Pfadintegralformulierung der QM

(Dirac 1933, Feynman 1948)

Literatur: z.B. Sakurai, Feynman & Hibbs, Ryder, ...

In "üblicher" Formulierung der QM:
q, p durch Operatoren ersetzt mit Heisenbergschen Vertauschungsrelationen, Zeitentwicklung gegeben durch

$$|\psi\rangle(t) = e^{-iHt/\hbar} \, |\psi\rangle(t=0)$$

Pfadintegralformulierung basiert dagegen auf Propagator $K(q_f t_f; q_i t_i)$.

Gegeben Wellenfunktion $\psi(q_i, t_i)$ zur Zeit t_i
→ erhalte Wellenfunktion zur Zeit t_f mittels Propagator (hier in 1-Dim.)

$$\psi(q_f, t_f) = \int K(q_f t_f; q_i t_i) \, \psi(q_i, t_i) \, dq_i$$

analog Huygens-Prinzip (→ Kausalität)

Zur Vereinfachung betrachten wir im folgenden alles in 1d, Verallgemeinerung ist offensichtlich (beachte aber Faktoren $\sqrt{2\pi}$!)

$K(q_f t_f; q_i t_i)$ beschreibt also Wahrscheinlichkeits-amplitude für Übergang von q_i zur Zeit t_i nach q_f zur Zeit t_f.

→ Wahrscheinlichkeit für Übergang:

$$P(q_f, t_f; q_i t_i) = |K(q_f t_f; q_i t_i)|^2$$

[N.B.: Entwicklung der Wellenfunktion ist vollständig deterministisch, wenn System ungestört. Messung ist (massive!) Störung.]

Teile jetzt Intervall $[t_i, t_f]$ bei t, $t_i < t < t_f$, und wende wieder Huygens-Prinzip an:

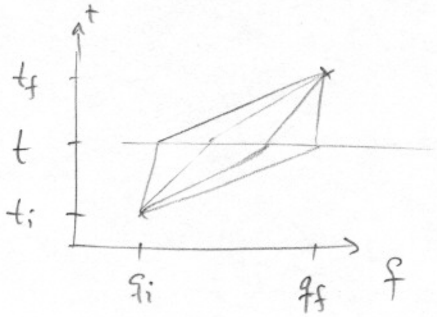
$$\psi(q_f, t_f) = \iint K(q_f t_f; q t) \, K(q t; q_i t_i) \, \psi(q_i t_i) \, dq_i \, dq$$

d.h.

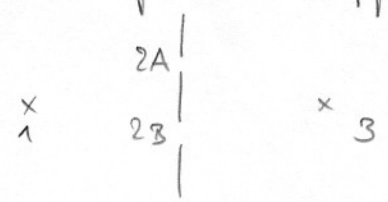
$$K(q_f t_f; q_i t_i) = \int K(q_f t_f; q t) \, K(q t; q_i t_i) \, dq$$

→ Übergang von $(q_i t_i)$ nach (q_f, t_f) ist Resultat von Übergang $(q_i t_i) \to (q, t)$ gefolgt von $(q, t) \to (q_f, t_f)$ mit <u>allen möglichen</u> Punkten q zur Zeit t.

Anschaulich



einfaches Beispiel Doppelschlitz:



$$K(3;1) = K(3,2A)\,K(2A,1) + K(3,2B)\,K(2B,1)$$

$$P(3;1) = |K(3;1)|^2$$

Mit der Notation

$$|q\,t\rangle = e^{iHt/\hbar}\,|q\rangle$$

ist andererseits die Übergangsamplitude gegeben durch

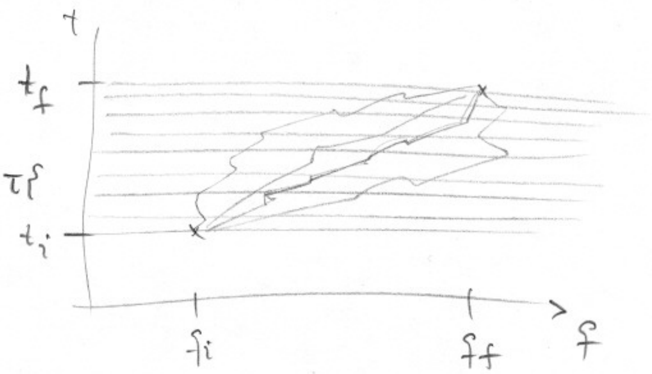
$$\langle q_f t_f \,|\, q_i t_i\rangle = \langle q_f|\, e^{-iH(t_f-t_i)/\hbar}\,|q_i\rangle ,$$

