



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO
FACOLTÀ DI SCIENZE E TECNOLOGIE
Corso di Laurea Triennale in Fisica

L'integrale di Feynman per l'atomo di idrogeno

Relatore:
Prof. Luca G. Molinari

Elaborato Finale di:
Claudio Valletta
matr. 802847
Codice PACS: 03.65.-w

Anno Accademico 2013 - 2014

Indice

1	Introduzione	3
2	Primi postulati	5
2.1	Intuizione fisica	5
2.2	L'azione classica	6
2.3	Formulazione matematica dei Path Integrals	7
2.4	Eventi in successione	9
2.5	Funzione d'onda	10
2.6	Corrispondenza nel limite classico	13
2.7	Trasformazioni di Gauge	14
2.8	Propagatore per la particella libera	15
2.9	Oscillatore armonico	17
2.10	Sistemi a più gradi di libertà	20
2.11	Sistemi non separabili	22
2.12	Formula di Feynman-Kac	23
2.13	Diagrammi di Feynman	25
3	Trasformazione di Stiefel-Kustaanheimo	28
4	Atomo d'Idrogeno	34

Capitolo 1

Introduzione

La meccanica quantistica è stata inizialmente sviluppata usando il linguaggio matematico proprio della teoria Hamiltoniana della meccanica classica. Questo perchè la nozione classica di coordinate ed impulsi generalizzati ha un immediato analogo quantistico. Tuttavia esiste una versione alternativa della dinamica classica, ed è la cosiddetta formulazione Lagrangiana, che richiede l'uso di coordinate e velocità; le due formulazioni usano un approccio differente ma sono, ovviamente, matematicamente equivalenti, quindi non si giunge a nuovi, fondamentali risultati. Tuttavia scoprire un nuovo modo di ottenere teorie già note è estremamente interessante e meraviglioso, ci possono infatti essere problemi per i quali il nuovo punto di vista offre un sensibile vantaggio; c'è anche la speranza che la nuova formulazione ispiri un'idea per la modifica delle presenti teorie, qualora esse non siano in accordo con i dati sperimentali.

Inoltre ci sono ragioni per ritenere la formulazione Lagrangiana più fondamentale di quella Hamiltoniana. In primo luogo il metodo Lagrangiano dà modo di unificare tutte le equazioni del moto ed esprimerle come le proprietà stazionarie di una certa funzione detta Azione (questa azione non è altro che l'integrale nel tempo della Lagrangiana). Non c'è un corrispondente principio di minima azione in termini di coordinate e momenti della teoria Hamiltoniana. In secondo luogo il metodo Lagrangiano può facilmente venire espresso relativisticamente tenendo conto che l'azione è un invariante relativistico, mentre la scrittura Hamiltoniana è sostanzialmente in forma non relativistica in quanto implica una particolare variabile temporale, cioè quella coniugata canonicamente alla funzione di Hamilton.

Per queste considerazioni può sembrare necessario interrogarsi a cosa corrisponda, nella teoria quantistica, il metodo Lagrangiano della meccanica classica. Tuttavia ci si imbatte subito nel risultato che non si può giungere alle equazioni di Lagrange in un modo rapido e diretto; infatti le equazioni di Lagrange involgono derivate parziali rispetto alla posizione ed alla velocità, che non hanno un preciso significato quantistico. L'unico processo di diffe-

renziamento che può essere fatto è quello di usare le Parentesi di Poisson, ma questo conduce alla formulazione Hamiltoniana. Dobbiamo quindi cercare la nostra Teoria Lagrangiana in un modo indiretto, descritto da Feynman in un articolo del 1948 [1], che ha sviluppato dei concetti portati alla luce da Dirac [2], il quale dimostra che

$$\langle q_t | Q_T \rangle \quad \text{corrisponde a} \exp i \int_t^T L/h dt \quad (1.1)$$

Feynman ha sviluppato questa equazione, interrogandosi su cosa voglia dire, matematicamente parlando, quel "corrisponde a" non meglio precisato da Dirac.

L'obiettivo di questo lavoro è di studiare quantitativamente la formulazione di Feynman della meccanica quantistica, o formulazione lagrangiana, le cui basi vengono espone nel secondo capitolo; nel terzo viene studiata in dettaglio la trasformazione di Stiefel-Kustaanheimo, che ci servirà per applicare, nel quarto capitolo, l'integrale sui cammini a uno dei sistemi fisicamente più importanti: l'atomo d'idrogeno.

Capitolo 2

Primi postulati

2.1 Intuizione fisica

Per capire qualitativamente la formulazione di Feynman della meccanica quantistica prendiamo in analisi l'esperimento della doppia fenditura.

Il nostro esperimento immaginario (o Gedankenexperiment, come direbbe Einstein) è illustrato in figura 2.1.

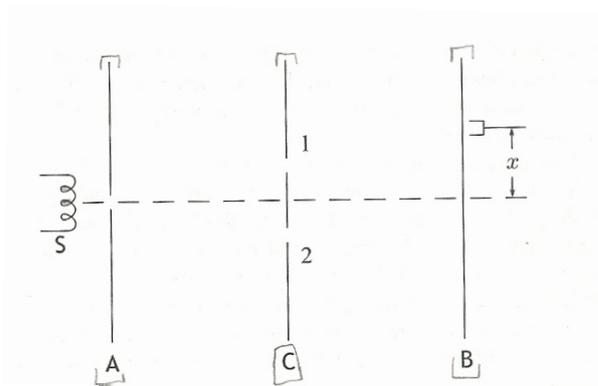


Figura 2.1: L'apparato sperimentale

In A abbiamo una sorgente S che emette elettroni con la stessa energia, ma direzioni diverse, verso uno schermo C dove sono praticate due fenditure 1 e 2, infine dietro, sul piano B abbiamo un contatore di elettroni che può essere sistemato ad una distanza x variabile dal centro dello schermo. Ogni volta che l'elettrone colpisce il contatore non c'è modo di scoprire attraverso quale apertura sia passato; ripetendo l'esperimento molte volte appare un pattern d'interferenza, dimostrando che la probabilità $P(x)$ di arrivare ad una distanza x dal centro dello schermo non è uguale alla probabilità P_1 di arrivarci con solo la prima fenditura aperta sommata alla probabilità P_2 di arrivarci con solo la seconda fenditura aperta.

Possiamo ottenere la formula giusta per $P(x)$ dicendo che essa è il modulo quadro di una certa quantità complessa $\phi(x)$ chiamata ampiezza di probabilità. Inoltre $\phi(x)$ è una somma di due contributi $\phi_1(x)$ che è l'ampiezza di probabilità di arrivare in x attraverso la prima apertura, e $\phi_2(x)$ che è l'ampiezza di probabilità di arrivare in x attraverso la seconda fenditura. Piuttosto che sommare probabilità dobbiamo quindi sommare ampiezze di probabilità che corrispondono a diversi possibili cammini per l'elettrone. Immaginiamo ora di aggiungere allo schermo più fenditure. Ci sono più cammini che contribuiscono alla probabilità di arrivare in x ; aumentando ora il numero di aperture e rendendole infinitesimamente vicine scompare tutto lo schermo, e la probabilità di arrivare in x sarà ora la somma (o piuttosto l'integrale) di tutti i possibili cammini che passano per il piano dove c'era lo schermo. Chiaramente ora mettiamo sempre più schermi, infinitesimamente vicini, nei quali inseriamo fenditure ancora una volta infinitesimamente vicine, arriviamo quindi a capire che l'ampiezza di probabilità $\phi(x)$ di arrivare in x è data da una somma di contributi per ogni cammino che congiunge la sorgente al punto x , tenendo conto anche di quelli non permessi classicamente.

il problema è capire in che modo contribuisca ogni cammino; chiaramente ci aspettiamo che nel $\lim \hbar \rightarrow 0$ rimangano solo quelli classicamente possibili.

2.2 L'azione classica

Uno dei modi più eleganti di esprimere le equazioni del moto è il *principio di minima azione*. Secondo questo principio ogni sistema è caratterizzato da una determinata funzione $L(q, \dot{q}, t)$, inoltre il moto del sistema soddisfa la seguente condizione.

Supponiamo che negli istanti $t = t_1$ e $t = t_2$ il sistema occupi posizioni determinate, caratterizzate dai due insiemi di valori delle coordinate q^1 e q^2 . Allora, entro queste posizioni, il sistema si muove in modo tale che l'integrale

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}, t) dt \quad (2.1)$$

Abbia un valore estremo. la funzione L viene chiamata *lagrangiana* del sistema.

In meccanica classica, per una particella di massa m soggetta ad un potenziale $V(x, t)$ la lagrangiana è

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) \quad (2.2)$$

Il cammino classico \tilde{x} che rende estremo l'azione è determinato dal calcolo delle variazioni. Imponendo $\delta S = 0$ si giunge [3] alle equazioni di Eulero-Lagrange.

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad (2.3)$$

2.3 Formulazione matematica dei Path Integrals

Ora possiamo passare alla regola quantistica. Dobbiamo capire quanto contribuisca ogni traiettoria all'ampiezza totale di andare da a a b . Non contribuisce solo il particolare cammino che estrema l'azione ma influiscono tutti i possibili cammini, anche quelli non permessi classicamente.

La probabilità $P(b, a)$ di arrivare ad un punto x_b in un tempo t_b partendo da un punto x_a ad un tempo t_a sarà uguale a:

$$P(b, a) = |K(b, a)|^2$$

Dove l'ampiezza K , anche detto Kernel, è una somma di contributi $\phi[x(t)]$ di ciascun cammino.

$$K(b, a) = \sum_{\text{cammini da a in b}} \phi[x(t)] \quad (2.4)$$

Per quanto visto nell'introduzione è ragionevole postulare che il contributo di ciascun cammino sia:

$$\phi[x(t)] = \text{const} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right) \quad (2.5)$$

L'azione è quella corrispondente al sistema classico, la costante viene scelta per normalizzare K correttamente e la ricaveremo nelle prossime sezioni.

Anche se un'idea qualitativa di una somma di contributi per ciascun cammino è chiara abbiamo bisogno di una trattazione più precisa dal punto di vista matematico. Infatti il numero di cammino è infinito, e non è chiaro a prima vista come costruire la somma.

Innanzitutto scegliamo un sottoinsieme di cammini, per fare ciò dividiamo la variabile temporale indipendente in passi di larghezza ξ . Questo ci dà un insieme di valori t_i spazati di ξ che appartengono all'intervallo $[t_a, t_b]$. Per ciascun tempo t_i scegliamo un punto speciale x_i . Costruiamo dunque un cammino connettendo tutti i punti scelti con linee rette, ottenendo una linea spezzata che connette x_a e x_b . Possiamo ora definire una somma su tutti i cammini costruiti in questa maniera prendendo un multiplo dell'integrale su tutti i possibili valori x_i per i da 1 ad $N - 1$ dove

$$\begin{aligned} N\xi &= t_b - t_a \\ \xi &= t_{i+1} - t_i \\ t_0 &= t_a \quad t_N = t_b \\ x_0 &= x_a \quad x_N = x_b \end{aligned}$$

L'equazione risultante è:

$$K(b, a) \sim \int \dots \int \int \phi[x(t)] dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1}$$

Non integriamo su x_0 e su x_N perchè sono i punti iniziali e finali e dunque sono fissi. Possiamo ora far tendere ξ a 0, ma dobbiamo inserire un fattore di normalizzazione che ci aspettiamo dipenda da ξ .

