

Pfadintegralformulierung der QM

(Dirac 1933, Feynman 1948)

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

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

$K(q_f, t_f; q_i, t_i)$ beschreibt also Wahrscheinlichkeitsamplitude 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.

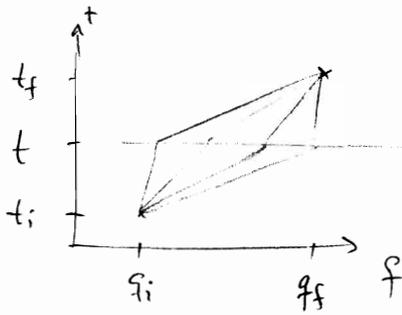
$$\psi(q_f, t_f) = \iint K(q_f, t_f; q, t) K(q, t; q_i, t_i) \psi(q_i, t_i) dq_i dq$$

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 $(q_i, t_i) \rightarrow (q, t)$ gefolgt von $(q, t) \rightarrow (q_f, t_f)$ mit allen möglichen Punkten q zur Zeit t .

Anschaulich



einaches Beispiel Doppelschlitz

$$\begin{array}{c} \times \\ 1 \end{array} \quad \begin{array}{c} 2A \\ 2B \end{array} \quad \begin{array}{c} \times \\ 3 \end{array}$$

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

$$L \quad P(3;1) = |k(3;1)|^2$$

mit der Notation

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

ist andererseits die Übergangsamplitude gegeben durch

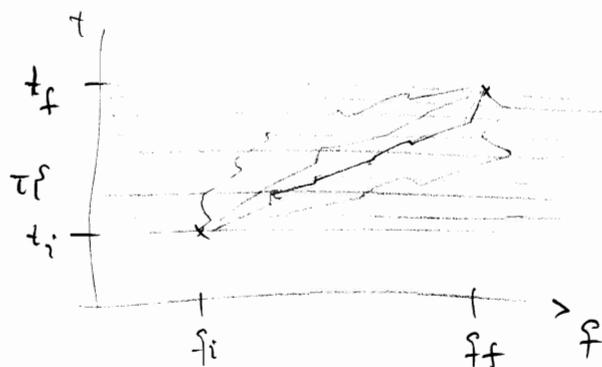
$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \langle q_f | e^{-iH(t_f-t_i)/\hbar} | q_i \rangle,$$

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

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

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

Betrachte kleinen Schritt $k \rightarrow k+1$.

$$\begin{aligned}
 \langle q_{k+1} | e^{-iH\tau/\hbar} | q_k \rangle &= \langle q_{k+1} | e^{-iH\tau/\hbar} | q_k \rangle \\
 &= \langle q_{k+1} | 1 - \frac{i}{\hbar} H\tau + \mathcal{O}(\tau^2) | q_k \rangle \\
 &\approx \delta(q_{k+1} - q_k) - \frac{i\tau}{\hbar} \langle q_{k+1} | H | q_k \rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp\left[\frac{i}{\hbar} p(q_{k+1} - q_k)\right] - \frac{i\tau}{\hbar} \langle q_{k+1} | H | q_k \rangle \quad (***)
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 \langle q_{k+1} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | q_k \rangle &= \int dp dp' \langle q_{k+1} | p' \rangle \langle p' | \frac{p^2}{2m} | p \rangle \langle p | q_k \rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp dp' \exp\left[\frac{i}{\hbar} (p'q_{k+1} - pq_k)\right] \frac{p^2}{2m} \delta(p - p') \\
 \langle q_{k+1} | p' \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'q_{k+1}/\hbar} \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp\left[\frac{i}{\hbar} p(q_{k+1} - q_k)\right] \frac{p^2}{2m} \quad \text{kein Operator mehr} \quad (***)
 \end{aligned}$$

Analog

$$\begin{aligned}
 \langle q_{k+1} | V(q) | q_k \rangle &= V\left(\frac{q_{k+1} + q_k}{2}\right) \langle q_{k+1} | q_k \rangle \\
 &\quad \text{Operator} \qquad \qquad \qquad \underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{=\bar{q}_k} \leftarrow \text{diese Wahl möglich wegen Delta-Plot.} \\
 &= V(\bar{q}_k) \delta(q_{k+1} - q_k) \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp\left[\frac{i}{\hbar} p (q_{k+1} - q_k)\right] V(\bar{q}_k)
 \end{aligned}$$

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

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

mit (**)

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

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

Damit wird voller Propagator in (*) im Kontinuumslimes

$$\begin{aligned}
 K(q_f t_f; q_i t_i) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_k \frac{dq_k dp_k}{2\pi\hbar} \times \\
 &\quad \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^n \left[p_k (q_{k+1} - q_k) - \tau H(p_k, \bar{q}_k)\right]\right\} \quad (\square)
 \end{aligned}$$

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

Das ist in symbolischer Schreibweise bzw.
als Pfadintegral

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

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, so.)