damit

$$\boxed{K(q_f t_f, q_i t_i) = \langle q_f|\, e^{-iH(t_f-t_i)/\hbar}\,|q_i\rangle} = \langle q_f t_f \,|\, q_i t_i\rangle$$

Propagator K enthält komplette QM des Systems. Üblicherweise löst man Schrödingergl. Propagator gibt dagegen Ergebnis direkt an.
→ gut geeignet für Streuprozesse.

Teile jetzt $[t_i, t_f]$ in $n+1$ gleiche Teile τ,



Dann mit Def.

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = K(q_f t_f ; q_i t_i)$$

also

$$K(q_f t_f ; q_i t_i) = \int dq_1 \, dq_2 \ldots dq_n \langle q_f t_f | q_n t_n \rangle \times$$
$$\times \langle q_n t_n | q_{n-1} t_{n-1} \rangle \ldots \langle q_1 t_1 | q_i t_i \rangle \qquad (*)$$

Integrale ergeben Summe über alle möglichen Wege. (Vorsicht: Wege nicht kontinuierlich → eigentlich Markov-Ketten)

Betrachte kleinen Schritt $k \to k+1$:

$$\langle q_{k+1} t_{k+1} | q_k t_k \rangle = \langle q_{k+1} | e^{-iH\tau/\hbar} | q_k \rangle$$

$$= \langle q_{k+1} | 1 - \frac{i}{\hbar} H\tau + \mathcal{O}(\tau^2) | q_k \rangle$$

$$\simeq \delta(q_{k+1} - q_k) - \frac{i\tau}{\hbar} \langle q_{k+1} | H | q \rangle$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \, \exp\left[\frac{i}{\hbar} p (q_{k+1} - q_k)\right] - \frac{i\tau}{\hbar} \langle q_{k+1} | H | q \rangle \qquad (**)$$

Im allgemeinen ist $H = H(p,q)$.
Betrachte hier speziellen Fall

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

(oder etwas allgemeiner $f(p) + g(q)$).
Dann

$$\langle q_{k+1} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | q_k \rangle = \int dp \, dp' \, \langle q_{k+1} | p' \rangle \langle p' | \frac{p^2}{2m} | p \rangle \langle p | q_k \rangle$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \, dp' \, \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p' q_{k+1} - p q_k)\right] \frac{p^2}{2m} \delta(p - p')$$

$$\langle q_{k+1} | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip' q_{k+1}/\hbar}$$

p kein Operator mehr

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \, \exp\left[\frac{i}{\hbar} p (q_{k+1} - q_k)\right] \frac{p^2}{2m} \qquad (***)$$

Analog

$$\langle q_{k+1} | \underset{\nearrow \text{Operator}}{V(q)} | q_k \rangle = V\Big(\underbrace{\frac{q_{k+1}+q_k}{2}}_{=\bar{q}_k}\Big) \langle q_{k+1} | q_k \rangle$$

$\leftarrow$ diese Wahl möglich wegen Delta-Fkt.

$$= V(\bar{q}_k)\ \delta(q_{k+1}-q_k)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp\ \exp\Big[\frac{i}{\hbar} p\,(q_{k+1}-q_k)\Big]\ V(\bar{q}_k) \qquad \begin{pmatrix} ** \\ ** \end{pmatrix}$$

kein Operator mehr

Aus (***) und $\begin{pmatrix} ** \\ ** \end{pmatrix}$:

$$\langle q_{k+1} | H | q_k \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_k\ \exp\Big[\frac{i}{\hbar} p_k (q_{k+1}-q_k)\Big]\ H(p_k, \bar{q}_k)$$