Definire una tale costante sembra essere un problema difficile, e non sappiamo farlo per tutti i casi. Tuttavia per Lagrangiane del tipo (2.2) il fattore di normalizzazione risulta essere A^{-N} dove

$$A = \left(\frac{2\pi i \hbar \xi}{m} \right)^{1/2} \quad (2.6)$$

Vedremo tra qualche sezione come si ottiene questo risultato. Grazie a questo fattore il limite esiste e possiamo scrivere.

$$K(b, a) = \lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \dots \int e^{\frac{i}{\hbar} S[b, a]} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A} \quad (2.7)$$

Dove

$$S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt$$

È un integrale di linea preso sulla linea spezzata passante per i punti x_i come mostrato in Fig 2.2

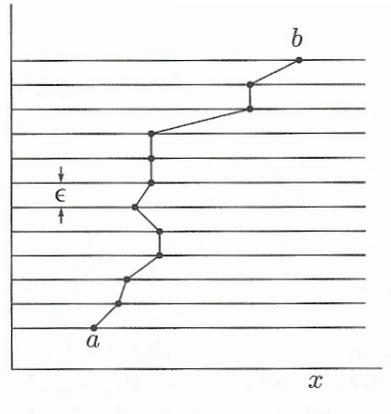


Figura 2.2: La somma sui cammini è definita come un limite, nel quale la traiettoria è specificata dando la coordinata x in un grande numero di tempi, separati da piccoli intervalli ξ . La somma è un integrale su tutte le possibili x . infine per ottenere la misura corretta viene preso il limite di ξ che tende a 0

Il Path integral in (2.7) è spesso indicato in letteratura, alleggerendo la notazione come

$$K(b, a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar} S[b, a]} Dx(t) \quad (2.8)$$

E viene chiamato, più comunemente, propagatore o funzione di Green [4].

2.4 Eventi in successione

In questa sezione deriviamo una regola importante per la composizione di ampiezze di eventi che occorrono successivamente nel tempo.

Supponiamo che t_c sia un certo tempo tra t_a e t_b allora l'azione su qualsiasi cammino tra a e b può essere scritta come

$$S[b, a] = S[b, c] + S[c, a] \quad (2.9)$$

Usando Eq.(2.8) per definire il Kernel possiamo scrivere

$$K(b, a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar} S[b, c] + \frac{i}{\hbar} S[c, a]} Dx(t) \quad (2.10)$$

È quindi possibile dividere qualsiasi cammino in due parti. La prima parte che ha come punti iniziali e finali x_a e x_c e la seconda che ha come punti iniziali e finali x_c e x_b come mostrato in Fig 2.3 È possibile integrare su tutti

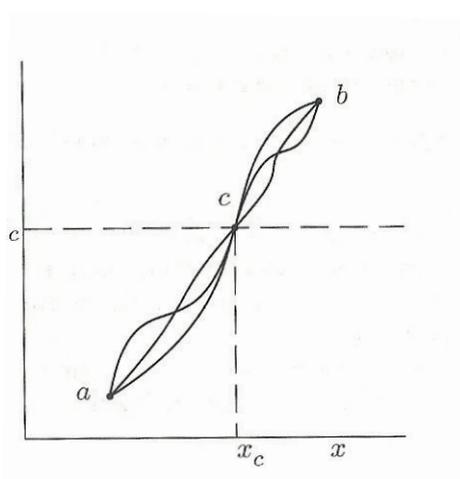


Figura 2.3: La somma su tutti i cammini può essere ottenuta sommando prima su tutti i cammini che passano per il punto c e poi integrando su tutti i possibili valori x_c .

i cammini da a a c , poi su tutti i cammini da c a b e infine su tutti i valori x_c ottenendo quindi

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} K(b, c)K(c, a)dx_c \quad (2.11)$$

È banale ora generalizzare questa regola a più eventi in successione, ad esempio prendendo due divisioni dell'intervallo a, b , una al tempo t_c e l'altra al tempo t_d ; possiamo infatti scrivere

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(b, c)K(c, d)K(d, a)dx_c dx_d \quad (2.12)$$

Possiamo continuare questo processo fino a che non abbiamo diviso l'intervallo temporale t_b, t_a in N intervalli. Il risultato è

$$K(b, a) = \int_{x_{n-1}} \dots \int_{x_2} \int_{x_1} K(b, N-1)K(n-1, N-2)\dots K(1, a)dx_1dx_2\dots dx_{N-1} \quad (2.13)$$

Grazie a quest'equazione possiamo definire il Kernel in maniera differente rispetto a quella data in Eq(2.7).

Il Kernel, per una particella tra due punti separati da un intervallo infinitesimo di tempo ξ , è:

$$K(i+1, i) = \frac{1}{A} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \xi L\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\xi}, \frac{x_{i+1} + x_i}{2}, \frac{t_{i+1} + t_i}{2}\right)\right) \quad (2.14)$$

Che è corretta al primo ordine in ξ . Si può dimostrare che si arriva allo stesso risultato di (2.7)

2.5 Funzione d'onda

Abbiamo ottenuto l'ampiezza di probabilità, per una particella materiale, di raggiungere un particolare punto b nello spazio e nel tempo, partendo da un evento iniziale a . Tuttavia è spesso utile considerare l'ampiezza di arrivare in punto b senza interessarsi all'evento iniziale. Possiamo quindi dire che $\psi(x, t)$ è l'ampiezza totale di arrivare nel punto (x, t) da un qualche evento passato non specificato. L'ampiezza di probabilità $\psi(x, t)$ si chiama funzione d'onda.

Quindi il Kernel $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ è una funzione d'onda, che ci dà più informazioni, in particolare è l'ampiezza per il caso speciale nel quale la particella proviene da (x_a, t_a) . Può succedere che questa informazione non sia di interesse nel problema, non è quindi utile tenerne traccia.

Dato che la funzione d'onda $\psi(x_b, t_b)$ non ha nessuna dipendenza dal punto dal quale è partita la particella possiamo prendere il Kernel $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ ed integrare su tutti i possibili punti x_a dai quale proviene la particella, ottenendo

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_b, t_b; x_a, t_a) \psi(x_a, t_a) dx_a \quad (2.15)$$

Questo risultato può essere giustificato più rigorosamente tenendo conto che $\psi(x_b, t_b)$ è un'ampiezza, e quindi usare Eq(2.11).

Questa è un'equazione molto importante, vediamo infatti che se conosciamo la funzione d'onda in un tempo particolare, tramite essa possiamo sapere come evolverà la funzione d'onda. Siamo riusciti a esprimere tutti gli effetti della storia passata di una particella in un'unica funzione. Da qui il Kernel prende anche il nome di propagatore. Non sfugge il legame con la funzione di Green dell'equazione di Shrodinger, possiamo quindi anticipare i risultati

che ricaveremo poi dicendo che questa è la versione integrale dell'equazione di Shrodinger.

Dimostriamo ora l'equivalenza tra (2.15), che regola l'evoluzione della funzione d'onda tramite un integrale, e l'equazione di Shrodinger

$$\widehat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.16)$$

Prendiamo (2.15) e applichamola nel caso in cui il tempo t_b differisca per un tempo infinitesimo da t_a .

$$t_b = t_a + \xi$$

Per piccoli intervalli temporali l'azione non è altro che la Lagrangiana moltiplicata per ξ , quindi otteniamo

$$\psi(x, t + \xi) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \xi L\left(\frac{x-y}{\xi}, \frac{x+y}{2}, t\right)\right) \psi(y, t) dy \quad (2.17)$$

Applichiamo questo al caso speciale di una particella che si muove in un potenziale $V(x, t)$ cioè una per cui la lagrangiana è della forma $L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t)$. In questo caso (2.17) diventa

$$\psi(x, t + \xi) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m(x-y)^2}{2\xi}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \xi V\left(\frac{x+y}{2}, t\right)\right) \psi(y, t) dy \quad (2.18)$$

É chiaro che la quantità $\frac{(x-y)^2}{\xi}$ che compare all'esponente del primo fattore dà un contributo significativo all'integrale solo quando y è molto vicino ad x . Infatti se y fosse apprezzabilmente diversa da x l'esponenziale oscillerebbe rapidamente al variare di y . Quando l'esponenziale oscilla velocemente l'integrale su y dà un contributo molto piccolo. Possiamo quindi porre $y = x + \nu$ tenendo presente che contribuiscono significativamente all'integrale solo termini con ν molto piccolo. Otteniamo

$$\psi(x, t + \xi) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{im\nu^2}{2\hbar\xi}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \xi V(x + \nu/2, t)\right) \psi(x + \nu, t) d\nu \quad (2.19)$$

La fase del primo esponenziale va da 0 a 1 radianti quando ν va da 0 a $\sqrt{\frac{2\hbar\xi}{m}}$, quindi il contributo maggiore all'integrale è dato da valori di ν di quest'ordine. Possiamo ora espandere ψ in serie di potenze, tenendo solo i termini nell'ordine ξ , che implica tenere termini del secondo ordine in ν . Otteniamo

$$\psi(x, t) + \xi \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{im\nu^2}{2\hbar\xi}\right) \left[1 - \frac{i}{\hbar} \xi V(x, t)\right] \left[\psi(x, t) + \nu \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\nu^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right] \quad (2.20)$$

Perchè questa equazione sia vera il coefficiente del membro di sinistra che moltiplica la $\psi(x, t)$ deve essere uguale a quello di destra. Otteniamo quindi

$$\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{im\nu^2}{2\hbar\xi}\right) d\nu = 1 \quad (2.21)$$

Abbiamo ottenuto l'espressione anticipata in (2.6) per il coefficiente A

$$A = \left(\frac{2\pi i\hbar\xi}{m}\right)^{1/2} \quad (2.22)$$

Per valutare i termini rimanenti del membro di destra dell'Eq(2.20) dobbiamo usare i due integrali notevoli

$$\begin{aligned} \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \nu \exp\left(\frac{im\nu^2}{2\hbar\xi}\right) d\nu &= 0 \\ \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \nu^2 \exp\left(\frac{im\nu^2}{2\hbar\xi}\right) d\nu &= \frac{i\hbar\xi}{m} \end{aligned}$$

Usando i due integrali riscriviamo Eq(2.20) come

$$\psi + \xi \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi - \frac{i}{\hbar} \xi V \psi + \frac{i\hbar\xi}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (2.23)$$

Che è vera se ψ soddisfa l'equazione differenziale

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x, t) \psi \right] \quad (2.24)$$

Questa è l'equazione di Shrodinger per una particella che si muove in una dimensione. Può essere riscritta nella forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (2.25)$$

Dove \hat{H} indica un operatore che agisce su ψ , e viene chiamato *Operatore Hamiltoniano*. Nel nostro caso abbiamo che

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \quad (2.26)$$

Chiaramente si poteva scegliere l'equazione di Shrodinger come punto di partenza e ricavare da qui il formalismo Lagrangiano dei Feynman Path Integral [4], andando a considerare la funzione di Green dell'equazione di Shrodinger. Infatti il propagatore K risulta essere la funzione tale che

$$\left(H_x - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) K(x, x', t, t') = -i\hbar \delta(x - x') \delta(t - t') \quad (2.27)$$

Da qui vediamo che il kernel di Feynman (2.7) non è altro che la funzione di Green dell'equazione di Shrodinger.