* 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 $\langle q_{n+1} | H(p, q) | q_n \rangle$ 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 delikate.

(→ Existenz?!) Die Lage ist besser mit "euklidischer Zeit", d.h. imaginäre Zeit $t \rightarrow i\tau$.

Falls

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

so kann man p -Integration ausführen.
Dann wird (□)

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

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

Einsatz über Gaußsche Integrale

Bekannt ist

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Betrachte quadratische Form

$$f(x) = -ax^2 + bx + c$$

Sei \bar{x} Wert von x , wo $f(x)$ maximal

$$\bar{x} = \frac{b}{2a} \quad \rightarrow \quad f(\bar{x}) = \frac{b^2}{4a} + c$$

$$\rightarrow f(x) = f(\bar{x}) - a(x - \bar{x})^2$$

Also

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{f(x)} dx &= e^{f(\bar{x})} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x - \bar{x})^2} dx \\ &= e^{f(\bar{x})} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \end{aligned}$$

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2 + bx + c) dx = \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right) \left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2}$$

Daraus mit Induktion:

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{i\lambda\left[(x_1 - a)^2 + (x_2 - x_1)^2 + \dots + (b - x_n)^2\right]\right\} dx_1 \dots dx_n \\ &= \left[\frac{i^n \pi^n}{(n+1)\lambda}\right]^{1/2} \exp\left[\frac{i\lambda}{n+1}(b-a)^2\right] \end{aligned}$$

Ein p_k -Integral ist

$$\int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \underbrace{-\frac{i\tau}{2m\hbar} p_k^2}_a + \underbrace{\frac{i}{\hbar} (q_{k+1} - q_k) p_k}_b - \underbrace{\frac{i\tau}{\hbar} V(\bar{q}_k)}_c \right\}$$

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

Davon haben wir $n+1$ Stück.

Mit Gaußscher Integration also

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

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

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 Übergangs-
amplituden.

Der Exponent im Integranden ist gerade die klassische Wirkung

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

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

In Worten:

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

Bemerkungen:

* Quantenfluktuationen

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

→ Im klassischen Grenzfall ($\hat{=} \hbar \rightarrow 0$) 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 $t \rightarrow it$ (imaginäre Zeit), erhält man eine Diffusionsgleichung (\rightarrow stochastischer Prozeß). Das Integral ist dann mathematisch besser definiert
 - \rightarrow Anwendungen in euklidischer Feldtheorie, statistischer Mechanik, Gitterfeldtheorie

- * 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 (\rightarrow Pfadintegralquantisierung)

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.

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

Einsetzen in

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

gibt eine Reihe

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

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

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

$$= \frac{1}{(n+1)^{1/2}} \left(\frac{2\pi t i \tau}{m} \right)^{n/2} \exp \left[\frac{i m}{2 t (n+1) \tau} (x_f - x_i)^2 \right]$$

(s.o.)

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

$$K_0(x_f, t_f; x_i, t_i) = \Theta(t_f - t_i) \left[\frac{m}{2\pi i t (t_f - t_i)} \right]^{1/2} \exp \left[\frac{i m (x_f - x_i)^2}{2 t (t_f - t_i)} \right]$$

↑
wg. Kausalität

Für K_1 finden wir

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

Beide Zeitintegrale diskretisiert:

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

$$\times \exp \left[\frac{i m}{2 t \tau} \sum_{k=0}^n (x_{k+1} - x_k)^2 \right] V(x_l, t_l)$$

↑
von x_l abhängig

Durch Aufspalten der Summe im Exponenten

$$K_1 = -\frac{i}{\hbar} \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{l=1}^n \int dx_l \left\{ \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{n-l+1}{2}} \int \exp \left[\frac{i m}{2\hbar \tau} \sum_{k=l}^n (x_{k+1} - x_k)^2 \right] dx_{l+1} \dots dx_n \right\} \times V(x_l, t_l) \left\{ \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{l}{2}} \int \exp \left[\frac{i m}{2\hbar \tau} \sum_{k=0}^{l-1} (x_{k+1} - x_k)^2 \right] dx_1 \dots dx_{l-1} \right\}$$