Mit (**)

$$\langle q_{k+1} t_{k+1} | q_k t_k \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_k\ \exp\Big[\frac{i}{\hbar} p_k (q_{k+1}-q_k)\Big] \underbrace{\Big(1 - \frac{i\tau}{\hbar} H(p_k,\bar{q}_k)\Big)}_{\hat{=}\ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\tau H\right)}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_k\ \exp\Big\{\frac{i}{\hbar}\Big[p_k(q_{k+1}-q_k) - \tau H(p_k,\bar{q}_k)\Big]\Big\}$$

wobei p_k der Impuls zwischen t_k und t_{k+1}.

Damit wird voller Propagator in (*) im Kontinuumslimes

$$\boxed{K(q_f t_f; q_i t_i) = \lim_{n\to\infty} \int \prod_k \frac{dq_k\, dp_k}{2\pi\hbar} \times \exp\Big\{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{n} \Big[p_k(q_{k+1}-q_k) - \tau H(p_k,\bar{q}_k)\Big]\Big\}} \qquad (\boxed{\times})$$

mit $q_0 = q_i$, $q_{n+1} = q_f$. Dabei bedeutet $\prod_k \ldots$ je ein Koord.-Integral für $k = 1, \ldots, n-1$ und je ein Impuls-Integral für $k = 1, \ldots, n$.

Das ist in symbolischer Schreibweise bzw. als Pfadintegral

$$\boxed{K(q_f t_f; q_i t_i) = \int \frac{\mathcal{D}q\,\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[p\dot{q} - H(p,q) \right] \right\}}$$

mit $q(t_i) = q_i$, $q(t_f) = q_f$.

Beachte: $q(t)$ und $p(t)$ sind nicht durch Hamiltonsche Bewegungsgleichungen eingeschränkt.

* Beachte, daß im Kontinuumslimes $q = q(t)$ Funktion von t. Also Funktion $q(t)$ an Endpunkten festgehalten, $p(t)$ aber nicht. (und unterwegs nicht eingeschränkt, s.o.)

* Funktionen $q(t)$ und $p(t)$ legen Pfad im Phasenraum fest.

Funktionalintegralmaß ist gerade das Standardintegral über den Phasenraum zu jedem Zeitpunkt:

$$\int \frac{dq\,dp}{2\pi\hbar} = \int \frac{dq\,dp}{h}$$

* Im Pfadintegral sind p und q klassische Größen!

Problem dabei: In $\langle q_{k+1} | H(p,q) | q_k \rangle$ oben war in H die Reihenfolge von p und q wichtig, nicht aber in rechter Seite der Gleichung.

→ Benutze Weyl-Ordnung von p und q, d.h. symmetrische Anordnung (dadurch in manchen Fällen zusätzliche Terme)

* Mathematische Definition von Pfadintegralen sehr delikat. (→ Existenz?!) Die Lage ist besser mit "euklidischer Zeit", d.h. imaginärer Zeit $t \to i\tau$.

Falls

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

so kann man p-Integration ausführen:

Dann wird (⊠):

$$K(q_f t_f; q_i t_i) = \lim_{n\to\infty} \int \prod_k \frac{dq_k \, dp_k}{2\pi\hbar} \, *$$

$$* \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{n} \left[p_k (q_{k+1} - q_k) - \frac{p_k^2}{2m}\tau - V(\bar{q}_k)\tau \right] \right\}$$

Einschub über Gaußsche Integrale:

Bekannt ist
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$
Betrachte quadratische Form
$$q(x) = -ax^2 + bx + c$$
Sei $\bar{x}$ Wert von x, wo $q(x)$ maximal
$$\bar{x} = \frac{b}{2a} \quad \rightarrow \quad q(\bar{x}) = \frac{b^2}{4a} + c$$
$$\rightarrow \quad q(x) = q(\bar{x}) - a(x-\bar{x})^2$$
Also
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{q(x)}\, dx = e^{q(\bar{x})} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x-\bar{x})^2}\, dx$$
$$= e^{q(\bar{x})} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$
$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2 + bx + c)\, dx = \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right) \left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2}$$
Daraus mit Induktion:
$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{ i\lambda\left[(x_1-a)^2 + (x_2-x_1)^2 + \ldots + (b-x_n)^2\right]\right\} dx_1 \ldots dx_n$$
$$= \left[\frac{i^n \pi^n}{(n+1)\lambda}\right]^{1/2} \exp\left[\frac{i\lambda}{n+1}(b-a)^2\right]$$