2.6 Corrispondenza nel limite classico

Dato che tutti i cammini contribuiscono egualmente al Kernel, anche se la loro fase varia, non è chiaro come, nel limite classico, ne diventi importante solo uno. L'approssimazione classica è quella nella quale l'azione S è molto grande paragonata ad \hbar . Ora se aggiungiamo al cammino un cambiamento δx piccolo su una scala classica, l'azione S misurata in unità di \hbar cambia di molto, e la fase oscillerà molto rapidamente. Il contributo totale andrà quindi a 0 perchè se una certa perturbazione δx darà un contributo positivo ce ne sarà un altro che darà un contributo negativo. Ciò che rimane è il cammino per il quale, se aggiungiamo un termine δx l'azione non cambia al primo ordine, ovvero rimane il cammino che estrema l'azione. Per dimostrarlo più rigorosamente dal punto di vista matematico consideriamo un integrale della forma

$$F(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\lambda f(t)) dt \quad (2.28)$$

Vogliamo dimostrare che per $\lambda \rightarrow \infty$ contribuiscono significativamente all'integrale solo le regioni in cui $f' = 0$.

Supponiamo che f' si annulli in un solo punto t_0 . Trascurando contributi all'integrale da regioni distanti da t_0 possiamo espandere f in serie di Taylor, ottenendo

$$F(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\lambda f(t_0) + \frac{1}{2}i\lambda(t-t_0)^2 f''(t_0) + \dots) dt \quad (2.29)$$

Svolgendo questo integrale otteniamo

$$F(\lambda) = \sqrt{\frac{2i\pi}{\lambda f''(t_0)}} e^{i\lambda f(t_0)} \quad (2.30)$$

Viceversa se $f'(t) \neq 0$ per $\alpha < t < \beta$ possiamo cambiare variabile $z = f(t)$, trasformando (2.28) in

$$F(\lambda) = \int_{f(\alpha)}^{f(\beta)} \exp(i\lambda z) \phi(z) dz \quad (2.31)$$

dove $\phi(z) = \frac{1}{f'(t)}$.

Assumendo che ϕ sia differenziabile possiamo integrare per parti ottenendo

$$F(\lambda) = \frac{1}{i\lambda} [\phi(z)e^{i\lambda z}]_{f(\alpha)}^{f(\beta)} - \frac{1}{i\lambda} \int_{f(\alpha)}^{f(\beta)} \exp(i\lambda z) \left(\frac{d\phi}{dz}\right) dz \quad (2.32)$$

Termini che decrescono quindi come $\frac{1}{\lambda}$, trascurabili rispetto a (2.30), dove avevamo ottenuto che $F(\lambda)$ è proporzionale a $\frac{1}{\sqrt{\lambda}}$

2.7 Trasformazioni di Gauge

È noto dalla meccanica classica che le lagrangiane $L(q, \dot{q}, t)$ e $L'(q, \dot{q}, t) = L(q, \dot{q}, t) + \frac{d}{dt}f(q, t)$ danno luogo alle stesse equazioni del moto [5], infatti le azioni S ed S' sono così legate

$$S' = S + f(q_2, t_2) - f(q_1, t_1) \quad (2.33)$$

Differiscono quindi per un termine supplementare che si annulla quando varia l'azione, la condizione $\delta S = 0$ viene a coincidere con la condizione $\delta S' = 0$ e la forma delle equazioni del moto rimane immutata. Vogliamo ora dimostrare che tale simmetria della lagrangiana rimane valida anche in meccanica quantistica.

È chiaro che nell'esponenziale presente nel Kernel comparirà il termine aggiuntivo

$$\sum_{i=1}^N f(x_i) - f(x_{i-1}) \quad (2.34)$$

Riconosciamo una serie telescopica, il risultato della somma è $f(x_b) - f(x_a)$, che è costante e non viene integrato. Il propagatore viene quindi mutato per un fattore di fase costante che non cambia la probabilità $P(a, b) = |K(a, b)|^2$.

Da questo grado di libertà che presenta la lagrangiana possiamo facilmente ottenere le trasformazioni di Gauge del campo elettromagnetico. Prendiamo infatti l'azione per una carica in un campo elettromagnetico [6]

$$S = \int_a^b (-mcds - \frac{e}{c} A_i dx^i) \quad (2.35)$$

Le tre componenti spaziali del quadrivettore A^i costituiscono un vettore tridimensionale A detto potenziale vettore del campo elettromagnetico. La componente temporale, $A^0 = \phi$ viene invece detta potenziale scalare. Differenti potenziali possono tuttavia dar luogo ad uno stesso campo; per convincerci di questo aggiungiamo a ciascuna componente del potenziale A_k la grandezza $-\frac{\partial f}{\partial x^k}$ dove f è una funzione arbitraria delle coordinate e del tempo. Il potenziale A_k diventa allora

$$A'_k = A_k - \frac{\partial f}{\partial x^k} \quad (2.36)$$

Questa sostituzione fa comparire nell'integrale in (2.35) un nuovo termine che rappresenta un differenziale totale:

$$\frac{e}{c} \frac{\partial f}{\partial x^k} dx^k = d\left(\frac{e}{c} f\right) \quad (2.37)$$

Il quale non influisce dunque sulle equazioni del moto. Abbiamo visto quindi la prova dell'invarianza di Gauge in meccanica quantistica, che è banale da ottenere usando la formulazione dovuta a Feynman; mentre non è così ovvia partendo dall'equazione differenziale di Shrodinger[7].

2.8 Propagatore per la particella libera

Vediamo in dettaglio come calcolare il propagatore in un esempio concreto, iniziamo dal più facile, ovvero la particella libera. La Lagrangiana per la particella libera è

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 \quad (2.38)$$

Il Kernel è quindi

$$K(b, a) = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\xi} \right)^{N/2} \int \dots \int \exp \left[\frac{im}{2\hbar\xi} \sum_{i=1}^N (x_i - x_{i-1})^2 \right] dx_1 \dots dx_{n-1} \quad (2.39)$$

Che rappresenta una serie di integrali gaussiani, una volta svolti [8] passiamo al limite ottenendo

$$K(b, a) = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar(t_b - t_a)} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)} \right] \quad (2.40)$$

Studiamo ora il significato fisico di questo Kernel. Per semplicità di notazione prendiamo il punto a come origine delle coordinate e del tempo.

L'ampiezza di arrivare in un punto $b = (x, t)$ sarà dunque

$$K(b, a) = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar t} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{imx^2}{2\hbar t} \right) \quad (2.41)$$

Se il tempo è fissato l'ampiezza varia con la distanza come mostrato in Fig 2.4 dove è disegnato l'andamento della parte reale di $\sqrt{i}K(x, t, 0, 0)$. Più

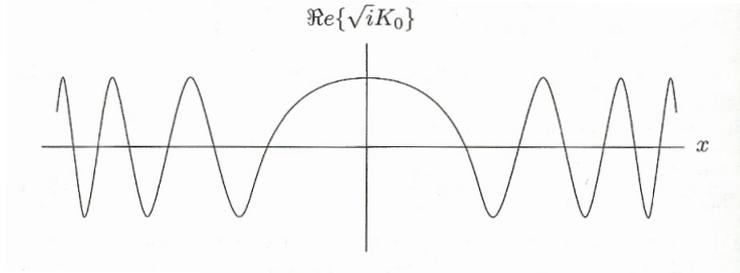


Figura 2.4: La parte reale di $\sqrt{i}K$ in funzione di x , con t fissato

ci allontaniamo dall'origine e più le oscillazioni diventano rapide. Se x è così grande che sono avvenute molte oscillazioni, allora la distanza tra i nodi successivi è quasi costante, cioè l'ampiezza si comporta come un'onda sinusoidale con lunghezza d'onda λ variabile lentamente. Per aumentare x di λ bisogna incrementare la fase di 2π cioè

$$2\pi = \frac{m(x + \lambda)^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar t} = \frac{mx\lambda}{\hbar t} + \frac{m\lambda^2}{2\hbar t} \quad (2.42)$$

Trascurando il secondo termine (cioè assumendo $x \gg \lambda$) troviamo

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m(x/t)} \quad (2.43)$$

Cioè l'ampiezza varia nello spazio con lunghezza d'onda

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (2.44)$$

Possiamo ora dimostrare questa relazione più in generale.

Supponiamo di realizzare un esperimento e di costruire uno strumento per il quale la fisica classica offra un'adeguata approssimazione. Lo strumento in questione porta particelle di momento p in un punto fissato. In queste situazioni il Kernel è approssimativamente

$$K \sim \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{cl}(b, a)\right] \quad (2.45)$$

Cambiamenti nella posizione finale x_b causano cambiamenti nell'azione. Se l'azione è grande paragonata ad \hbar il propagatore oscillerà molto rapidamente. Il cambiamento di fase per uno spostamento unitario del punto finale è

$$k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial S_{cl}}{\partial x_b} \quad (2.46)$$

Ma sappiamo dalla meccanica classica che $\frac{\partial S_{cl}}{\partial x_b}$ è il momento della particella, quindi otteniamo $p = \hbar k$. La grandezza k non è altro che il numero d'onda. Vediamo quindi che [?] non è altro che la formula di De Broglie che lega il momento della particella alla sua lunghezza d'onda.