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 $\sum_l \int dx_l \rightarrow \int dx dt$

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

Es war

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

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

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

$$K_2 = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 K_0(x_f, t_f; x_2, t_2) \times \\ \times V(x_2, t_2) K_0(x_2, t_2; x_1, t_1) V(x_1, t_1) K_0(x_1, t_1; x_i, t_i)$$

Damit

$$\begin{aligned}
 k(x_f, t_f; x_i, t_i) &= k_0(x_f, t_f; x_i, t_i) \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \int k_0(x_f, t_f; x_1, t_1) V(x_1, t_1) k_0(x_1, t_1; x_i, t_i) dx_1 dt_1 \\
 &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \int k_0(x_f, t_f; x_1, t_1) V(x_1, t_1) k_0(x_1, t_1; x_2, t_2) \\
 &\quad \quad V(x_2, t_2) k_0(x_2, t_2; x_i, t_i) dx_1 dx_2 dt_1 dt_2 \\
 &\quad + \dots
 \end{aligned}$$

→ Bornsche Reihe in Diagrammen:

$$\begin{aligned}
 k &= \begin{array}{c} x_f t_f \\ \diagup \\ x_i t_i \end{array} + \begin{array}{c} \diagup \\ \otimes \\ x_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \diagup \\ \otimes \\ x_2 t_2 \\ \diagdown \\ \otimes \\ x_1 t_1 \end{array} + \dots \\
 &= k_0 + k_1 + k_2 + \dots
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2!} \int V(t') V(t'') dt' dt'' &= \frac{1}{2!} \int \left[\theta(t' - t'') V(t') V(t'') + \right. \\
 &\quad \left. + \theta(t'' - t') V(t') V(t'') \right] dt' dt'' \\
 &= \int \theta(t_1 - t_2) V(t_1) V(t_2) dt_1 dt_2
 \end{aligned}$$

usw. für $n > 2$.

Freier Propagator als Green'sche 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

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}_f, t_f) &= \int k_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_i, t_i) \psi(\vec{x}_i, t_i) d\vec{x}_i \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int k_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}, t) V(\vec{x}, t) k_0(\vec{x}, t; \vec{x}_i, t_i) \psi(\vec{x}_i, t_i) dt d\vec{x} dt_i \\ &\quad + \dots \end{aligned}$$

Bei Konvergenz bedeutet das gerade, daß die Terme (...) das letzte k_0 zu k modifizieren. Also

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}_f, t_f) &= \int k_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_i, t_i) \psi(\vec{x}_i, t_i) d\vec{x}_i + \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int k_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}, t) V(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) d\vec{x} dt \end{aligned}$$

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 exakte Integralgleichung für ψ .

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

$$\rightarrow \psi(\vec{x}_f, t_f) = \phi(\vec{x}_f, t_f) - \frac{i}{\hbar} \int k_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}, t) V(\vec{x}, t) \phi(\vec{x}, t) d\vec{x} dt$$

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

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{x}_f}^2 \psi(\vec{x}_f, t_f) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}_f, t_f) = V(\vec{x}_f, t_f) \psi(\vec{x}_f, t_f)$$

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

Daher

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{x}_f}^2 \left(-\frac{i}{\hbar} \int k_0 \dots \right) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t_f} \left(-\frac{i}{\hbar} \int k_0 \dots \right) = V(\vec{x}_f, t_f) \left(-\frac{i}{\hbar} \int k_0 \dots \right)$$

In $(\int k_0 \dots)$ hängt aber nur k_0 von x_f, t_f ab

Also

$$\begin{aligned} & \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{x}_f}^2 k_0 \right) V(\vec{x}, t) \phi(\vec{x}, t) d\vec{x} dt \\ & + \int \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_f} k_0 \right) V(\vec{x}, t) \phi(\vec{x}, t) d\vec{x} dt \\ & = i\hbar \int \delta(\vec{x}_f - \vec{x}) \delta(t_f - t) V(\vec{x}, t) \phi(\vec{x}, t) d\vec{x} dt \end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{x}_f}^2 k_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}, t) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t_f} k_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}, t) = \\ & = i\hbar \delta(\vec{x}_f - \vec{x}) \delta(t_f - t), \end{aligned}$$

d.h. k_0 ist die Greensche Funktion der Schrödingergleichung