Ein p_k-Integral ist

$$\int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp\left\{ \underbrace{-\frac{i\tau}{2m\hbar}}_{a} p_k^2 + \underbrace{\frac{i}{\hbar}(q_{k+1}-q_k)\,p_k}_{b} \underbrace{-\frac{i\tau}{\hbar}V(\bar{q}_k)}_{c} \right\}$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\tau}\right)^{1/2} \exp\left\{ \frac{i\tau}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_{k+1}-q_k}{\tau}\right)^2 - V(\bar{q}_k)\right]\right\}$$

Davon haben wir $n+1$ Stück.

Mit Gaußscher Integration also

$$K(q_f t_f; q_i t_i) = \lim_{n\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right)^{\frac{n+1}{2}} \int \prod_k dq_k \,*$$

$$* \exp\left\{ \frac{i\tau}{\hbar} \sum_{k=0}^{n} \left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_{k+1}-q_k}{\tau}\right)^2 - V(\bar{q}_k)\right]\right\}$$

Dies ist im Kontinuumslimes

$$K(q_f t_f; q_i t_i) = N \int \mathcal{D}q \, \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(q,\dot{q})\, dt \right]$$

$L = T - V$

N ist formal unendlich, macht aber nichts: wir betrachten immer normierte Übergangsamplituden.

Der Exponent im Integranden ist gerade die <u>klassische</u> Wirkung

$$S_{cl}[q] = \int L\, dt = \int dt \left[\frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \right]$$

$$\rightarrow \quad \boxed{K(q_f, t_f; q_i, t_i) = N \int \mathcal{D}q \, \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[q] \right)}$$

In Worten:

Der Propagator ist das Integral (bzw. die Summe) über alle möglichen Wege $q(t)$, gewichtet jeweils mit der Exponentialfunktion der <u>klassischen</u> Wirkung $S_{cl}[q]$ des Weges.

<u>Bemerkungen:</u>

* <u>Quantenfluktuationen</u>

Der Faktor $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[q]\right)$ oszilliert stark bei makroskopischen Änderungen von $q(t)$.

→ Im klassischen Grenzfall ($\hat{=}\ \hbar \to 0$) hat man nur Beiträge nahe dem stationären Punkt $\frac{\delta S_{cl}}{\delta q} = 0$, d.h. dem klassischen Weg $q_{cl}(t)$.

→ „Quantenfluktuationen" um klassische Lösung.

* Ersetzt man $t \to i\tau$ (imaginäre Zeit), erhält man eine Diffusionsgleichung (→ stochastischer Prozeß). Das Integral ist dann mathematisch besser definiert.

→ Anwendungen in euklidischer Feldtheorie, statistischer Mechanik, Gittereichtheorie

* Pfadintegrale sind für viele praktische Anwendungen nicht sehr günstig (z.B. harmonischer Oszillator schon recht kompliziert). Sie sind aber konzeptionell ein wichtiger Schritt, insbesondere wichtig in der Quantenfeldtheorie (→ Pfadintegral-quantisierung)

Störungstheorie (Notation: x statt q)

Störungstheorie ist möglich, wenn Potential $V(x)$ klein, genauer: das Zeitintegral über $V(x,t)$ muß klein sein verglichen mit $\hbar$.