Studiamo ora la dipendenza temporale del Kernel della particella libera in (2.41). In Fig 2.5 è rappresentata la parte reale di $\sqrt{i}K(x, t, 0, 0)$, dove x è fisso, mentre t varia. Vediamo che al variare di t variano sia l'ampiezza che la frequenza. Supponiamo che t sia abbastanza grande per trascurare i cambiamenti nell'ampiezza. Il periodo dell'oscillazione T è definito come il tempo richiesto perchè la fase dell'onda venga incrementata di 2π quindi

$$2\pi = \frac{mx^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar(t+T)} = \frac{mx^2}{2\hbar t^2} \left[\frac{T}{1+T/t} \right] \quad (2.47)$$

Introducendo la frequenza angolare $\omega = \frac{2\pi}{T}$ e assumendo $t \gg T$ possiamo riscrivere questa equazione come

$$\omega = \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{x}{t} \right)^2 \quad (2.48)$$

Dato che $\frac{m}{2} \left(\frac{x}{t} \right)^2$ è l'energia classica di una particella libera, da questa equazione ricaviamo che

$$E = \hbar\omega \quad (2.49)$$

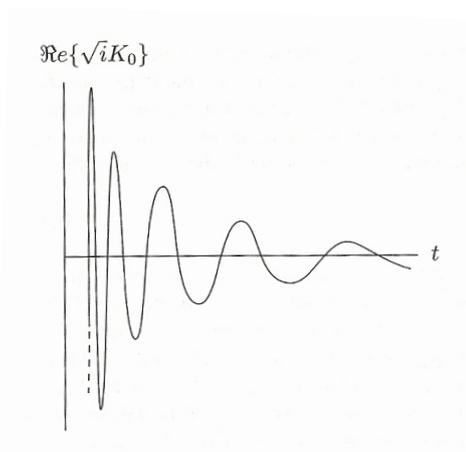


Figura 2.5: La parte reale di $\sqrt{i}K$ in funzione di t , con x fissato

Questa relazione, come quella precedente, rimane vera per qualsiasi strumento che può essere descritto con ottima approssimazione dalla fisica classica. Usando l'Eq(2.45) una qualsiasi variazione del tempo di arrivo t_b causerà rapide oscillazioni del propagatore. La frequenza risultante è data da

$$\omega = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial S_{cl}}{\partial t_b} \quad (2.50)$$

Ma la quantità $-\frac{\partial S_{cl}}{\partial t_b}$ è interpretata come l'energia classica della particella quindi otteniamo

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad (2.51)$$

In questo modo i concetti di energia e momento sono estesi alla meccanica quantistica grazie alle regole:

- Se l'ampiezza varia nello spazio come $\exp(ikx)$ allora diciamo che la particella ha un momento $p = \hbar k$
- se l'ampiezza varia nel tempo come $\exp(-i\omega t)$ diciamo che la particella ha un'energia $\hbar\omega$

2.9 Oscillatore armonico

Vogliamo ora ricavare il Propagatore per lagrangiane del tipo

$$L = a(t)\dot{x}^2 + b(t)\dot{x}x + c(t)x^2 + d(t)\dot{x} + e(t)x + f(t) \quad (2.52)$$

Chiamiamo con $\bar{x}(t)$ il cammino classico tra il punto iniziale e finale. Questo è il cammino che estrema l'azione S . Possiamo quindi scrivere

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t) \quad (2.53)$$

Ovviamente abbiamo che $dx_i = dy_i$. L'integrale per l'azione può ora essere scritto come

$$S[x(t)] = S[\bar{x}(t) + y(t)] = \int_{t_a}^{t_b} a(t)[\dot{\bar{x}}^2 + 2\dot{\bar{x}}\dot{y} + \dot{y}^2] + \dots dt \quad (2.54)$$

Raccogliendo tutti i termini dove non compare la y otteniamo $S_{cl} = S[\bar{x}(t)]$. L'integrale ottenuto raccogliendo tutti i termini lineari in y è nullo, in quanto \bar{x} è definito proprio come il cammino che estrema l'azione, ovvero che produce una variazione nulla al primo ordine. Ciò che rimane è solo l'integrale contenente termini al secondo ordine in y , otteniamo dunque

$$S[x(t)] = S_{cl}[b, a] + \int_{t_a}^{t_b} [a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2] dt \quad (2.55)$$

L' integrale sui cammini non dipende dal cammino classico $\bar{x}(t)$, quindi possiamo scrivere

$$K(b, a) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[b, a]\right) \int_0^1 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2] dt\right) Dy(t) \quad (2.56)$$

Dato che per tutti i cammini $y(t)$ inizia e finisce al punto $y = 0$ l'integrale può essere solo funzione del tempo nei punti iniziali e finali. Quindi il Kernel può essere scritto come

$$K(b, a) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[b, a]\right) F(t_b, t_a) \quad (2.57)$$

Il propagatore è determinato a meno di una funzione moltiplicativa di t_b e t_a . In particolare è completamente nota la dipendenza spaziale del Kernel, e la dipendenza dai coefficienti dei termini lineari $d(t)$, $e(t)$ e $f(t)$. Possiamo applicare quanto abbiamo visto al caso particolare dell'oscillatore armonico. Per l'oscillatore armonico abbiamo che $L = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)$. Chiamando $T = t_b - t_a$ abbiamo che l'azione classica è

$$S_{cl} = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} \left[(x_b^2 + x_a^2) \cos(\omega T) - 2x_b x_a \right] \quad (2.58)$$

(Per dimostrarlo è sufficiente prendere $x(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)$ ed integrare).

Quindi il Kernel risultante è

$$K = F(T) \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega T)} \left[(x_b^2 + x_a^2) \cos(\omega T) - 2x_b x_a \right]\right] \quad (2.59)$$

Vogliamo ora cercare di trovare la funzione moltiplicativa $F(T)$.

La funzione $F(T)$ è data da

$$F(T) = \int_0^1 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{m}{2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt\right) Dy(t) \quad (2.60)$$

Dato che per tutti i cammini $y(t)$ va da 0 in $t = 0$ a 0 in $t = T$ possiamo scomporlo in serie di Fourier, precisamente in una serie di seni con periodo T , ovvero

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \quad (2.61)$$

É quindi possibile specificare un cammino dai coefficienti a_n . Questa è una trasformazione lineare per la quale il jacobiano J è una costante adimensionale indipendente da m , ω e \hbar . Inserendo Eq (2.61) in Eq (2.60) possiamo scrivere il termine di energia cinetica come

$$\begin{aligned} \frac{m}{2} \int_0^T \dot{y}^2 dt &= \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{n\pi}{T} \frac{m\pi}{T} a_n a_m \int_0^T \cos\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \cos\left(\frac{m\pi t}{T}\right) dt \\ &= \frac{mT}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 a_n^2 \end{aligned} \quad (2.62)$$

E analogamente il termine di energia potenziale come

$$\frac{m\omega^2}{2} \int_0^T y^2 dt = \frac{m\omega^2 T}{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 \quad (2.63)$$

Assumendo che il tempo T sia diviso in vari step di lunghezza ξ , in modo che ci siano solo un numero finito N di coefficienti a_n il path integral diventa

$$F(T) = J \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{imT}{2\hbar} \sum_{n=1}^N \left(\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2\right) a_n^2\right] \frac{da_1}{A} \frac{da_2}{A} \dots \frac{da_N}{A} \quad (2.64)$$

Dato che l'esponente può essere separato in fattori può essere svolto l'integrale su ciascun coefficiente a_n . Il risultato è

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{imT}{2\hbar} \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2\right) a_n^2\right] \frac{da_n}{A} = \left(\frac{2}{\xi T}\right)^{1/2} \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2\right)^{-1/2} \quad (2.65)$$

Quindi l'integrale sui cammini è proporzionale

$$\prod_{n=1}^N \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2\right)^{-1/2} = \prod_{n=1}^N \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2}\right)^{-1/2} \prod_{n=1}^N \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2\pi^2}\right)^{-1/2} \quad (2.66)$$

il primo prodotto non dipende da ω e si unisce al jacobiano e altri fattori indipendenti da ω che abbiamo raccolto in una singola costante. Il secondo fattore ha come limite $\left(\frac{\sin(\omega T)}{\omega T}\right)^{-1/2}$ per $N \rightarrow \infty$. Quindi abbiamo che

$$F(T) = C \left(\frac{\sin(\omega T)}{\omega T}\right)^{-1/2} \quad (2.67)$$

dove C è una costante indipendente da ω . Ma per $\omega = 0$ l'integrale è quello di una particella libera, per la quale abbiamo già trovato che

$$F(T) = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar T} \right)^{1/2} \quad (2.68)$$

Perciò per l'oscillatore armonico abbiamo che

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)} \right)^{1/2} \quad (2.69)$$

Sostituendo nell'Eq(2.59) abbiamo l'espressione completa per il Kernel nel caso dell'oscillatore armonico.

2.10 Sistemi a più gradi di libertà

Come vanno modificati i ragionamenti svolti finora nel caso in cui abbiamo più gradi di libertà? Il Kernel può ancora essere rappresentato nella forma dell'Eq 2.8, tuttavia ora il simbolo $x(t)$ rappresenta più coordinate piuttosto che una sola.

Prendiamo come primo esempio quello di una particella libera che si muove in tre dimensioni; il cammino è definito dando tre funzioni $x(t)$, $y(t)$ e $z(t)$. L'azione è data da

$$S = \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} [\dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2 + \dot{z}(t)^2] dt \quad (2.70)$$

L'ampiezza di probabilità di arrivare da un punto iniziale (x_a, y_a, z_a) in un tempo t_a , a un punto finale (x_b, y_b, z_b) ad un tempo t_b è

$$K(x_b, y_b, z_b, t_b; x_a, y_a, z_a, t_a) = \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} (\dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2 + \dot{z}(t)^2) dt\right) Dx(t) Dy(t) Dz(t) \quad (2.71)$$

Se dividiamo il tempo in intervalli di lunghezza ξ , la posizione al tempo t_i è data dalle tre variabili x_i, y_i, z_i , e l'integrale in (2.7) viene ora sostituito da un integrale in dx_i, dy_i, dz_i . Dobbiamo tener conto della costante di normalizzazione A per ogni variabile, quindi se il tempo totale è suddiviso in N intervalli di lunghezza ξ dobbiamo includere il fattore A^{-3N} nell'integrale.

Un'altra situazione di grande interesse, in fisica classica e quantistica, che involve più variabili, è quello di due sistemi interagenti. Supponiamo che un sistema consista di una particella di massa m descritto da un sistema di coordinate x , mentre l'altro sistema sia una particella di massa M descritto da un sistema di coordinate X . Supponiamo che i due sistemi interagiscano tramite un potenziale $V(x, X)$. L'azione risultante è

$$S[x(t), X(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{M}{2} \dot{X}^2 - V(x, X) \right) dt \quad (2.72)$$

Quindi il Kernel è

$$K(x_b, X_b, t_b; x_a, X_a, t_a) = \int_a^b \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t), X(t)]\right) Dx(t)DX(t) \quad (2.73)$$

Il kernel K è qui l'ampiezza di probabilità che la particella di massa m vada da un punto iniziale dello spazio-tempo (x_a, t_a) ad un punto finale (x_b, t_b) , e la particella di massa M vada da (X_a, t_a) a (X_b, t_b) .

