum_n \varphi_n^*(x_0)\varphi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \tag{51}$$

Die in dieser Fourierdarstellung von K auftretenden Energieeigenfunktionen φ_n können durch Umkehrung der Fouriertransformation gewonnen werden. Dasselbe gilt für die Eigenwerte $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right)$. Wir möchten dies hier allerdings nicht vorführen, da die Rechnung recht aufwendig ist.

Satz 5.3 (Der Aharonov-Bohm-Effekt) *Gegeben sei ein Doppelspalt mit Spalten 1 und 2, zwischen denen sich ein Magnetfeld $B = \nabla \times A \in \mathbb{R}^3$ mit zugehörigem Vektorpotential A befindet, in das ein Teilchen mit Masse m, welches sich in diesem Versuchsaufbau befindet, nicht eindringen kann. Sei $x \in \mathbb{R}^3$ die Position eines Detektors hinter dem Doppelspalt und $x_0 \in \mathbb{R}^3$ ein Punkt vor dem Doppelspalt, an dem sich das Teilchen zum Zeitpunkt t_0 befindet. Sei ferner $S_{kl}^{(i)} : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R},\ i \in \{1,2\}$ die klassische Wirkung für ein Teilchen auf der klassischen Trajektorie, falls der Spalt $j \neq i$ geschlossen und das Magnetfeld eingeschaltet ist.*
Dann existieren zwei Funktionen $A_i : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C},\ i \in \{1,2\}$, so dass für den Propagator $K(x,t,x_0,t_0)$ des Versuchsaufbaus bei eingeschaltetem Magnetfeld B mit zugehörigem Fluss $\Phi_B \in \mathbb{R}$ und geöffneten Spalten

$$K(x,t,x_0,t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}S_{kl}^{(1)}} \left(A_1(t,t_0) + A_2(t,t_0) e^{\frac{ie}{\hbar}\Phi_B} \right)$$

gilt.

Anmerkung Die Funktionen A_1 und A_2 beinhalten die Geometrie des Versuchsaufbaus (Abstand und Breite der Spalte). Die genaue Lage des B-Feldes zwischen den Spalten geht jedoch nicht in diese Funktionen ein. Mit Hilfe der Pfadintegralformel lassen sich die Funktionen A_1 und A_2 prinzipiell bestimmen.

Beweis Sei $\mathcal{L} : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}$ die Wirkung eines freien Teilchens der Masse m, dann ist die Lagrangefunktion $\mathcal{L}' : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}$ für das Teilchen in dem Vektorpotential $A \in \mathbb{R}^3$ gegeben durch (vgl. [3])

$$\mathcal{L}'(\dot{x}, x) = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{e}{c}A(x)\dot{x} = \mathcal{L}(\dot{x}, x) + \frac{e}{c}A(x)\dot{x} \tag{52}$$

Damit berechnet sich die klassische Wirkung $S_{kl} : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}$ zu

$$\begin{aligned} S_{kl}(\dot{x}, x) &= \int_{t_0}^{t} \mathcal{L}(\dot{x}, x) dt' + \int_{t_0}^{t} \frac{e}{c} A(x)\dot{x} dt' \\ &= \int_{t_0}^{t} \mathcal{L}(\dot{x}, x) dt' + \int_{\Gamma} \frac{e}{c} A ds \end{aligned} \tag{53}$$

Bei der letzten Umformung wurde die Definition des Kurvenintegrals verwendet. Die Kurve Γ wird durch $x(t)$ parametrisiert. Für $B = const.$ ist A höchstens linear in x und damit ist die Lagrangefunktion $\mathcal{L}'$ aus Gleichung (52) ein Polynom 2.Grades in x und $\dot{x}$. Also können wir nach der Anmerkung zu Satz 5.1 jeden Propagator, der ein Teilchen mit der Lagrangefunktion $\mathcal{L}'$ beschreibt, in der Form $A(t,t_0)e^{\frac{i}{\hbar}S_{kl}(\dot{x},x)}$ darstellen, wobei $A : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$ eine Funktion ist, die nicht von x oder $\dot{x}$ abhängt. Insbesondere existiert damit - wie im Satz verlangt - auch eine Funktion A_1, so dass der Propagator K_1, der ein Teilchen in unserem Versuchsaufbau beschreibt, wenn Spalt 2 geschlossen und das Magnetfeld eingeschaltet ist, in der Form

$$K_1(x,t,x_0,t_0) = A_1(t,t_0)e^{\frac{i}{\hbar}S_{kl}^{(1)}}$$

geschrieben werden kann.
Analog existiert auch eine Funktion A_2 mit allen verlangten Voraussetzungen, so dass der Propagator K_2, der ein Teilchen in unserem Versuchsaufbau beschreibt, wenn Spalt 1 geschlossen und das Magnetfeld eingeschaltet ist, in der Form

$$K_2(x,t,x_0,t_0) = A_2(t,t_0)e^{\frac{i}{\hbar}S_{kl}^{(2)}}$$

geschrieben werden kann.
Wegen der Linearität des Pfadintegrals aus Satz 3.3 ergibt sich für den gesuchten Propagator