Dann können wir in

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int L\,dt\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int T\,dt\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int V\,dt\right)$$

T, V klassische Funktionen

den letzten Faktor entwickeln:

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} V(x,t)\,dt\right] = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} V(x,t)\,dt - \frac{1}{2!\hbar^2}\left[\int_{t_i}^{t_f} V(x,t)\,dt\right]^2 + \ldots$$

Einsetzen in

$$K(x_f t_f; x_i t_i) = N\int \mathcal{D}x\,\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} L(x,\dot{x})\,dt\right]$$

$L = T - V$

ergibt eine Reihe

$$K = K_0 + K_1 + K_2 + \ldots$$

Der erste Term ist

$$K_0 = N\int \mathcal{D}x\,\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int \frac{1}{2}m\dot{x}^2\,dt\right)$$

Diskretisiert wird dieser

$$K_0 = \lim_{n\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right)^{\frac{n+1}{2}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{k=1}^{n} dx_k \exp\left[\frac{im}{2\hbar\tau}\sum_{k=0}^{n}(x_{k+1}-x_k)^2\right]}$$

$$\underset{(s.o.)}{=} \frac{1}{(n+1)^{1/2}} \left(\frac{2\pi\hbar i\tau}{m}\right)^{n/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar(n+1)\tau}(x_f-x_i)^2\right]$$

Mit $(n+1)\tau = t_f - t_i$ also für $t_f > t_i$
(beachte Kausalität)

$$K_0(x_f,t_f;x_i t_i) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{wg. Kausalität}}}{\Theta(t_f-t_i)} \left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_i)}\right]^{1/2} \exp\left[\frac{im(x_f-x_i)^2}{2\hbar(t_f-t_i)}\right]$$

Für K_1 finden wir

$$K_1 = N\int \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}\frac{1}{2}m\dot{x}^2\,dt\right) \underbrace{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_i}^{t_f} V(x,t)\,dt}_{\text{1. Term in Entwicklung}}$$

Beide Zeitintegrale diskretisiert:

$$K_1 = -\frac{i}{\hbar}\lim_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right)^{\frac{n+1}{2}} \sum_{l=1}^{n} \int dx_1 \dots dx_n \; \times$$

$$\times \; \exp\left[\frac{im}{2\hbar\tau}\sum_{k=0}^{n}(x_{k+1}-x_k)^2\right] \underset{\substack{\uparrow \\ \text{von } x_l \text{ abhängig}}}{V(x_l,t_l)}$$

Durch Aufspalten der Summe im Exponenten

$$K_1 = -\frac{i}{\hbar} \lim_{n\to\infty} \sum_{l=1}^{n} \int dx_l \left\{ \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right)^{\frac{n-l+1}{2}} \int \exp\left[\frac{im}{2\hbar\tau}\sum_{k=l}^{n}(x_{k+1}-x_k)^2\right] dx_{l+1}\dots dx_n \right\} *$$

$$* V(x_l, t_l) \left\{ \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}\right)^{l/2} \int \exp\left[\frac{im}{2\hbar\tau}\sum_{k=0}^{l-1}(x_{k+1}-x_k)^2\right] dx_1 \dots dx_{l-1} \right\}$$

Die Ausdrücke in geschweiften Klammern sind gerade $K_0(x_f, t_f; x_l, t_l)$ und $K_0(x_l, t_l; x_i, t_i)$.

Daher mit $\sum_l \int dx_l \to \int dx\, dt$

$$K_1(x_f t_f; x_i t_i) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \; K_0(x_f t_f; x, t)\, V(x, t)\, K_0(x, t; x_i, t_i)$$

Es war

$$K_0(x_f, t_f; x, t) = 0 \qquad \text{für } t_f < t$$

$$K_0(x, t; x_i t_i) = 0 \qquad \text{für } t < t_i .$$

Daher

$$K_1(x_f, t_f; x_i t_i) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \; K_0(x_f, t_f; x, t)\, V(x, t)\, K_0(x, t; x_i t_i)$$

Analog in 2. Ordnung

$$K_2 = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \; K_0(x_f, t_f; x_2 t_2) *$$