Supponiamo ora che l'azione risultante si possa separare in due parti, ovvero

$$S[x, X] = S_x[x] + S_X[X] \quad (2.74)$$

Dove in S_x contribuisce solo il cammino $x(t)$, mentre in S_X contribuisce solo il cammino $X(t)$.

In questo caso l'ampiezza di probabilità diventa il prodotto di due fattori, uno dipendente solo da x e uno solo da X , infatti

$$\begin{aligned} K(x_b, X_b, t_b; x_a, X_a, t_a) &= \\ &= \int_a^b \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} (S_x[x] + S_X[X])\right) D^3x(t)D^3X(t) \\ &= \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_x[x]\right) D^3x(t) \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_X[X]\right) D^3X(t) \\ &= K_x(x_b, t_b; x_a, t_a) K_X(X_b, t_b; X_a, t_a) \quad (2.75) \end{aligned}$$

Qui K_x è l'ampiezza calcolata come se fosse presente solo la particella di coordinate x , e analogamente K_X . Quindi in una situazione che involve due sistemi indipendenti il kernel relativo ad entrambi i sistemi è semplicemente il prodotto dei due propagatori indipendenti. La funzione d'onda in una situazione che involga varie particelle è definita analogamente; $\psi(x, X, \dots, t)$ è l'ampiezza che, in un tempo t , una particella sia nel punto x , un'altra sia nel punto X eccetera.

L'equazione (2.15) che vale per il caso unidimensionale, può facilmente essere generalizzata come

$$\psi(x, X, \dots, t) = \int \dots \int K(x, X, \dots, t; x', X' \dots t') \psi(x', X', \dots, t') d^3x' d^3X' \dots \quad (2.76)$$

Abbiamo visto che, se le particelle sono indipendenti, allora il Kernel K è il prodotto di propagatori indipendenti. Ciò, tuttavia, non implica che, in generale, $\psi(x, X, \dots, t)$ sia un prodotto di varie funzioni d'onda indipendenti. Nel caso speciale in cui ψ sia in un istante particolare un prodotto di funzioni indipendenti (ovvero $\psi(x, X, \dots) = f(x)g(X) \dots$) allora rimarrà così per tutti i tempi. Ciascun fattore cambierà come se fosse presente un sistema solo, ma questo è un caso particolare; infatti il fatto che le particelle siano indipendenti ora non implica che lo siano sempre state, ci potrebbe essere stata qualche

interazione nel passato e ciò implica che $\psi(x, X\dots)$ non si possa scrivere come un semplice prodotto di funzioni indipendenti.

Ovviamente anche se l'azione S non compare in forma $S[x, X] = S_x[x] + S_X[X]$ c'è spesso una trasformazione che rende il sistema separabile. Dato che l'azione assume la stessa forma sia in meccanica quantistica che in meccanica classica qualsiasi trasformazione che renda separabile il sistema classico rende separabile anche il sistema quantistico.

2.11 Sistemi non separabili

L'analisi dell'ampiezza di probabilità può diventare molto complicata quando un problema contiene più di una variabile e non è possibile separare il sistema. Consideriamo il Kernel descritto in (2.73) possiamo riscriverlo come

$$K(b, a) = \int_a^b \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt + \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{M}{2} \dot{X}^2 dt - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x, X, t) dt\right) Dx(t) DX(t) \quad (2.77)$$

Supponiamo di riuscire a svolgere l'integrale sul cammino $X(t)$. Possiamo scrivere il risultato come

$$K(b, a) = \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt\right) T[x(t)] Dx(t) \quad (2.78)$$

Dove

$$T[x(t)] = \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{M}{2} \dot{X}^2 - V(x, X, t)\right) dt\right) DX(t) \quad (2.79)$$

Integrare su tutti i cammini concessi alla particella X produce un funzionale T , descritto in (2.79), che indica l'ampiezza che la particella X si sposti dal punto iniziale X_a al punto finale X_b sotto l'influenza del potenziale V . Questo potenziale, che dipende sia da X che da x , è calcolato assumendo che $x(t)$ sia una traiettoria fissata mentre $X(t)$ spazia tra tutti i cammini possibili. Quindi è il potenziale per la particella X mentre la particella x si sta muovendo lungo una specifica traiettoria. Chiaramente questa ampiezza T dipende dalla traiettoria scelta $x(t)$, quindi diciamo che è un funzionale di $x(t)$. L'ampiezza totale è calcolata infine sommando su tutti i cammini dello spazio x un funzionale che consiste nel prodotto di T con il Kernel per la particella libera $x(t)$.

Quindi l'ampiezza K è, come quelle viste finora, una somma di ampiezze di tutte le possibili alternative. Ciascuna di queste ampiezze è a sua volta un prodotto di due ampiezze minori. La prima di queste, T , è l'ampiezza che la particella X vada dal suo punto iniziale al punto finale, mentre x ha una traiettoria specifica. Sommando infine su tutte le traiettorie otteniamo l'ampiezza finale.

2.12 Formula di Feynman-Kac

Non è ancora chiaro come si possa, dalla conoscenza del Kernel, passare alla conoscenza di autofunzioni ed autovalori dell'energia, un concetto di fondamentale importanza in meccanica quantistica.

In forma operatoriale la funzione di Green dipendente dal tempo (per H indipendente dal tempo) è

$$G(t, 0) = \theta(t) \exp(-iHt/\hbar) \quad (2.80)$$

Chiaramente abbiamo che

$$K(x, t; y, 0) = \langle x | G(t) | y \rangle \quad (2.81)$$

Supponiamo ora di avere un insieme completo di autostati dell'energia $|n\rangle$, $n = 0, 1, \dots$ con

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (2.82)$$

Che corrispondono alle autofunzioni

$$u_n(x) = \langle x | n \rangle \quad (2.83)$$

quindi abbiamo che

$$\langle x | G(t) | y \rangle = \sum_n \langle x | n \rangle \langle n | e^{-iHt/\hbar} | y \rangle = \sum_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} u_n^*(y) \quad (2.84)$$

Questa formula è di grande utilità in quanto permette di darci informazioni circa i livelli di energia e le funzioni d'onda.

È di grande interesse anche la trasformata di Fourier di Eq(2.65)

$$\tilde{G}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{izt/\hbar} G(t) dt = \int_0^{\infty} e^{i(z-H)t/\hbar} dt \quad (2.85)$$

Per $Im z > 0$ abbiamo

$$\tilde{G}(z) = \frac{i\hbar}{z - H} \quad (2.86)$$

Ci sono singolarità in $Im z = 0$ in quanto lo spettro di H è reale. Applicando ora la trasformata di Fourier ad Eq (2.69) otteniamo

$$\tilde{K}(x, y; z) = i\hbar \sum_n \frac{u_n(x) u_n^*(y)}{z - E_n} \quad (2.87)$$

Quindi per Hamiltoniane con spettro discreto identifichiamo i poli nell'energia del Kernel con lo spettro dell'Hamiltoniana, ed i residui con le funzioni d'onda.

Dall' Eq(2.69) segue la formula di Feynman-Kac, che lega il comportamento asintotico ($t \rightarrow -i\infty$) della funzione di Green con l'energia di ground state.

In Eq(2.69) poniamo $y = x$ e integriamo su x ottenendo

$$\int K(x, t; x, 0) dx = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \int dx |u_n(x)|^2 = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \quad (2.88)$$

Analizziamo questa equazione per tempi immaginari t ovvero chiamiamo $\frac{it}{\hbar} = \tau$.

Per τ molto grande la somma nel membro di destra sarà dominato dallo stato ad energia più basso, abbiamo quindi che

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{E_0 \tau} \int K(x, -i\hbar\tau; x, 0) = 1 \quad (2.89)$$

Equazione valida per Hamiltoniane con stato fondamentale non degenere (altrimenti basta mettere il numero di degenerazione dello stato fondamentale nel membro di destra). Se avessimo preso il logaritmo da ambo i membri prima di prendere il limite avremmo ottenuto

$$E_0 = - \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \log \int dx K(x, -i\hbar\tau; x, 0) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} -\frac{1}{\tau} \log \text{Tr} e^{-\tau H} \quad (2.90)$$

Questa è la formula di Feynman-Kac ed è un ottimo metodo per calcolare le energie dello stato fondamentale, in quanto non c'è bisogno di conoscere esattamente il Kernel per il caso in esame ma solo un particolare limite.

Possiamo applicare quanto abbiamo visto al caso dell'oscillatore armonico. In quel caso il Kernel era

$$K(x, t; y) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega t)}} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega t)} [(x^2 + y^2) \cos(\omega t) - 2xy]\right] \quad (2.91)$$

Usando Eq(2.73) abbiamo che

$$\sum_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} = \int dx K(x, t; x) \quad (2.92)$$

Otteniamo un integrale gaussiano che può essere svolto senza problemi ottenendo

$$\sum_n e^{-iE_n t/\hbar} = \frac{1}{2i} \left[\sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \right]^{-1} \quad (2.93)$$

Ma esplicitando il seno otteniamo

$$\frac{1}{2i} \left[\sin(\omega t/2) \right]^{-1} = \frac{\exp(-\frac{1}{2}i\omega t)}{1 - \exp(-i\omega t)} = \exp(-\frac{1}{2}i\omega t) \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-in\omega t) \quad (2.94)$$

Comparando questa espressione con il membro di sinistra riconosciamo subito

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.95)$$

2.13 Diagrammi di Feynman

Per molti potenziali che si incontrano in meccanica quantistica non è possibile svolgere il Path Integral in maniera esatta analiticamente. Per ciò in questo capitolo andiamo a discutere dell'espansione perturbativa.

Supponiamo che la particella si stia muovendo sotto l'azione di un potenziale $V(x, t)$. Il Kernel tra i punti a e b è

$$K_V(b, a) = \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t)\right) dt\right) Dx(t) \quad (2.96)$$

Usiamo il pedice K_V per ricordare che la particella si sta muovendo nel potenziale V . Usiamo K_0 per indicare il Kernel per la particella libera.

Supponiamo ora che il potenziale sia piccolo, o, più precisamente, che l'integrale nel tempo del potenziale sia piccolo comparato con \hbar . Allora possiamo espandere l'esponenziale in Eq(2.81) scrivendo

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x, t) dt\right) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x, t) dt + \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x, t) dt\right)^2 + \dots \quad (2.97)$$

Usando questa espansione in Eq(2.81) abbiamo che

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) + K^1(b, a) + K^2(b, a) + \dots \quad (2.98)$$

dove

$$K_0(b, a) = \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt\right) Dx(t) \quad (2.99)$$

$$K^1(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt\right) \int_{t_a}^{t_b} V(x(s), s) ds Dx(t) \quad (2.100)$$

$$K^2(b, a) = -\frac{1}{2\hbar^2} \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt\right) \int_{t_a}^{t_b} V(x(s), s) ds \int_{t_a}^{t_b} V(x(s'), s') ds' Dx(t) \quad (2.101)$$

E così via.