$$\begin{aligned} K(x,t,x_0,t_0) &= K_1(x,t,x_0,t_0) + K_2(x,t,x_0,t_0) \\ &= A_1(t,t_0)e^{\frac{i}{\hbar}S_{kl}^{(1)}} + A_2(t,t_0)e^{\frac{i}{\hbar}S_{kl}^{(2)}} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}S_{kl}^{(1)}}\left(A_1(t,t_0) + A_2(t,t_0)e^{\frac{i}{\hbar}\left(S_{kl}^{(2)}-S_{kl}^{(1)}\right)}\right) \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}S_{kl}^{(1)}}\left(A_1(t,t_0) + A_2(t,t_0)e^{\frac{i}{\hbar}\left(\int_{\Gamma_2}\frac{e}{c}Ads-\int_{\Gamma_1}\frac{e}{c}Ads\right)}\right) \end{aligned} \tag{54}$$

Bei der letzten Umformung wurde Gleichung (53) eingesetzt. Die Kurven Γ_1 und Γ_2 bezeichnen die klassischen Trajektorien eines Teilchens, das von x_0 nach x durch Spalt 1 bzw. 2 fliegt. Da $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ eine geschlossene Kurve darstellt, in deren Inneren das Magnetfeld B liegt, ergibt sich

$$\int_{\Gamma_2}\frac{e}{c}Ads - \int_{\Gamma_1}\frac{e}{c}Ads = \frac{e}{c}\oint_{\Gamma_1\cup\Gamma_2}Ads = \frac{e}{c}\Phi_B$$

Einsetzen in Gleichung (54) ergibt

$$K(x,t,x_0,t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}S_{kl}^{(1)}}\left(A_1(t,t_0) + A_2(t,t_0)e^{\frac{ie}{c\hbar}\Phi_B}\right) . \tag{55}$$

Damit ist die Behauptung gezeigt. □

Anmerkung Aus dem obigen Satz zum Aharonov-Bohm-Effekt kann man die explizite Abhängigkeit des dort eingeführten Propagators vom magnetischen Fluss Φ_B ablesen, der schließlich auch in die Wellenfunktion mit eingeht und hinter dem Doppelspalt gemessen werden kann. Eine Diskussion dieser Abhängigkeit der Messergebnisse hinter dem Doppelspalt von dem Magnetfeld zwischen den Spalten erfolgt zum Beispiel in dem Skript von Jascha Zapp und Christoph Langenbruch (vgl. [3]).

6 Ausblick

Wir konnten in diesem Skript leider nur einen sehr kleinen Teil der Anwendungen des Pfadintegrals diskutieren und haben uns auch nur mit nichtrelativistischen Problemen beschäftigt. An Beispielen, die mit dem Pfadintegralformalismus recht leicht nachgerechnet werden können, wären noch diverse Versuchsaufbauten bzw. Gedankenexperimente mit Spalten, Doppelspalten und ähnlichem zu nennen, die z.B. auch Feynman in seinem Buch (vgl. [1]) behandelt. Zu den nichtrelativistischen Anwendungen des Pfadintegralformalismus ist zu sagen, dass erst in jüngerer Zeit alle Probleme, die mit der Schrödingergleichung analytisch gelöst werden können, auch mit dem Pfadintegralformalismus explizit verifiziert werden konnten (vgl. [4]) . Das explizite Lösen der Pfadintegrale ist allerdings meist etwas mühselig, dafür sinkt der Aufwand bei numerischen Berechnungen. Die Monte-Carlo-Methode ist beispielsweise ein wichtiges numerisches Verfahren mit dem Pfadintegrale behandelt werden können.
Der Formalismus kann relativistisch verallgemeinert werden (man kann z.B. mit dem Propagator der Klein-Gordon-Gleichung beginnen ...) und vor allem auch für Quantenfelder formuliert werden. Dabei führt man ganz analog zu der „Summe über alle möglichen Pfade„ die „Summe über alle Feldkonfigurationen„ ein. Damit eröffnet sich ein großer Anwendungsbereich des Pfadintegralformalismus in der Quantenfeldtheorie. Ein weiterer Anwendungsbereich liegt in der statistischen Mechanik und Thermodynamik, was voraussichtlich im nächsten Seminarvortrag diskutiert werden wird.

Literatur

[1] Feynman and Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill

[2] U.Mosel, Path Integrals in Field Theory, Springer, 2004

[3] Skript von Jascha Zapp und Christoph Langenbruch, Der Aharonov-Bohm-Effekt

[4] Grosche, C., Steiner, F.: How to Solve Path Integrals in Quantum Mechanics. J. Math. Phys. 36, 2354-2385, 1995 (Special Issue on Functional Integration)

[5] www.theory.gsi.de/˜vanhees/faq-pdf/Pfadintegrale.pdf

[6] www.math.uni-frankfurt.de/˜pflaum/Publikationen/PflHabilVortrag.ps (Titel : Gibt es in der Mathematik ein Pfadintegral ?)

[7] www.mathematik.uni-kl.de/ dempw/LIE/BCH.ps