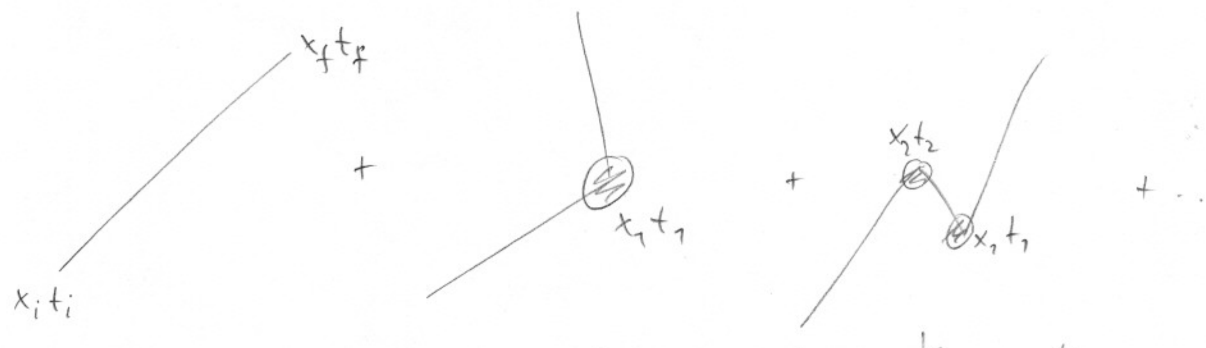
$$* V(x_2 t_2)\, K_0(x_2, t_2; x_1, t_1)\, V(x_1, t_1)\, K_0(x_1, t_1; x_i, t_i)$$

Damit

$$
\begin{aligned}
K(x_f,t_f;x_i t_i) = \; & K_0(x_f,t_f;x_i t_i) \\
& - \frac{i}{\hbar}\int K_0(x_f t_f;x_1 t_1)\, V(x_1 t_1)\, K_0(x_1,t_1;x_i t_i)\, dx_1\, dt_1 \\
& - \frac{1}{\hbar^2}\int K_0(x_f t_f;x_1 t_1)\, V(x_1,t_1)\, K_0(x_1 t_1;x_2 t_2) \\
& \qquad V(x_2 t_2)\, K_0(x_2,t_2;x_i,t_i)\, dx_1\, dx_2\, dt_1\, dt_2 \\
& + \dots
\end{aligned}
$$

→ Born'sche Reihe. In Diagrammen:

$K =$



$= \quad K_0 \quad + \quad K_1 \quad + \quad K_2 \quad + \dots$

Beachte: kein Faktor $\frac{1}{n!}$ in Termen der Bornschen Reihe. Grund: Wechselwirkungen mit V sind zu verschiedenen Zeiten, aber ununterscheidbar:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2!}\int V(t')\, V(t'')\, dt'\, dt'' &= \frac{1}{2!}\iint \big[\, \Theta(t'-t'')\, V(t')\, V(t'') + \\
&\qquad + \Theta(t''-t')\, V(t')\, V(t'') \,\big]\, dt'\, dt'' \\
&= \int \Theta(t_1-t_2)\, V(t_1)\, V(t_2)\, dt_1\, dt_2
\end{aligned}
$$

usw. für $n>2$.

Freier Propagator als Greensche Funktion der Schrödingergleichung

(jetzt in $d=3$)

Setze die Bornsche Reihe ein in

$$\psi(\vec{x}_f,t_f) = \int K(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i)\,\psi(\vec{x}_i,t_i)\,d\vec{x}_i$$

und erhalte

$$\psi(\vec{x}_f,t_f) = \int K_0(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i)\,\psi(\vec{x}_i,t_i)\,d\vec{x}_i$$

$$-\frac{i}{\hbar}\int K_0(\vec{x}_f,t_f;\vec{x},t)\,V(\vec{x},t)\,K_0(\vec{x},t;\vec{x}_i,t_i)\,\psi(\vec{x}_i,t_i)\,dt\,d\vec{x}\,d\vec{x}_i$$

$$+ \dots$$

Bei Konvergenz bedeutet das gerade, daß die Terme $(\dots)$ das letzte K_0 zu K modifizieren. Also

$$\psi(\vec{x}_f,t_f) = \int K_0(\vec{x}_f t_f;\vec{x}_i t_i)\,\psi(\vec{x}_i t_i)\,d\vec{x}_i\ +$$

$$-\frac{i}{\hbar}\int K_0(\vec{x}_f t_f;\vec{x},t)\,V(\vec{x},t)\,\psi(\vec{x},t)\,d\vec{x}\,dt$$

wobei wir $\psi(\vec{x},t) = \int K(\vec{x},t;\vec{x}_i t_i)\,\psi(\vec{x}_i,t_i)\,d\vec{x}_i$ benutzt haben.