Studiamo ora in dettaglio il Kernel K^1 . Possiamo scrivere

$$K^1(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} F(s) ds \quad (2.102)$$

dove abbiamo che

$$F(s) = \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt\right) V(x(s), s) Dx(t) \quad (2.103)$$

Cerchiamo ora di capire cosa rappresenta $F(s)$. È la somma su tutti i cammini dell'ampiezza di particella libera. Tuttavia ciascun cammino è pesato dal potenziale $V(x(s), s)$ valutato al tempo s . L'unica caratteristica del cammino $x(t)$ che è interessata in questo particolare V è la posizione del cammino al tempo $t = s$. Questo significa che prima e dopo il tempo s i cammini interessati in $F(s)$ sono quelli di una particella libera, come mostrato in Fig 2.6. Possiamo ora dividere il cammino in due parti, una prima del tempo

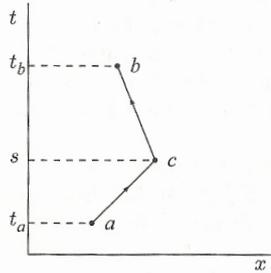


Figura 2.6: Una particella che parte da a e si muove fino a c come particella libera, dove è scatterata dal potenziale $V(x(s), s) = V_c$, infine arriva in b come particella libera. Se tale ampiezza è integrata su tutte le possibili posizioni del punto c otteniamo il termine del primo ordine nella perturbazione

$t = s$ ed una dopo. Assumiamo che ciascun cammino attraversa il punto x_c al tempo di divisione, integreremo poi su x_c . Se denotiamo con $x_c(s)$ con c allora la somma su tutti i cammini può essere scritta come $K_0(b, c)K_0(c, a)$. Ciò implica che $F(s) = F(t_c)$ può essere scritto come

$$F(t_c) = \int_{-\infty}^{\infty} K_0(b, c)V(x_c, t_c)K_0(c, a)dx_c \quad (2.104)$$

Sostituendo in Eq(2.88) abbiamo che

$$K^1(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \int_{-\infty}^{\infty} K_0(b, c)V(c)K_0(c, a)dx_c dt_c \quad (2.105)$$

Vediamo che in questo modo il path integral in Eq(2.85) viene valutato con un integrale ordinario. L'interazione tra il potenziale e la particella viene chiamata scattering. Quindi diciamo che il potenziale scattera la particella e che l'ampiezza di scattering dal potenziale è $-\frac{i}{\hbar}V$ per unità di volume e tempo. Con questa interpretazione possiamo descrivere K_v nel modo seguente. K_v è ovviamente una somma di modi alternativi con i quali la particella può muoversi dal punto a al punto b . Le alternative sono:

- La particella non subisce alcuno scattering $K_0(b, a)$

- La particella subisce uno scattering $K^1(b, a)$
- la particella subisce due scattering $K^2(b, a)$
- Etc.

In accordo con questa interpretazione i vari cammini della particella sono mostrati in Fig 2.7. Usando gli stessi ragionamenti possiamo scrivere il kernel

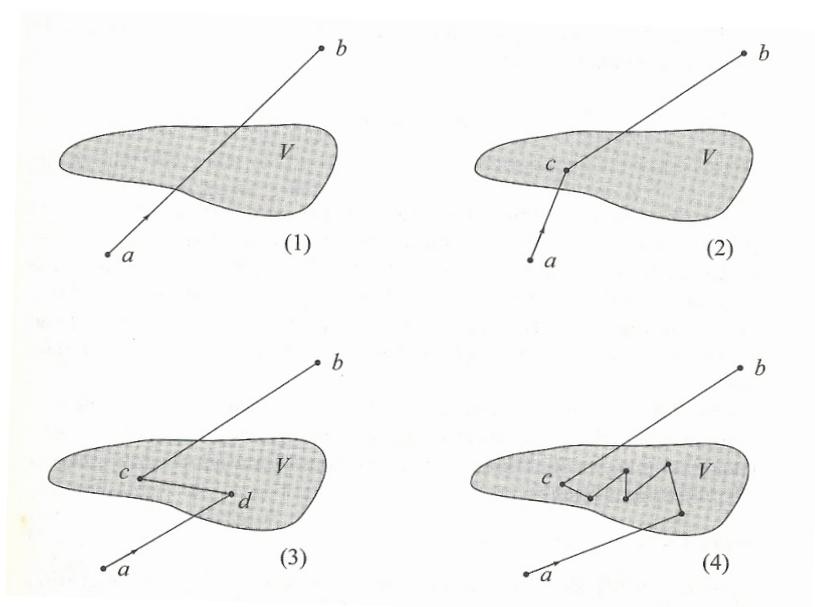


Figura 2.7: In (1) una particella si muove da a a b senza essere scaterata. L'ampiezza è $K_0(b, a)$. In (2) la particella viene scaterata una volta in c , mentre si muove nel potenziale V . L'ampiezza in questo caso è $K^1(b, a)$. Eccetera

K^2 per un doppio scattering come

$$K^2(b, a) = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int \int K_0(b, c)V(c)K_0(c, d)V(d)K_0(d, a)d\tau_{cd\tau_d} \quad (2.106)$$

Dove ovviamente vale che $d\tau = dxdt$. Questa importante formula significa che la particella si muove come una particella libera da a a d . In d la particella viene scaterata dal potenziale $V(d)$ in quel punto. Poi si muove ancora come una particella libera da d a c dove viene scaterata dal potenziale $V(c)$. Infine si muove come una particella libera da c a b .

Capitolo 3

Trasformazione di Stiefel-Kustaanheimo

Il risultato finale che vogliamo raggiungere è di risolvere l'integrale sui cammini per l'atomo di idrogeno. La lagrangiana per tale sistema è

$$L = \frac{\mu}{2} \dot{x}^2 + \frac{Ze^2}{r} \quad (3.1)$$

Notiamo subito che una lagrangiana di questo tipo ha una divergenza del tipo $\frac{1}{r}$ che rende il Kernel non integrabile. In questo capitolo studiamo quindi in dettaglio la trasformazione di Stiefel-kustaanheimo (KS), che mostra una relazione molto interessante tra i due più importanti problemi elementari: il problema di Keplero e l'oscillatore armonico. È notevole che le singolarità nel problema a due corpi, vengano trasformati in punti regolari dell'oscillatore armonico.

Eulero per primo notò che le equazioni del moto per il problema di Keplero $1D$ potevano essere ricondotte a quelle di un oscillatore armonico monodimensionale [9] grazie ad un appropriato cambiamento delle coordinate spaziali e temporali. Generalizzando questo approccio, Levi-Civita [10] regolarizzò il problema di Keplero in $2D$, riconducendolo ad un oscillatore armonico bidimensionale.

I tentativi di generalizzare questo procedimento in $3D$ fallirono fino al 1964, quando Kustaanheimo e Stiefel [11] [12] proposero l'introduzione di quattro coordinate, anziché tre, trasformando così il problema di Keplero $3D$ in un oscillatore armonico quadridimensionale.

Introduciamo prima, brevemente, la trasformazione di Levi-Civita, per poi studiare in dettaglio la trasformazione in \mathbb{R}^3 di Stiefel-Kustaanheimo che è il caso che ci interessa maggiormente.

Consideriamo il moto di una particella in R^2 di massa m posizionata in

$$\mathbf{x} = \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{Bmatrix} \quad (3.2)$$

soggetta ad un potenziale del tipo $-\frac{Ze^2}{r}$. La posizione della particella verrà indicata dalla coordinata complessa $\mathbf{x} = x_1 + ix_2 \in \mathbb{C}$. Le equazioni del moto sono allora

$$\ddot{\mathbf{x}} + \frac{Ze^2}{\mu} \frac{\mathbf{x}}{r^3} = 0 \quad r = |\mathbf{x}| \quad (3.3)$$

Dove il punto indica una derivata rispetto al tempo fisico t . Inoltre vale l'equazione di conservazione dell'energia

$$\frac{\mu}{2} |\dot{\mathbf{x}}|^2 - \frac{Ze^2}{r} = -E \quad (3.4)$$

Il primo passo è quello di introdurre un tempo fittizio τ che soddisfi l'equazione differenziale

$$dt = \frac{r}{c} d\tau \quad (3.5)$$

Grazie alle regole di differenziazione otteniamo

$$\frac{d}{dt} = cr^{-1} \frac{d}{d\tau} \quad \frac{d^2}{dt^2} = c^2 \left(r^{-2} \frac{d^2}{d\tau^2} - r' r^{-3} \frac{d}{d\tau} \right) \quad (3.6)$$

Usando queste relazioni le (3.3) e (3.4) vengono trasformate in

$$c^2 (r\mathbf{x}'' - r'\mathbf{x}') + \frac{Ze^2}{\mu} \mathbf{x} = 0 \quad \frac{\mu}{2} c^2 r^{-2} |\mathbf{x}'|^2 - \frac{Ze^2}{r} = -E \quad (3.7)$$

Ora rappresentiamo la coordinata fisica complessa \mathbf{x} come il quadrato \mathbf{u}^2 di una variabile $\mathbf{u} = u_1 + iu_2 \in \mathbb{C}$

$$\mathbf{x} = \mathbf{u}^2 \quad (3.8)$$

O, equivalentemente

$$x_1 = u_1^2 - u_2^2 \quad x_2 = 2u_1 u_2 \quad (3.9)$$

Che in notazione matriciale può essere scritta come

$$\begin{Bmatrix} dx_1 \\ dx_2 \end{Bmatrix} = 2 \begin{Bmatrix} u_1 & -u_2 \\ u_2 & u_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} du_1 \\ du_2 \end{Bmatrix} \quad (3.10)$$

Notiamo che ogni elemento della matrice è una funzione lineare omogenea dei parametri u_1 e u_2 . Inoltre si verifica facilmente che la matrice definita in Eq(3.10) è ortogonale, infatti il prodotto scalare delle due righe si annulla, e ciascuna ha norma $(u_1^2 + u_2^2)$. Da ciò segue che

$$dx_1^2 + dx_2^2 = 4(u_1^2 + u_2^2)(du_1^2 + du_2^2) \quad (3.11)$$

Questa proprietà è essenzialmente equivalente al fatto che la mappa definita in (3.8) è conforme. Andando ad esprimere le quantità \mathbf{x}' e \mathbf{x}'' in funzione di \mathbf{u} , \mathbf{u}' e \mathbf{u}'' , e sostituendole in Eq(3.7) otteniamo

$$2r\mathbf{u}'' + \left(\frac{Ze^2}{\mu c^2} - 2|\mathbf{u}'|^2 \right) \mathbf{u} = 0 \quad 2\mu c^2 |\mathbf{u}'|^2 = Ze^2 - rh \quad (3.12)$$

Dalle quali, con semplici passaggi algebrici giungiamo a

$$\mathbf{u}'' + \omega^2 \mathbf{u} = 0 \quad (3.13)$$

Che rappresenta l'equazione di un oscillatore armonico in 2 dimensioni.

È estremamente interessante come, grazie ad una trasformazione, siamo passati dal problema di Keplero all'oscillatore armonico, sistemi apparentemente molto differenti ma che hanno delle profonde analogie, sono infatti entrambi massimamente superintegrabili, e presentano orbite chiuse. Inoltre, in meccanica quantistica entrambi condividono una degenerazione sugli autovalori di L^2 .

Andiamo ora a studiare la trasformazione di Stiefel-Kustaanheim, che, come quella di Levi-Civita, ha la proprietà di linearizzare le equazioni del moto del problema a due corpi.

A prima vista non sembra presentare grosse difficoltà generalizzare in \mathbb{R}^3 il procedimento di Levi-Civita, tuttavia, come dimostrato da Hurwitz [13], una trasformazione del tipo (3.8) può essere realizzata solo in \mathbb{R}^2 , \mathbb{R}^4 ed \mathbb{R}^8 , attraverso matrici intimamente connesse alle regole di moltiplicazione di numeri complessi, quaternioni, ed ottunioni.

Il modo migliore per regolarizzare il problema Kepleriano 3D consiste nell'usare l'algebra dei quaternioni, introdotta da Hamilton [14] per studiare le rotazioni in 3D.

Dati i numeri reali $u_l \in \mathbb{R}$, $l = 1, 2, 3, 4$ l'oggetto

$$\mathbf{u} = u_1 + iu_2 + ju_3 + ku_4 \quad (3.14)$$

viene chiamato quaternione $\mathbf{u} \in \mathbb{U}$ dove \mathbb{U} indica l'insieme dei quaternioni. La somma $iu_2 + ju_3 + ku_4$ è chiamata parte quaternionica di \mathbf{u} , mentre u_1 è la sua parte reale. In analogia al caso di \mathbb{R}^2 il quaternione \mathbf{u} può naturalmente venire associato al vettore $u = (u_1, u_2, u_3, u_4) \in \mathbb{R}^4$.

Il coniugato $\bar{\mathbf{u}}$ di un quaternione è definito come

$$\bar{\mathbf{u}} = u_1 - iu_2 - ju_3 - ku_4 \quad (3.15)$$

Quindi il modulo $|\mathbf{u}|^2$ si ottiene come

$$|\mathbf{u}|^2 = \mathbf{u} \bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}} \mathbf{u} = \sum_{l=1}^{l=4} u_l^2 \quad (3.16)$$

Definiamo inoltre il coniugato star, introdotto da Waldvogel [15], del quaternione $\mathbf{u} = u_1 + iu_2 + ju_3 + ku_4$ come

$$\mathbf{u}^* = u_1 + iu_2 + ju_3 - ku_4 \quad (3.17)$$

Risulterà fondamentale la seguente proprietà, facilmente verificabile

$$(\mathbf{u}\mathbf{v})^* = \mathbf{v}^* \mathbf{u}^* \quad (3.18)$$

Il primo passaggio nella trasformazione di Stiefel-Kustaanheimo è identico al caso in \mathbb{R}^2 , sia quindi $\mathbf{x} = x_1 + ix_2 + jx_3 \in \mathbb{U}$ il quaternione, con componente k nulla, naturalmente associato al vettore posizione $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$. Introducendo il tempo fittizio τ secondo (3.5), trasformando le equazioni del moto, e l'equazione di conservazione dell'energia, si giunge alle stesse equazioni nel caso $2D$ (3.7).

Consideriamo ora la mappa

$$\mathbf{x} = \mathbf{u}\mathbf{u}^* \quad (3.19)$$

Grazie alla proprietà in (3.18) abbiamo che $\mathbf{x}^* = (\mathbf{u}^*)^*\mathbf{u}^* = \mathbf{x}$; quindi \mathbf{x} è effettivamente un quaternione con componente k nulla, può quindi naturalmente venire associato ad un vettore posizione in \mathbb{R}^3 . Esprimendo \mathbf{u} come in Eq(3.14) otteniamo

$$\begin{aligned} x_1 &= u_1^2 - u_2^2 - u_3^2 + u_4^2 \\ x_2 &= 2(u_1u_2 - u_3u_4) \\ x_3 &= 2(u_1u_3 + u_2u_4) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Che in notazione matriciale può essere scritta come

$$\begin{Bmatrix} dx_1 \\ dx_2 \\ dx_3 \end{Bmatrix} = 2 \begin{Bmatrix} u_1 & -u_2 & -u_3 & u_4 \\ u_2 & u_1 & -u_4 & -u_3 \\ u_3 & u_4 & u_1 & u_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} du_1 \\ du_2 \\ du_3 \\ du_4 \end{Bmatrix} \quad (3.21)$$

La trasformazione (3.19) o (3.20) è una mappa da \mathbb{R}^4 in \mathbb{R}^3 , quindi lascia un grado di libertà non determinato. Nella trasformazione di Stiefel-Kustaanheimo si usa questo grado di libertà per ereditare le proprietà conformi della mappa di Levi-Civita, imponendo la relazione bilineare

$$2(u_4du_1 - u_3du_2 + u_2du_3 - u_1du_4) = 0 \quad (3.22)$$

tra il vettore $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3, u_4)$ ed il suo differenziale $d\mathbf{u}$. In questo modo la trasformazione (3.19) diventa una mappa lineare con una matrice A ortogonale, non normalizzata

$$A = \begin{Bmatrix} u_1 & -u_2 & -u_3 & u_4 \\ u_2 & u_1 & -u_4 & -u_3 \\ u_3 & u_4 & u_1 & u_2 \\ u_4 & -u_3 & u_2 & -u_1 \end{Bmatrix} \quad (3.23)$$

Vediamo alcune importanti proprietà di questa trasformazione:

- Differenziando (3.19) otteniamo

$$d\mathbf{x} = d\mathbf{u} \mathbf{u}^* + \mathbf{u} d\mathbf{u}^* \quad (3.24)$$

mentre la (3.22) prende la forma di una relazione di commutazione

$$\mathbf{u} d\mathbf{u}^* - d\mathbf{u} \mathbf{u}^* = 0 \quad (3.25)$$

Combinando queste due relazioni otteniamo l'elegante risultato

$$d\mathbf{x} = 2\mathbf{u} d\mathbf{u}^* \quad (3.26)$$

Quindi la relazione bilineare (3.22) è equivalente a richiedere che la mappa tangenziale $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{u}\mathbf{u}^*$ si comporti come in un'algebra commutativa

- il piano u_1, u_2 dello spazio parametrico \mathbb{R}^4 è mappato nel piano x_1, x_2 dello spazio fisico \mathbb{R}^3 , secondo le regole (3.9) di Levi-Civita. Quindi questa trasformazione non è altro che una continuazione di quella di Levi-Civita
- Come nella trasformazione di Levi-Civita abbiamo che

$$dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2 = 4(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 + u_4^2)(du_1^2 + du_2^2 + du_3^2 + du_4^2) \quad (3.27)$$

È bene ricordare che tale relazione rimane vera solo se alla matrice che compare in (3.21) è aggiunta una riga secondo (3.22). La mappa che viene usata nella trasformazione di Stiefel-Kustaanheimo è quindi conforme.

Vediamo quindi come procedere nella regolarizzazione del problema a due corpi di Keplero $3D$.

Da (3.19), derivando, e tenendo presente (3.22) otteniamo

$$\mathbf{x}' = 2\mathbf{u}\mathbf{u}^{*'} \quad \mathbf{x}'' = 2\mathbf{u}\mathbf{u}^{*''} + 2\mathbf{u}'\mathbf{u}^{*'} \quad r' = \mathbf{u}'\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}\bar{\mathbf{u}}' \quad (3.28)$$

Sostituendo queste relazioni nelle equazioni del moto con il tempo fittizio τ otteniamo

$$2r\mathbf{u}^{*''} + \left(\frac{Ze^2}{\mu c^2} - 2|\mathbf{x}'|^2\right)\mathbf{u}^* = 0 \quad (3.29)$$

Viceversa, sostituendo (3.28) nell'equazione di conservazione dell'energia otteniamo

$$2\mu c^2 |\mathbf{u}'|^2 = Ze^2 - rh \quad (3.30)$$

Infine possiamo eliminare il fattore non lineare $|\mathbf{u}'|^2$ tramite semplici passaggi algebrici, ottenendo le equazioni di un oscillatore armonico quadridimensionale.

$$\mathbf{u}'' + \omega^2 \mathbf{u} = 0 \quad u \in \mathbb{U} \quad (3.31)$$

Il risultato appena ottenuto è in perfetto accordo con il caso in 2D.

La trasformazione di Stiefel-Kustaanheimo è di fondamentale importanza per quanto riguarda le perturbazioni al problema di Keplero, quindi, ad esempio, per lo studio della stabilità del sistema solare. Noi invece la applicheremo all'atomo di idrogeno, per trasformare il Kernel non integrabile con un potenziale di tipo $1/r$ nel propagatore già risolto dell'oscillatore armonico.

Capitolo 4

Atomo d'Idrogeno

Negli anni recenti la formulazione di Feynman della meccanica quantistica ha trovato numerose applicazioni, soprattutto per quanto riguarda la fisica delle particelle e i sistemi a molti corpi. Tuttavia, come abbiamo visto, solo pochi esempi possono essere risolti analiticamente, infatti la maggior parte dei problemi studiati con l'equazione di Shrodinger non sono così semplici in termini di propagatori. Ora studiamo in dettaglio la risoluzione "alla Feynman", dovuta a Kleinert [16], di uno dei sistemi più semplici studiabili in tre dimensioni: l'atomo di idrogeno.

Una definizione alternativa del Kernel, rispetto a quelle viste precedentemente, involve lo spazio delle fasi, secondo cui abbiamo

$$K(\mathbf{x}_b t_b; \mathbf{x}_a t_a) = \int_{x_a}^{x_b} D\mathbf{x} \int \frac{D\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \exp\left(i \int_{t_a}^{t_b} dt \left(p\dot{\mathbf{x}} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - V(\mathbf{x})\right)\right) \quad (4.1)$$

Tuttavia ci sono dei casi in cui (4.1) ed (2.8) non sono equivalenti, ad esempio se la massa della particella m non è costante ma piuttosto una funzione dello spazio $m(x)$. Ma nel caso in questione non incontriamo questa difficoltà.