Dies ist eine <u>exakte</u> Integralgleichung für ψ.

Angenommen, f ist in der fernen Vergangenheit ($t_i \to -\infty$) eine ebene Welle ϕ, so ist das im ersten Term auch so (freie Propagation)

$$\to \quad f(\vec{x}_f, t_f) = \phi(\vec{x}_f, t_f) - \frac{i}{\hbar} \int K_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}\, t)\, V(\vec{x}, t)\, f(\vec{x}, t)\, d\vec{x}\, dt .$$

Andererseits erfüllt $f(\vec{x}_f, t_f)$ die Schrödingergleichung,

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2_{x_f} f(\vec{x}_f, t_f) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{x}_f, t_f) = V(\vec{x}_f, t_f)\, f(\vec{x}_f, t_f)$$

$\phi(\vec{x}_f, t_f)$ erfüllt die gleiche Gleichung, aber <u>ohne</u> V.

Daher

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2_{x_f} \left(-\frac{i}{\hbar} \int K_0 \ldots \right) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t_f} \left(-\frac{i}{\hbar} \int K_0 \ldots \right) = V(\vec{x}_f\, t_f)\, f(\vec{x}_f, t_f) .$$

In $\left(\int K_0 \ldots \right)$ hängt aber <u>nur</u> K_0 von x_f, t_f ab.

Also

$$\int \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2_{x_f} K_0 \right) V(\vec{x}, t)\, f(\vec{x}, t)\, d\vec{x}\, dt$$

$$+ \int \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_f} K_0 \right) V(\vec{x}, t)\, f(\vec{x}, t)\, d\vec{x}\, dt$$

$$= i\hbar \int \delta(\vec{x}_f - \vec{x})\, \delta(t_f - t)\, V(\vec{x}, t)\, f(\vec{x}, t)\, d\vec{x}\, dt$$

Also

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2_{x_f} K_0(\vec{x}_f t_f; \vec{x}, t) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t_f} K_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}, t) =$$

$$= i\hbar\, \delta(\vec{x}_f - \vec{x})\, \delta(t_f - t) ,$$

d.h. K_0 ist die Greensche Funktion der Schrödingergleichung

Fourier-Transformation des Propagators

Sei $K(\vec{p}_1, t_1; p_0, t_0)$ die Amplitude dafür, daß ein Teilchen mit Impuls $\vec{p}_0$ zur Zeit t_0 zum späteren Zeitpunkt t_1 den Impuls $\vec{p}_1$ hat. Diese erhält man aus $K(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0 t_0)$ durch Fouriertransformation,

$$K(\vec{p}_1, t_1; \vec{p}_0, t_0) = \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_1 \cdot \vec{x}_1\right) K(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0) \cdot$$
$$\cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}_0 \cdot \vec{x}_0\right) d^3x_0\, d^3x_1$$

Es war in nullter Ordnung

$$K_0(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0) = \Theta(t_1 - t_0)\left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t_1 - t_0)}\right]^{3/2} \exp\left[\frac{im(\vec{x}_1 - \vec{x}_0)^2}{2\hbar(t_1 - t_0)}\right]$$

Also

$$K_0(\vec{p}_1, t_1; \vec{p}_0, t_0) = \Theta(t_1 - t_0)\left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t_1 - t_0)}\right]^{3/2} \times$$
$$\times \int d^3x_0\, d^3x_1 \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_0 \cdot \vec{x}_0 - \vec{p}_1 \cdot \vec{x}_1)\right] \exp\left[\frac{im(\vec{x}_1 - \vec{x}_0)^2}{2\hbar(t_1 - t_0)}\right]$$