Eseguiamo ora il primo passo della trasformazione di Stiefel-Kustaanheimo, parametrizziamo quindi il cammino $x(t)$ non in termini del tempo reale fisico, ma usando il nuovo parametro τ definito da (3.5). Dopo aver eseguito questo cambiamento di coordinate (4.1) diventa

$$K(\mathbf{x}_b t_b; \mathbf{x}_a t_a) = \int D\mathbf{x}(\tau) \frac{D\mathbf{p}(\tau)}{(2\pi)^3} \exp\left(i \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \mathbf{p}\mathbf{x}' - \mathbf{r}H(\mathbf{p}, \mathbf{x})\right) \quad (4.2)$$

Il tempo iniziale t_a e quello finale t_b sono fissi, mentre i parametri τ_a e τ_b sono dipendenti dal cammino, dobbiamo quindi inserire in (4.2) la condizione

$$t_b - t_a = \int_{\tau_a}^{\tau_b} \mathbf{r} d\tau \quad (4.3)$$

usando la delta di Dirac come segue

$$K(\mathbf{x}_b t_b; \mathbf{x}_a t_a) = \mathbf{r}_b \int_{\tau_a}^{\infty} d\tau_b \delta\left(t_b - t_a - \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \mathbf{r}\right) \int_{x_a}^{x_b} D\mathbf{x} \int \frac{D\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \exp\left(i \int_{\tau_a}^{\tau_b} (\mathbf{p}\mathbf{x}' - \mathbf{r}H(\mathbf{p}, \mathbf{x})) d\tau\right) \quad (4.4)$$

Usando la rappresentazione di Fourier per la funzione delta otteniamo

$$K(\mathbf{x}_b, \tau_b; \mathbf{x}_a, \tau_a) = \mathbf{r}_b \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{-iE(\tau_b - \tau_a)} \int_{\tau_a}^{\infty} d\tau_b \kappa^E(\mathbf{x}_b, \tau_b; \mathbf{x}_a, \tau_a) \quad (4.5)$$

Dove

$$\kappa^E(\mathbf{x}_b, \tau_b; \mathbf{x}_a, \tau_a) = \int_{x_a}^{x_b} D\mathbf{x} \frac{D\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \exp\left(i \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau (\mathbf{p}\mathbf{x}' - H^E(\mathbf{p}, \mathbf{x}))\right) \quad (4.6)$$

È il propagatore di un problema ausiliario che è governato da una pseudo hamiltoniana dipendente dall'energia

$$H^E(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \mathbf{r}(H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) - E) \quad (4.7)$$

Dove il movimento avviene lungo un tempo fittizio τ . In altre parole H^E è l'operatore coniugato al parametro τ e genera traslazioni infinitesime lungo l'asse τ .

Applichiamo la trasformata di Fourier a (4.5); in questo modo, applicando la formula di Feynman-Kac, possiamo trovare gli autovalori dell'energia semplicemente analizzando i poli di

$$K(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a | E) = \mathbf{r}_b \int_{\tau_a}^{\infty} d\tau_b \kappa^E(\mathbf{x}_b, \tau_b; \mathbf{x}_a, \tau_a) \quad (4.8)$$

Dove è il propagatore dato dall'integrale

$$\kappa^E(\mathbf{x}_b, \tau_b; \mathbf{x}_a, \tau_a) = e^{ie^2(\tau_b - \tau_a)} \int D\mathbf{x} \frac{D\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \exp\left(i \int_{s_a}^{s_b} ds \left(\mathbf{p}\mathbf{x}' - \frac{r\mathbf{p}^2}{2m} - rE\right)\right) \quad (4.9)$$

Cambiamo coordinate, come visto nella trasformazione di Stiefel-Kustaanheimo, dove abbiamo che

$$d\mathbf{x} = A d\mathbf{u} \quad (4.10)$$

Dove $d\mathbf{x} = (dx_1, dx_2, dx_3, dx_4)$, $d\mathbf{u} = (du_1, du_2, du_3, du_4)$ mentre A è la matrice definita in (3.23). Come cambiano i momenti coniugati? Chiaramente vogliamo che la trasformazione sia canonica quindi, secondo il teorema di Louville [17] il volume dello spazio delle fasi deve rimanere invariato, per le proprietà viste nel capitolo 3 abbiamo che

$$\mathbf{p} = \frac{1}{4r} A \mathbf{p}_u \quad (4.11)$$

infatti, in questo modo l'elemento di volume nello spazio dei momenti è dato da

$$d^4\mathbf{p} = \frac{1}{16r^2} d^4\mathbf{p}_u \quad (4.12)$$

Prima di poter scrivere il Kernel (4.8) in termini delle nuove variabili dobbiamo trovare un modo di inserirci la coordinata x_4 senza alterare il risultato finale.

Ciò può essere fatto considerando che

$$\int Dx_4 \frac{Dp_4}{2\pi} e^{i \int d\tau p_4 x'_4} = \delta(x_4(\tau_b) - x_4(\tau_a)) \quad (4.13)$$

Che rappresenta il propagatore di una particella che si muove con un Hamiltoniana nulla. Integrando in dx_4 otteniamo

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_4(s_b) \int Dx_4 \frac{Dp_4}{2\pi} e^{i \int d\tau p_4 x'_4} = 1 \quad (4.14)$$

Possiamo ora inserire moltiplicativamente questo fattore in (4.9). Tuttavia (4.14) rimane valida anche nel caso di un propagatore con un Hamiltoniana del tipo $H = \frac{r p_4^2}{2m}$.

Possiamo ora riscrivere (4.9) come

$$\begin{aligned} \kappa^E(\mathbf{x}_b, \tau_b; \mathbf{x}_a, \tau_a) = & \int_{-\infty}^{\infty} dx_4(s_b) e^{ie^2(s_b-s_a)} \int_{x_a}^{x_b} D\mathbf{x} Dx_4 \int \frac{D^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{Dp_4}{2\pi} \\ & \exp\left(i \int_{s_a}^{s_b} ds \left(\mathbf{p}\mathbf{x}' + p_4 x'_4 - \frac{r\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{rp_4^2}{2m} - rE \right)\right) \end{aligned} \quad (4.15)$$

Cambiando le coordinate e i momenti come in (4.10) e (4.11) riscriviamo il propagatore come

$$\kappa^E = \frac{1}{16r_b^2} \int dx_4(s_b) e^{ie^2(s_b-s_a)} \int Du \frac{Dp_u}{(2\pi)^4} \exp\left(i \int_{s_a}^{s_b} ds \left(p_u u' - \frac{p_u^2}{2m} - u^2 E \right)\right) \quad (4.16)$$

Dove il fattore $\frac{1}{16r_b^2}$ deriva dal fatto che eseguiamo un'integrazione in più sullo spazio dei momenti rispetto a quelle sullo spazio delle coordinate, dato che non eseguiamo l'integrazione su $\mathbf{x}_{N+1} = \mathbf{x}_b$ essendo la coordinata fissata del punto finale. Inserendo (4.16) in (4.8) otteniamo

$$K(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a | E) = \frac{1}{16r_b} \int_{\tau_b}^{\infty} d\tau_b \kappa^E \quad (4.17)$$

Notiamo la profonda somiglianza con il propagatore dell'oscillatore armonico quadridimensionale, l'unica importante differenza che notiamo è l'integrale

nella variabile dx_4 che può essere svolto usando coordinate sferiche, eseguendo quindi il cambiamento di coordinate $(u_1, u_2, u_3, u_4) \rightarrow (r, \theta, \phi, \alpha)$. Abbiamo quindi che

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_4(s_b)}{r} = \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha_b = \int_0^{4\pi} d\alpha_b \sum_{\alpha_b \rightarrow \alpha_b + 2\pi n} \quad (4.18)$$

Grazie a quanto visto nelle sezioni precedenti, possiamo svolgere il propagatore dell'oscillatore armonico, e integrare come visto in (4.18) ottenendo

$$K(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a; E) = -\frac{m}{p_0^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{1 - \frac{\nu}{n}} \int_0^{2\pi} d\alpha_b \left(\sqrt{\frac{p_0}{8n}} \psi_{n_1 n_2 n_3 n_4}(u_b) \right) \left(\frac{p_0}{8n} \psi_{n_1 n_2 n_3 n_4}^*(u_a) \right) \quad (4.19)$$

Dove abbiamo che $\nu = \left(\frac{me^4}{2E}\right)^{1/2}$ e $p_0 = (-2mE)^{1/2}$ (per i dettagli del calcolo dell'integrale si veda [18]).

In questa somma possiamo facilmente riconoscere i poli, che sono situati ad energie $E_n = -\frac{me^4}{2n^2}$, mentre i residui rappresentano le funzioni d'onda espresse in numeri quantici diversi da quelli convenzionali.

Bibliografia

- [1] Feynman R.P. *Rev. Mod. Phys.* 20, 367 (1948)
- [2] P.A.M Dirac *The Lagrangian in Quantum Mechanics* Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion 3, pp 64-72 (1933)
- [3] Landau L. D. Lifshits E. M. *Fisica Teorica 1, Meccanica* Editori Riuniti pp. 29-30. (1975)
- [4] Schulman L. S. *Techniques and Applications of Path Integration* Wiley, New York (1981)
- [5] Landau L. D. Lifshits E. M. *Fisica Teorica 1, Meccanica* Editori Riuniti pp. 31. (1975)
- [6] Landau L. D. Lifshits E. M. *Fisica Teorica 2, Teoria Dei Campi* Editori Riuniti pp. 69-75. (1976)
- [7] Sakurai J.J. *Modern Quantum Mechanics* Zanichelli pp. 130 (1990)
- [8] Feynman R.P. Hibbs A. R. *Quantum Mechanics and Path Integrals* Dover pp.43 (1965)
- [9] Euler L. *Novi Comm. Acad. Sci. Petrop* **11** 144 (1765)
- [10] Levi-Civita T. *Opere matematiche* **2** (1956)
- [11] Kustaanheimo P. *Annales Universitatis Turkuensis. Ser. AI.* **73** (1964)
- [12] Kustaanheimo P. e Stiefel E. *J. Reine Angew. Mathematik* **218** 204 (1965)
- [13] Hurwitz A. *Ueber die Komposition quadratischer Formen von beliebig vielen Variablen*, math. Werke II pp. 565-571 (1898) tradotto in inglese da Yuval Filmus
- [14] Hamilton W. R. *On quaternions, or a new system of imaginaries in algebra*, Philosophical Magazine 25, 489-495 (1844)

- [15] Waldvogel J *Order and chaos in satellite encounters*, in Proceedings of the conference *From Order to Disorder in Gravitational N-Body Dynamical Systems*, Cortina D'Ampezzo Italia, Settembre 2003, editros Steves B A, Maciejewski A J, Hendry M (Springer, Dordrecht), 233-254 (2006)
- [16] Kleinert H. Duru I.H. *Solution of the path integral for the H-Atom* Physics Letters 84B, number 2 (1979)
- [17] Landau L. D. Lifshits E. M. *Fisica Teorica 1, Meccanica* Editori Riuniti pp. 209-214. (1975)
- [18] Kleinert H. Duru I.H. *Quantum Mechanics of H-atom from Path Integrals* Fortschritte der Physik 30, pp 401-435 (1982)