Benutze Koordinatenwechsel

$$\vec{x} = \vec{x}_0 - \vec{x}_1, \quad \vec{X} = \vec{x}_0 + \vec{x}_1$$

$$\vec{p} = \vec{p}_0 - \vec{p}_1, \quad \vec{P} = \vec{p}_0 + \vec{p}_1$$

$$\rightarrow \quad 2(\vec{p}_0 \cdot \vec{x}_0 - \vec{p}_1 \cdot \vec{x}_1) = \vec{P} \cdot \vec{x} + \vec{p} \cdot \vec{X}$$

mit Jacobi-Determinante $\left(\frac{1}{2}\right)^3 = \frac{1}{8}$

mit $\alpha = \frac{m}{2\hbar(t_1-t_0)}$

$$K_0(\vec{p}_1,t_1;\vec{p}_0,t_0) = \Theta(t_1-t_0)\left(\frac{\alpha}{i\pi}\right)^{3/2} \int \exp\left(\frac{i}{2\hbar}\vec{P}\cdot\vec{x}\right) e^{i\alpha\vec{x}^2} d^3x$$

$$\times \frac{1}{8} \underbrace{\int \exp\left(\frac{i}{2\hbar}\,\vec{p}\cdot\vec{X}\right) d^3X}_{=\,8\cdot(2\pi\hbar)^3\,\delta(\vec{p})}$$

Darin

$$\int \exp\left(\frac{i}{2\hbar}\vec{P}\cdot\vec{x} + i\alpha\vec{x}^2\right) d^3x = \left(\frac{\pi}{-i\alpha}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{\vec{P}^2}{16\hbar^2 i\alpha}\right)$$

Damit und mit $\vec{P}^2 = 4\vec{p}_0^{\,2}$ wegen $\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_0)$:

$$K_0(\vec{p}_1,t_1;\vec{p}_0,t_0) = (2\pi\hbar)^3\,\Theta(t_1-t_0)\,\delta(\vec{p}_0-\vec{p}_1)\exp\left(\frac{-i\vec{p}_0^{\,2}(t_1-t_0)}{2\hbar m}\right)$$

Jetzt führen wir noch eine Fourier-Transf. bzgl. t aus:

$$K_0(\vec{p}_1,E_1;\vec{p}_0,E_0) = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}E_1t_1\right) K_0(\vec{p}_1,t_1;\vec{p}_0,t_0)\,\times$$

$$\times \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_0t_0\right) dt_0\,dt_1$$

$$= (2\pi\hbar)^3\,\delta(\vec{p}_0-\vec{p}_1)\int\Theta(\tau)\exp\left(\frac{-i\vec{p}_1^{\,2}}{2m\hbar}\tau\right)\times$$

$\tau = t_1 - t_0$

$$\times \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_1t_1 - E_0t_0)\right] dt_0\,dt_1$$

$$= (2\pi\hbar)^3\,\delta(\vec{p}_0-\vec{p}_1)\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)t_0\right]dt_0}_{=\,(2\pi\hbar)\,\delta(E_1-E_0)}\int_{-\infty}^{\infty}\Theta(\tau)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(E_1-\frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m}\right)\tau\right]d\tau$$

Das zweite Integral ist von der Form

$$\int_0^\infty e^{i\omega\tau}\, d\tau \,,$$

also für reelle ω nicht konvergent.
Um konvergent zu kriegen, setzen wir

$$\omega \longrightarrow \omega + i\varepsilon$$

mit $\varepsilon > 0$.

$$\rightarrow \quad \int_0^\infty e^{(i\omega-\varepsilon)\tau}\, d\tau = \frac{i}{\omega+i\varepsilon}$$

[NB: $\Theta(t) = \lim_{\varepsilon \searrow 0} \frac{1}{2\pi} \int e^{i\omega t} \frac{1}{\omega+i\varepsilon}\, d\omega$

Damit

$$\boxed{K_0(\vec{p}_1, E_1; \vec{p}_0, E_0) = (2\pi\hbar)^4\, \delta(\vec{p}_0 - \vec{p}_1)\, \delta(E_0 - E_1)\, \frac{i\hbar}{E_1 - \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m} + i\varepsilon}}$$

Beachte, daß also bei freier Propagation Energie und Impuls erhalten sind, wie hier explizit sichtbar.